

ГОМОТРОПИЧЕСКИЕ И ГЕТЕРОТРОПИЧЕСКИЕ СИЛЫ В КРИСТАЛЛЕ KNbO_3 , ВОССТАНОВЛЕННЫЕ ИЗ ДАННЫХ ПРЕЦИЗИОННОГО РЕНТГЕНОДИФРАКЦИОННОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Терехова Е.О., Егорова А.Н., Сташ А.И., Цирельсон В.Г.

РХТУ им. Д.И. Менделеева, Институт химии и проблем устойчивого развития, кафедра квантовой химии, Россия, 125047, Москва, Миусская пл. 9, Тел.: +7-(499)-978-86-60 katerin.terekhova@gmail.com

Структурная организация молекул и кристаллов является следствием действия двух типов сил, гомотропических и гетеротропических. Первые, электростатические, сводят и удерживают ядра и электроны вместе. Вторые имеют квантовую природу и предупреждают полную компенсацию электрических зарядов. Именно они отвечают за самоорганизацию электронов в поле ядер. В работе развивается подход, позволяющий рассмотреть картину электростатических и квантовых внутрикристаллических сил, установить их роль в формировании атомных и молекулярных взаимодействий, объединить понятие поля сил и квантово-топологическую теорию молекулярной и кристаллической структуры. Внутрикристаллические силы выражены через электронную плотность и ее производные с помощью формул электростатики и теории функционала плотности. К ним добавлены соответствующие вклады от зарядов ядер. Подход впервые применен к кристаллу ниобата калия.

Электронная плотность и характеристики внутрикристаллического поля получены из прецизионного рентгеноструктурного эксперимента. Обработка данных велась с помощью компьютерной программы WinXPRO (Stash&Tsirelson, oct. 2018).

В результате разработан реализован новый подход к изучению химической связи в кристаллах на основе анализа пространственного распределения компонент внутрикристаллических квантовых и электростатических сил из экспериментальной электронной плотности, необходимый для углубленной характеристики и предсказания свойств материалов (рис 1).

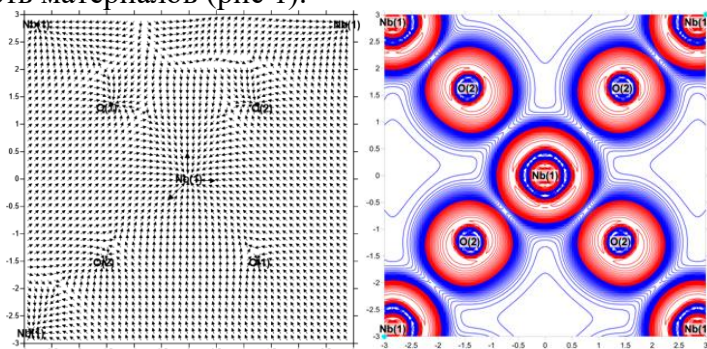


Рис. 1. Кристалл ниобата калия, плоскость $[011]$. Слева – векторное электростатическое поле. Справа – квантовый индикатор концентрации электронного давления.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 19-03-00141.