**Варнек, Александр Алексеевич.**

## Распределение электростатического потенциала в кристаллах с различным типом химических связей по данным рентгеновского дифракционного эксперимента : диссертация ... кандидата химических наук : 02.00.04. - Москва, 1985. - 168 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат химических наук Варнек, Александр Алексеевич

ВВВДЕНИЕ. 4

ГЛАВА I. ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР. 8

1.1. Изучение зарядового распределения в кристаллах дифракционными методами . 8

1.2. Некоторые аспекты расчета электростатического потенциала в кристаллах . 14

1.3. Электростатический потенциал в методе функционала плотности . 24

1.4. Электростатический анализ взаимодействия многоэлектронных систем. 27

ГЛАВА 2. РАСЧЕТ РАС1ВДЕЙЕНИЯ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА В КРИСТАЛЛАХ ПО РЕНТГЕНОВСКИМ ДИФРАКЦИОННЫМ ДАННЫМ. 32

2.1. Воспроизведение электростатического потенциала из дифракционных данных без их дополнительной обработки . 32

2.2. Электростатический потенциал в свободных атомах . . . . . 39

ГЛАВА 3. ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИМ В КОВМЕНТНЫХ,

МОЛЕКУЛЯРНЫХ И ИОННЫХ КРИСТАЛЛАХ. 54

3.1. Распределение электронной плотности и электростатического потенциала в кристаллах алмаза, кремния и германия. 54

3.2. Распределение электронной плотности и электростатического потенциала в кристаллическом этане . 79

3.3. Распределение электростатического потенциала в хлористом натрии.86

3.4. Интерпретация деформационного электростатического потенциала в рамках модели "атом связь". 90

ГЛАВА 4. РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА ОТДЕЛЬНЫХ

МОЛЕКУЛ ПО ДИФРАКЦИОННЫМ ДАННЫМ. 98

4.1. Программа расчета распределения молекулярного электростатического потенциала по квантово-химическим данным. . 99

4.2. Влияние кристаллического окружения и способа параметризации электронной плотности на распределение молекулярного электростатического потенциала . 103

ГЛАВА 5. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК КРИСТАЛЛОВ ПО РЕНТГЕНОВСКИМ ДИФРАКЦИОННЫМ ДАННЫМ 131

5.1. Расчет полной энергии и энергии атомизации кристаллов. 131

5.2. Оценка электростатической составляющей энергии взаимодействия водорода с кристаллическим ванадием . 135

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ. 145