

МОДЕЛИРОВАНИЕ СВОЙСТВ РЯДА ТУГОПЛАВКИХ ЦЕОЛИТОПОДОБНЫХ СТРУКТУР

Покропивный А.В.

Институт проблем материаловедения им. И.Н.Францевича НАН Украины,
ул. Кржижановского 3, 03142, Киев, Украина, E-mail: apokr@ipms.kiev.ua

Проектирование и последующий синтез новых материалов с необходимым набором свойств является одной из перспективных задач материаловедения.

В данной работе смоделирован ряд новых фаз на основе тугоплавких соединений, таких как углерод, кремний, нитрид бора и карбид кремния. Это пористые кристаллические цеолито-подобные структуры с элементами как нанотрубок так и фуллеренов внутри каркасов. Применялся первопринципный метод расчетов как для кластеров (GAMESS), так и кристаллов (SIESTA). Производился расчет электронного, инфракрасного и рамановского спектров, рентгеновских дифрактограмм, и ряда других свойств. Структура E-фазы нитрида бора рашифрована на основе моделирования нанотрубчатых и фуллерено-подобных кристаллов FAU цеолита (см. Рис.1,f). Оказалось, наиболее близким к известным экспериментальным данным оказывается sp^2/sp^3 гибрид. Структура углеродного содалита (SOD) найдена с помощью сравнения экспериментальных и расчетных данных (см. Рис.1,a).

Проведенные расчеты показали эффективность использования обоих теоретических методов для определения структур и свойств ряда тугоплавких соединений

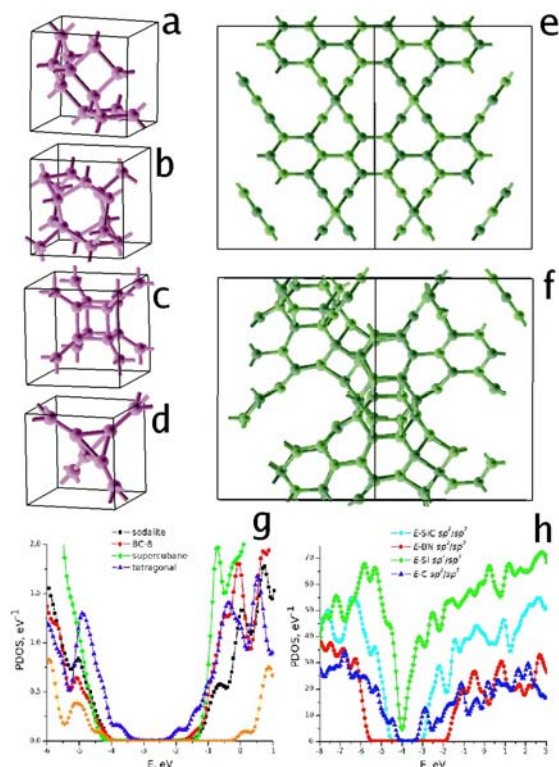


Рис. 1. Структура оптимизированных углеродных кристаллов содалита (a), BC-8 (b), суперкубана (c) и тетрагональной фазы (d), нитрид-борных FAU структур sp^2 (e) и sp^2/sp^3 (f), а также электронная плотность состояний вблизи уровня Ферми (g,h).