



Beynəlxalq Konfrans "Fizika-2005" International Conference "Fizika-2005" Международная Конференция "Fizika-2005"

7 - 9
İyun
June 2005
Июнь

səhifə
page 163-164
стр.

Bakı, Azərbaycan

Baku, Azerbaijan

Баку, Азербайджан

ДИАГРАММЫ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОННЫХ ПОЛОС КВАЗИАТОМОВ В КОНДЕНСИРОВАННЫХ ХАЛЬКОГЕНГАЛОГЕНИДАХ -A^{III} B^{VI} C^{VII}

ГАДЖИЕВ С.М., ХАЛИЛОВА Э.Ф., ГАНБАРОВА Е.Т.,
МАМЕДОВА Н.И., АЗМАМЕДОВА Х.М.

*Бакинский Государственный Университет,
кафедра Физической и коллоидной химии
ул. З.Халилова 23, тел.4381049*

В данной работе полученные результаты позволяют воспользоваться атомными значениями коэффициентов Чебышева для постановки компьютерного эксперимента в области прогнозирования возможности существования тех или иных составов халькогалогенидов. Представляется возможным в методе компьютерного эксперимента получить решающие правила-физико-химические свойства-электронное строение.

В силу ортогональности волновых функций s-, p-, d- электронов квазиатомов элементов представляется достаточным аппроксимация $E(k)$ на картах для энергии валентных электронов ортогональными полиномами Чебышева вида:

$$E(k) = \beta_1 P_0(k) + \beta_2 P_1(k) + \beta_3 P_2(k)$$

где $\beta_1, \beta_2, \beta_3$ – инвариантное, линейное и квадратичное изменение коэффициентов Чебышева. Значения полиномов Чебышева соответственно равны:

$$P_0(k) = 1; P_1(k) = k - 7; P_2(k) = k^2 - 14k + 35$$

Таким образом, зная коэффициенты Чебышева для соответствующих значений, рассчитано изменение энергии валентных электронов для полос квазиатомов халькогалогенидов - A^{III}, B^{VI}, C^{VII} [1-3]. Результаты такого расчета электронных карт распределения валентных электронов квазиатомов A^{III}, B^{VI}, C^{VII} приведены на рис. 1-4.

Анализ полученных диаграмм $E(k)$ иллюстрирует факт донорно-акцепторного взаимодействия между атомами - A^{III}, B^{VI}, C^{VII}. Совершенно очевидно, что характер такого донорно-акцепторного взаимодействия можно отнести к трем группам:

1. Характер взаимодействия таков, что 3 электрона квазиатомов A^{III} – элемента из s₁- p₀-полос передаются в валентные полосы B^{VI}, C^{VII}, причем 2 электрона передаются в p-полосу халькогена, а 1 электрон в d- полосу галогена.
2. Лишь часть электронов s₁ (p₀)- полосы атомов A^{III} (около одного электрона) передается в полосу халькогена и галогена в эквивалентных количествах, т.е. около 0,5 эл/атом.
3. Часть (d)- валентных электронов атома халькогена B^{VI} передается в полосу атомов A^{III} – элемента или галогена- C^{VII}.

ВЫВОДЫ

1. Полученные результаты позволят воспользоваться атомными значениями коэффициентов Чебышева для постановки компьютерного эксперимента в области прогнозирования возможности существования тех или иных составов халькогалогенидов.
2. Представляется возможным в методе компьютерного эксперимента получить решающие правила – физико-химические свойства – электронное строение

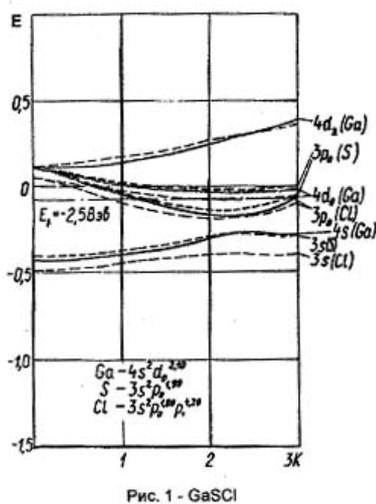


Рис. 1 - GaSCI

Рис. 1 Диаграммы энергетического распределения валентных электронов соединений $A^{III}B^{VI}C^{VII}$

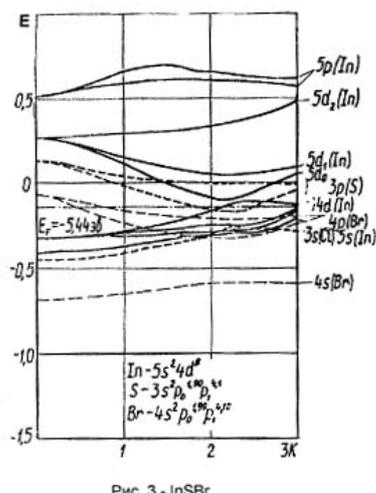


Рис. 3 - InSBr

Рис. 3 Диаграммы энергетического распределения валентных электронов соединений $A^{III}B^{VI}C^{VII}$

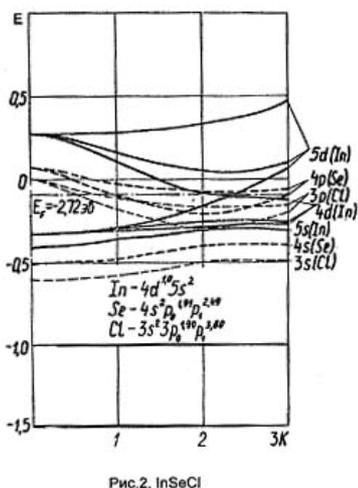


Рис. 2. InSeCl

Рис. 2 Диаграммы энергетического распределения валентных электронов соединений $A^{III}B^{IV}C^{VII}$

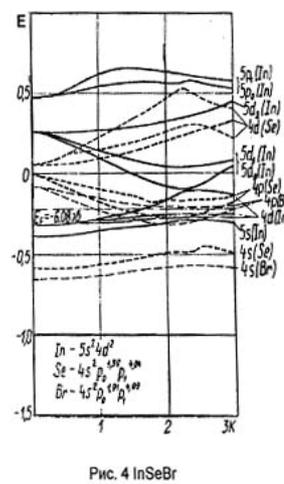


Рис. 4 InSeBr

Рис. 4 Диаграммы энергетического распределения валентных электронов соединений $A^{III}B^{VI}C^{VII}$

- [1]. Самсонов Г.В. конфигурационные представления электронного строения в физическом материаловедении. Киев, Наукова Думка, 1977, с.5-14
- [2]. Gadjiev S.M., Koutolin S.A. Prevision par ordinateur de la composition et des proprietes phisico-chimiques des $A^{III}B^{VI}C^{VII}$ et $A^V B^{VI}C^{VII}$. Campt.Ren.Acad.Sci. de Frans., Paris t.301, s.11, № 5, p.255-57 (1985)
- [3]. Герзанич Е.И. Получение и некоторые оптические свойства сульфобрида стеклообразном и кристаллическом состояниях. Изв. ВУЗ-ов сер. Физика, 1971,2, с.114-116
- [4]. Fenner J, Rabenau A. And Trageser G. Solid state chemistry of thio-, seleno- and tellurhalides representative and transition elements. Advances Inorg. chem. 1980, v.23, p.329-426
- [5]. Mills K.C. Thermodynamiks data for inorganic sulphides, selenides and tellurides. London, Buttermorts, 1974, p.38-56
- [6]. Kniep R., Wilms A., Beister H., Phase relations in GaX-GaY systems, crystal growth, structural relation and optical absorption of intermediate compounds GaXY (X- Se, Te; Y-Cl, Br). Mater. Res. Bull., 1983, v.18, №5, p.615-620.
- [7]. Hardy A., Cottran D. Chemis minerales thiohalogenures de gallium $Ga_9S_8Cl_{11}$ et $Ga_9S_8Br_{11}$ Compt. Rendus Acad. Sci. ser. C, 1966, 262, p.739-742
- [8]. Савицкий Е.М. Проблема прогноза неорганических соединений с помощью ЭВМ. Вестник АН СССР, 1975, №1, с.33-42
- [9]. Корсунский М.И., Генкин Я.И., Завадинский В.Г., Энергия валентных электронов и разделение их на группы. Науково Думка, 1975, с. 25-30
- [10]. S.M. Hajiev, N.A. Rzaeva, E.F. Halilova, L.P. Gulieva, H.M. Mammadova $A^V B^{VI} C^{VII}$ Challohalogenide quasi-atoms electronic strips distributions charts. Applied mathematics and Fuzzy systems №1,2002, p.54-57, Bacou
- [11]. S.M. Hajiev, A. Mirzoeva, N. Musaeva, G. Pugi. Computer forecast of the composition and physical-chemical properties of the A^{III} group challohalogenidhalides. 5-9 avgust 2004 p.681, Kongre. Kars,Turkey.