**Кондакова, Ольга Анатольевна.**

## Квантово-химическое моделирование структуры и дефектов в оксидных и галогенидных стеклообразователях : диссертация ... кандидата химических наук : 02.00.04. - Москва, 1999. - 177 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат химических наук Кондакова, Ольга Анатольевна

Введение.

Глава I. Литературный обзор.

1.1. д-В203 и д-В203+Ме20.

1.1.1. Структура кристаллического, жидкого и д-В203 по данным дифракционных методов, колебательной спектроскопии и ЯМР.

1.1.2. Моделирование структуры д-В203 (по литературным данным).

1.1.3. Структура кристаллов и д-В20з с модификаторами.

1.1.4. Суперионная проводимость в литий боратных стёклах и её зависимость от концентрации Ы20.

1.2. д-Бз-Ог и д-6е02, как представители семейства тетраэд-рических оксидных стёкол.

1.2.1. Основные структурные характеристики (Их, 112, 7,г) кристаллического, жидкого, - газообразного и стеклообразного состояния, а также структура ближнего и среднего порядков по данным дифракционных методов и колебательной спектроскопии.

1.2.2. Моделирование структуры д-ЗЮ2 и д-Се02 (по литературным данным).

1.2.3. Изменение структуры д-БЮг при введении модификатора Ы20.

1.3. д-ВеЕ2 и д-гпС12, как представители галогенидных тет-раэдрических стекол.

1.3.1. Основные структурные характеристики (1^, И2, кристаллического, жидкого, газообразного и стеклообразного состояния, а также структура ближнего и среднего порядков по данным дифракционных методов и колебательной спектроскопии.

1.3.2. Моделирование структуры д-ВеГ2 и д-гпС12 (по литературным данным).

Глава II. Методы моделирования структуры и дефектов.

2.1. Краткое описание методов расчета (неэмпирический, полуэмпирический).

2.2. Выбор модельных кластеров и их оптимизация.

2.2.1. Стеклообразный оксид бора.

2.2.2. Тетраэдрические оксидные и галогенидные стёкла.

Глава III. Моделирование структуры и дефектов.

3.1. Моделирование д-В203 и стеклообразных фаз в системе g-B203-Li20.

3.1.1. Расчет структурных элементов и межслоевого взаимодействия в д-В203 •

3.1.2. Колебательные спектры д-В203 построенные с учётом влияния существующих дефектов.

3.1.3. Изменения в сетке д-В203 при введении модификатора.

3.1.4. Расчет основных структурных группировок в системе g-B203-Li20 и моделирование миграции ионов Li в объёме стекла.

3.2. Моделирование тетраэдрических стёкол АХ2.

3.2.1. Свойства кольцевых фрагментов исходной ННС и наиболее энергетически стабильных дефектов в тетраэдрических g-Si02 и g-Ge02.

3.2.2. Структура дефектов типа гипервалентных конфигураций в g-Si02 и g-Ge02 и диполи на их основе.

3.2.3. Колебательные спектры структурных фрагментов в g-Si02 и g-Ge02.

3.2.4. Изменения в сетке g-Si02 при введении модификатора

3.2.1. Свойства кольцевых фрагментов исходной ННС и наиболее энергетически стабильных дефектов в тетраэдрических g-BeF2 и g-ZnCl2.