**Зайнуллина, Вероника Маратовна.**

## Квантовохимическое моделирование электронной структуры, химической связи и ионной проводимости фторидов и оксидов : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 02.00.21. - Екатеринбург, 1999. - 166 с.

## Оглавление диссертациикандидат физико-математических наук Зайнуллина, Вероника Маратовна

ВВЕДЕНИЕ.

1. ОБЗОР ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ И ТЕОРЕТИЧЕСКИХ РАБОТ.

1.1 .Кристаллическая структура простых и двойных оксидов и фторидов:СаР2, ВаЕ2, 8гР2, РЬР2, 6-В1203, Сах02.х, ZrUxУх02а.5х 13 1 ^.Экспериментальные исследования транспортных свойств простых и сложных фторидов и оксидов.

1.3.Термодинамический подход в изучении суперионных проводников. Квазихимическая теория Хюбермана-Гуревича.

1.4.Теоретические исследования электронной структуры, химической связи и ионной проводимости 'дростых и сложных фторидов и оксидов.

1.5. Постановка задачи, выбор методов исследования.

2. МЕТОДЫ РАСЧЕТА ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ И ХАРАКТЕРИСТИК ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ В ИОННЫХ ПРОВОДНИКАХ.

2.1 .Методы теории функционала электронной плотности.

2.2.Метод ЛМТО в приближении сильной связи.

2.2.1. Основные приближения.

2.2.2. Основные соотношения.

2.2.3. Гамильтониан и матрицы перекрывания.

2.2.4. Потенциал и полная энергия.

2.3. Расширенный метод Хюккеля (РМХ).

2.4. Методика расчета.

3.РАСЧЕТЫ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ФТОРИДОВ ЩЕЛОЧНОЗЕМЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ И ФТОРИДА СВИНЦА, АНАЛИЗ ОПТИЧЕСКИХ И ТРАНСПОРТНЫХ СВОЙСТВ.

3.1 .Электронная структура идеальных кристаллов фторидов ЩЗЭ, РЬР и кристаллов с дефектами. Строение Н-, Б-центров.

3.2.Энергии образования антифренкелевских дефектов. Взаимодействие между антифренкелевскими дефектами.

3.3.Характер химической связи во фторидах ЩЗЭ и фториде свинца.

Эффекты ковалентности.

Выводы к главе 3.

4. ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА, ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ И ИОННАЯ

ПРОВОДИМОСТЬ ПРОСТЫХ И ДВОЙНЫХ ОКСИДОВ со

СТРУКТУРОЙ ФЛЮОРИТА.

4.1 .Электронная структура и химическая связь в полиморфных модификациях оксида висмута (а-В12Оз, (3-В12Оз, 8-Ш20з). ЮЗ

4.2.Особенности гибридизации в 5-В1203 и характеристики ионной проводимости.

4.3. Электронная структура и химическая связь в полиморфных модификациях 2Ю2 и 2Ю2-СаО, 7Ю2-У01.5.

4.4.Механизм ионного транспорта и природа экстремального изменения ионной проводимости твердых электролитов на основе 2г02 и в ряде родственных систем.

Выводы к главе 4.

Сокращения.

АФД - антифренкелевский дефект ККР - метод Корринга-Кона-Ростокера JIKAO - линейная комбинация атомных орбиталей J1MTO - линейный метод "muffin-tin" орбиталей JIMTO-ПАС - линейный метод "muffin-tin" орбиталей в приближении атомных сфер

J1MTO-CC - линейный метод "muffin-tin" орбиталей в приближении сильной связи

ЛППВ-ПП - полно-потенциальный метод линеаризованных присоединенных плоских волн МЗП - малликеновская заселенность перекрывания МД - метод молекулярной динамики МС - метод молекулярной статики

МТ- "muffin-tin" орбиталь ОПВ - метод ортогональных плоских волн ПМД - методы первопринципной молекулярной динамики ППВ - метод присоединенных плоских волн ППДП - метод полного пренебрежения дифференциальным перекрыванием ПС - плотность состояний РЗЭ - редкоземельный элемент РМХ - расширенный метод Хюккеля ТФЭП - теория функционала электронной плотности ФД - френкелевский дефект ФЭЛ - функция электронной локализации ЩЗЭ - щелочноземельный элемент ЭГТР - электронный парамагнитный резонанс