

МОДЕЛЮВАННЯ ТЕТРАЕДРИЧНИХ ДЕФЕКТНИХ СТАНІВ В СТЕКЛАХ As-S

В.Т. Бойко

Науково-виробниче підприємство НДІ „Карат”

202, вул. Стрийська, Львів, 79031

На основі оцінки енергетичної вигідності склоформуючих структурних одиниць розроблено підхід для опису структурних особливостей халькогенідних стекел. В рамках цього підходу покладається, що два (або три) катіона, з'єднані ланцюгами з аніонів, формують кластери. Поєднанням таких кластерів можна відобразити весь каркас склоподібної матриці. Ймовірності утворення кластерів оцінюються відносно середньої енергії кластерів по відношенню до числа атомів, з яких він складається.

Даний підхід був протестований на прикладі пірамідальних та тетраедричних кластерів систем As-S та Ge-S [1]. Для визначення загальної енергії кластерів були проведені квантово-механічні обрахунки в базисі RHF/6-311G* за допомогою програми HyperChem Professional 8.0.

В халькогенідних стеклах системи As-S можливі відхилення від повного насичення ковалентних хімічних зв'язків в сітці, внаслідок чого можуть утворюватись дефектні аномально-координовані склоформуючі квазі-тетраедричні одиниці з подвійним зв'язком $S=AsS_{3/2}$ [2].

В даній роботі було промодельовано кластер з дефектним подвійним зв'язком $S=AsS_{3/2}$. Проведені обчислення свідчать, що звичайний склоформуючий кластер As_2S_5 з середнім координаційним числом 2.286 є більш енергетично вигідним порівняно із квазі-тетраедричним. Таким чином, квазі-тетраедричний кластер з подвійним зв'язком не може виступати в ролі склоформуючого в системі As-S.

[1] Shpotyuk O. V. Boyko, Ya. Shpotyuk, M. Hyla. CINCA: ction-interlinking network cluster approach in application to binary glassy chalcogenides // Visnyk Lviv University, Ser. Fiz. – 2009. –№ 43. – P. 153-158

[2] P. Boolchand “Intermediate phases, reversibility windows, stress-free and non-aging networks, and strong liquids” // Chalcogenide Letters.–2006.–Vol. 3. – P. 29-31.