

# КВАНТОВО-ХІМІЧНИЙ РОЗРАХУНОК ТЕРМОДИНАМІЧНИХ ПАРАМЕТРІВ ІДЕАЛЬНИХ ТА ДЕФЕКТНИХ КРИСТАЛІВ ПЛЮМБУМ ТЕЛУРИДУ

В.М. Чобанюк, Т.О. Паращук  
Фізико-хімічний інститут

Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника,  
вул. Шевченка, 57, м. Івано-Франківськ, Україна, 76018,  
e-mail: [freik@pu.if.ua](mailto:freik@pu.if.ua)

Активні дослідження плюмбум телуриду впродовж останніх десятиліть зумовлені широким використанням даного напівпровідника при виготовленні інфрачервоних датчиків, лазерів, світло-випромінюючих пристроїв. Також, він є базовою сполукою високоефективних термоелектричних матеріалів для середньої області температур.

У даній роботі було виконано оптимізацію геометрії кластерів PbTe та розрахунок термодинамічних характеристик обмеженим методом Хартрі-Фока з використанням базисного набору SBKJС, який включає ефективний основний потенціал, за допомогою програми GAMESS. Для розрахунків був побудований кластер з 27 та 64 атомів.

Суть розрахунків полягає у модельній побудові поверхонь потенціальної енергії, яка, в свою чергу, представляє найважливішу складову частину комп'ютерного експерименту в фізичній хімії, оскільки інформація, що отримується в детальній картині цих поверхонь для молекулярної системи, дійсно коштує тих серйозних витрат, що неминучі, навіть із застосуванням потужної обчислювальної техніки.

Після апроксимації фрагментів потенціальних поверхонь в околі точок мінімумів можна переходити до розгляду рухів систем ядер молекули і прогнозувати або інтерпретувати коливально-обертальні спектри. Знаючи набір електронно-коливально-обертальних енергій молекули, можна за допомогою формул статистичної термодинаміки обчислювати будь-які термодинамічні функції даної речовини.

В результаті розрахунку одержано величини ентальпій утворення кристалу PbTe, які складають 61,2 кДж/Моль та 63,6 кДж/Моль для кластерів з 27 і 64 атомів відповідно. Також було розраховано ентропію даного напівпровідника, яка рівна 133,4 Дж/Моль·К і 117,6 Дж/Моль·К відповідно для уже згаданих кластерів. Представлені дані приблизно співпадають з експериментальними даними, що є задовільним результатом.