

ПОСТРОЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ КРИВЫХ Si—O_{мост} С УЧЕТОМ БЛИЖАЙШЕГО ОКРУЖЕНИЯ МЕТОДОМ MNDO В СИСТЕМЕ Si—O—B

Л.А. Трофимова, Л.И. Воронова
e-mail: voronova2001@mail.ru

Курганский государственный университет, г.Курган, Россия

Независимое определение параметров потенциальных функций, учитывающих ионно-ковалентные взаимодействия между частицами, в пределах имеющихся компьютерных мощностей возможно с помощью квантово-химических методов, основанных на расчетах электронной структуры. Одним из таких методов является метод MNDO (Modified neglect of diatomic differential overlap).

В работе проведено исследование влияния атомов ближайшего окружения на энергетику элементарного кремнекислородного комплекса. В частности изучалось влияние атома бора, внедренного в сетку кремнезема, на двухцентровую энергию Si—O_{мост}, при условии размещения атома бора в различных координационных сферах мостикового кислорода.

Построение потенциальных кривых проводилось на основе квантово-химического анализа структурных группировок SiBO₆(A₅), Si₂BO₉(A₇), Si₃BO₁₁(A₇), Si₄BO₁₅(A₁₁), состоящих из элементарных структурных комплексов (SiO₄⁴⁻) и (BO₃³⁻). Выявлено, что присутствие атома бора в первой координационной сфере O_{мост} существенно влияет на энергию фиксированной пары атомов E_{Si—O_{мост}}, в том числе и на глубину потенциальной ямы по сравнению с чисто кремнеземными комплексами.

Приведены полученные потенциальные кривые для связей Si—O—(Si) и Si—O—(B)

Ключевые слова: квантово-химический расчет, метод MNDO, потенциальная функция, двухцентровые энергии, ионно-ковалентная модель.

Страниц — 6, **рисунков** — 4.