

УДК 546.19.23

ДИАГРАММЫ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОННЫХ ПОЛОС КВАЗИАТОМОВ В
ХАЛЬКОГАЛОГЕНИДАХ $A^{III}B^{VI}C^{VII}$

С.М.Гаджиев, С.Э.Мирзалиева, Р.Н.Ровшанов, Ш.М.Масталиева,
И.Ф.Исазаде, Э.Ф.Халилова

Бакинский государственный университет
AZ 1148 Баку, ул. З.Халилова, 23; e-mail: info@bsu.az

Полученные результаты позволяют воспользоваться атомными значениями коэффициентов Чебышева для постановки компьютерного эксперимента в области прогнозирования возможности существования тех или иных составов халькогалогенидов. Представляется возможным методом компьютерного моделирования установить электронное строение халькогалогенидов.

Ключевые слова – халькогалогениды, коэффициент Чебышева, квазиатом, метод компьютерного моделирования, волновая функция.

Известно, что волновая функция волновые уравнения в самосогласованном системы электронов выражается через поле выражаются в виде: одноэлектронные функции, для которых

$$\{(\hbar \cdot \Delta)/2m + V(k, r)\} \cdot \Psi_n(k, r) = E_n(k) \Psi(k, r) \quad (1)$$

где $V(k, r)$ - потенциальное поле, действующее на электрон;

$E_n(k)$ – собственное значение энергии, соответствующее состоянию k, r ;

n – индекс соответствующей совокупности квантовых состояний для свободного атома;

k – волновой вектор;

отклонение от самосогласованного потенциала $V(k, r)$ равно:

$$V(k, r) = \begin{cases} -zr^2/r_9^3 & r \leq r_9 \\ r/z, & r > r_9 \end{cases}$$

r_9 – радиус Вигнера-Зейтца. Для глубоколежащих уровней атомов в качестве потенциальной функции $V(k, r)$ можно ограничиться в уравнении Шредингера потенциалом Томаса-Ферми, но для положений электронных полос вблизи поверхности Ферми следует учитывать потенциал квазикулоновского типа [1-3]:

$$W = -z/r + (A l + z/r) \exp(-z/R l) \quad (2)$$

который входит в качестве дополнительного члена в потенциал $V(k, r)$ радиального уравнения Шредингера, причем значения $A l, R l$ (l-орбитальное квантовое число, принимающее значения 0, 1, 2) подбирались таким образом, чтобы

соответствующие первые потенциалы ионизации для глубоколежащих уровней были близки к экспериментальным значениям. Исходя из вышеизложенного можно заключить, что детальный расчет электронной структуры соединений – халькогалогенидов $A^{III}B^{VI}C^{VII}$ (A^{III} - Ga, In; B^{VI} - S, Se, Te; C^{VII} - F, Br, Cl, J) представляет определенные трудности и требует большой вычислительной работы [1, 8, 9]. Поэтому в большинстве случаев приходится использовать упрощенные методы расчета зонной структуры и получить зависимость энергии E от квазиимпульса K для распределения электронов по значениям главного ($n=1, 2,$

3...), побочного $l(s, p, d, f...)$ и магнитного ($m=0, 1, 2...$) квантовых чисел.

В силу ортогональности волновых функций, s-, p-, d- электронов квазиатомов

$$E(k) = \beta_1 P_0(k) + \beta_2 P_1(k) + \beta_3 P_2(k)$$

где $\beta_1, \beta_2, \beta_3$ – инвариантное, линейное и квадратичное изменение коэффици-

$$P_0(k)=1 ; P_1(k)=k-7 ; P_2(k)=k^2-14k+35$$

Таким образом, зная коэффициенты Чебышева для соответствующих значений, рассчитано изменение энергии валентных электронов для полос квазиатомов

элементов представляется достаточным аппроксимация $E(k)$ на картах для энергии валентных электронов ортогональными полиномами Чебышева вида:

циентов Чебышева. Значения полиномов Чебышева соответственно равны:

халькогалогенидов - $A^{III}(A^V)B^{VI}C^{VII}$, а также прогнозирована возможность их существования [1-3] (рис. 1.).

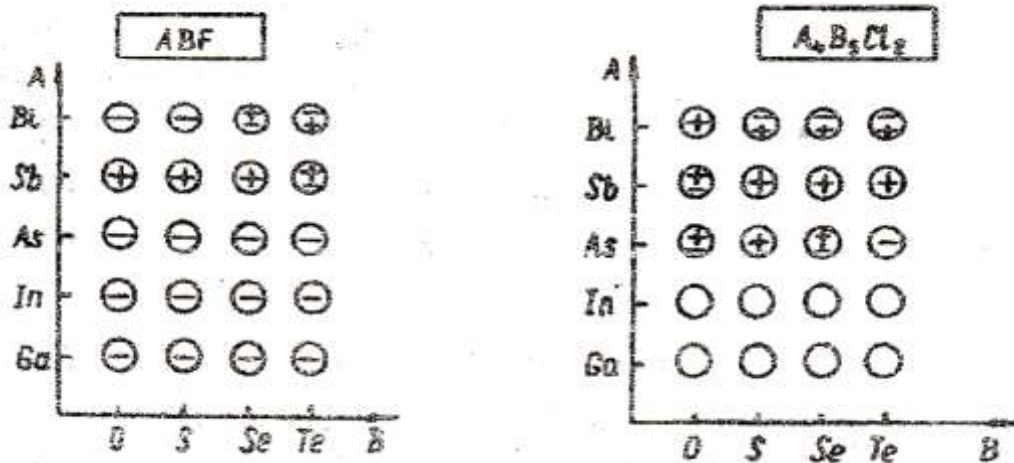


Рис. 1. Результаты прогнозирования $A^{III}(A^V)B^{VI}C^{VII}$

Результаты такого расчета электронных карт распределения валентных электронов квазиатомов $A^{III}(A^V)B^{VI}C^{VII}$ приведены на рис. 2-5.

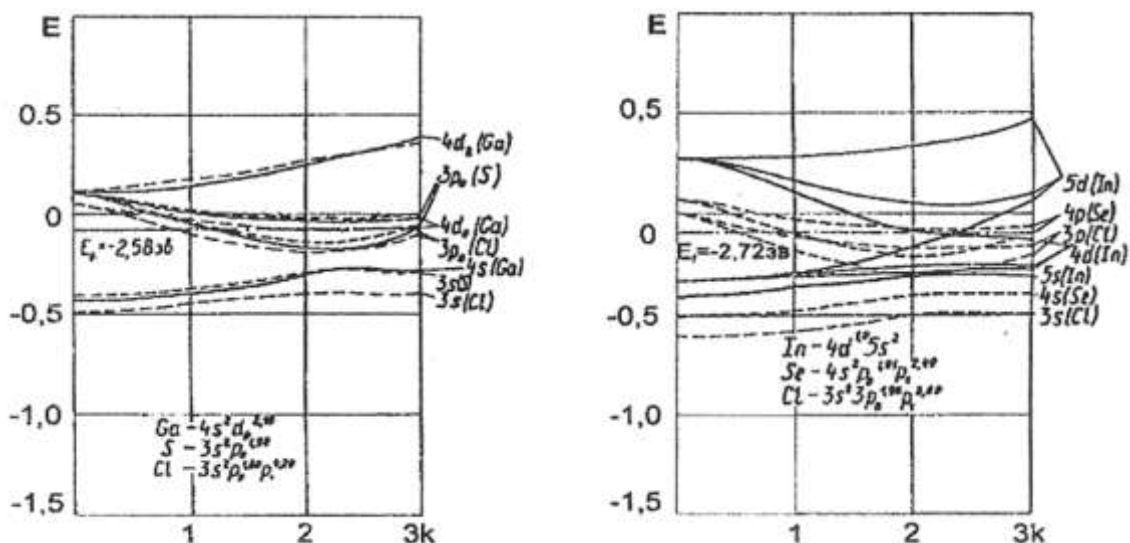


Рис. 2. GaSCl

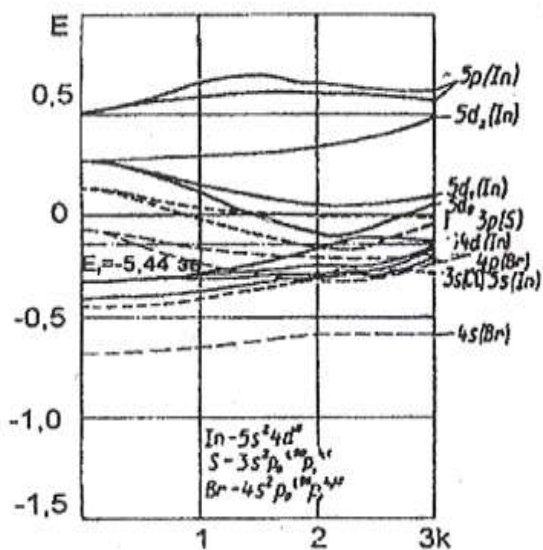


Рис. 4. InSBr

Анализ полученных диаграмм $E(k)$ иллюстрирует факт донорно-акцепторного взаимодействия между атомами $A^{III}B^{VI}C^{VII}$. Совершенно очевидно, что характер такого донорно-акцепторного взаимодействия можно отнести к трем группам:

1. Характер взаимодействия таков, что 3 электрона в квазиатомах A^{III} -элемента из p-, d- полос передаются в валентные полосы B^{VI}, C^{VII} , причем 2 электрона передается в p – полосу халько-

Рис. 3. InSeCl

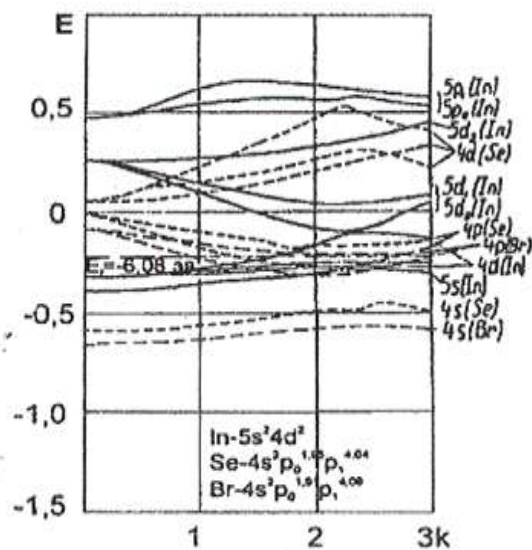


Рис.5. InSeBr

гена, а 1 электрон в d – полосу галогена.

2. Лишь часть электронов s_1 (p_0)-полосы атомов A^{III} (около одного электрона) передается в полосу халькогена и галогена в эквивалентных количествах, т.е. около 0.5 эл/атом.
3. Часть p_1 (d) валентных электронов атома халькогена B^{VI} передается в полосу атомов A^{III} - элемента или галогена - C^{VII} .

ЛИТЕРАТУРА

1. Самсонов Г.В. Конфигурационные представления электронного строения в физическом материаловедении. Киев: Наукова Думка. 1977. С.5-14.
2. Gadjiev S.M, Koutolin S.A. Prevision par ordinateur de la composition et des proprietes phisiko-chimigues des $A^{III}B^{VI}C^{VII}$ et $A^{V}B^{VI}C^{VII}$ C.R. Acad. Sc. T 301. s.II. №5. P.255-257. 1985. Paris France.
3. Герзанич Е.И. Получение и некоторые оптические свойства сульфобромида в стеклообразном и кристаллическом состояниях. // Изв. ВУЗ-ов, сер. Физика. 1971. 2. С.114-116.
4. Fenner J, Rabenau A. And Trageser G. Solid state chemistry of thio-, seleno- and tellurhalides representative and transition elements. // Advances in

- Inorg cyti and Radio chem. 1980. v.23. p. 329-426.
5. Mills K.C. Thermodynamikc data for inorganic sulphides, selenides and tellurides. London. Buttermorts. 1974. p.38-56.
 6. Книер R., Wilms A. Biester H. Phase relations in Ga x – Ga y systems, crystal growth, structural relation and optical absorption of intermediate compounds Ga xy (x-Se, Tl; y-Cl, Br). // Mater., Res.Bull., 1983. v.18. №5. p.615-620.
 7. Hardy A., Cottrau D. Chemic minerals thiohalogenures de gallium $Ga_9S_8Cl_{11}$ et $Ga_9S_8Br_{11}$. // Comptes Rendus Acad. Sci. Ser. C. 1966. 262. p.739-742.
 8. Савицкий Е.М. Проблема прогноза неорганических соединений с помощью ЭВМ. // Вести АН СССР. 1975. №1. С.33-42.
 9. Корсунский М.И., Генкин Я.И., Заводинский В.Г. Энергия валентных электронов и разделение их на группы. Киев: Наукова Думка. 1975. С.25-30.
 10. Gadjiyev S.M., Mirzaliyeva S.E., Quliyeva Sh.H., Mamedova S.Ch. Principle of curie symmetric as the analogy in the formation of physical-chemical prop. of $GaB^{VI}C^{VII}$. // BDU, “90 illiyi” konf. S.361 (2009). 30-31 okt.
 11. Наси́ев S.M., Mustafayeva A.L., Rzayeva N.A., Mirzəliyeva S.E. “Kimyəvi termodinamika”. Bakı-2010. 648 səh. (Dərs vəsaiti).
 12. Гаджиев С.М., Казымова Е.Н., Мустафаева А.Л., Гулиева Й.А. Моделирование физико-химических свойств халькогенидов $A^VB^{VI}C^{VII}$. // Азерб. Химич. ж., 2010. №2. С.103.

$A^{III}(A^V)B^{VI}C^{VII}$ QRUP XALKOHALOGENİDLƏRİNDƏ KVAZİATOMLARIN ELEKTRON ZOLAQLARININ PAYLANMASI DİAQRAMI

S.M.Hacıyev, S.E.Mirzəliyeva, R.N.Rövşənov, Ş.M.Məstəliyeva, İ.F.İsazadə, Ə.F.Xəlilova

Əldə edilən nəticələr kompyuter modelləşdirmə üsulu ilə proqnozlaşdırılmış bu və ya digər tərkibli xalkohalogenidlərin mövcudluğunu Çebışev əmsalının qiymətindən istifadə etməklə təyin etməyə imkan verir. Kompyuter modelləşdirmə üsulu ilə xalkohalogenidlərin elektron quruluşunu müəyyən etmək mümkündür.

Açar sözlər: xalkohalogenidlər, Çebışev əmsalı, kvaziatom, kompyuter modelləşdirmə üsulu, dalğa funksiyası.

DISTRIBUTION DIAGRAMS OF ELECTRONIC BANDS OF QUASIATOMS IN CHALCOHALIDES $A^{III}(A^V)B^{VI}C^{VII}$

S.M.Hadjiyev, S.E.Mirzaliyeva, R.N.Rovshanov, Sh.M.Mastaliev, İ.F.İsazade, A.F. Khalilova

Results obtained allow us to apply atomic values of Chebyshev coefficients for staging a computer modeling to predict the possible existence of either compositions of chalcocalides. Using the computer experiment method, it is possible to establish electronic structure chalcocalides.

Keywords: chalcocalides, Chebyshev coefficients, quasiatom, method of computer modeling, wave function.

Поступила в редакцию 26.02.2013.