

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ, МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

УДК 539.193/.194; 535.33/.34

СТРУКТУРНО-ДИНАМИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ФОСФИНА И МЕТИЛФОСФИНА

А.С. Кладиева, А.Б. Осин, М.Д. Элькин

В различных базисах метода функционала плотности DFT/B3LYP проведены модельные расчеты геометрии и колебательных состояний фосфина и метилфосфина. Выявлены возможности использования технологии Gaussian в построении структурно-динамических моделей фосфорсодержащих соединений.

Ключевые слова: колебательные спектры, фосфин, метилфосфин, ангармонические постоянные, резонанс Ферми, структурно-динамические модели.

Key words: vibrational spectra, phosphine, methylphosphine, anharmonic constants, Fermi resonance, structural dynamic models.

Исследование возможностей технологии Gaussian [9] в предсказательных расчетах геометрической и электронной структуры фосфорсодержащих соединений, а также в построении структурно-динамических моделей молекул естественно начать с простейших представителей данного класса соединений. Таковыми следует считать фосфин PH_3 и метилфосфин CH_3PH_2 (рис. 1 а, б). Первая молекула принадлежит к точечной группе симметрии C_{3v} , вторая к группе C_s [6].

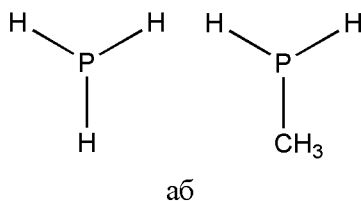


Рис. 1. Структура молекул: а) фосфина; б) метилфосфина

Известно, что существующие версии компьютерной технологии Gaussian [9] позволяют оценить ангармонические параметры адиабатического потенциала (кубические F_{ijk} и квартичные F_{ijkl} силовые постоянные) лишь для молекул низшей симметрии. В нашем случае это относится к метилфосфину. Для фосфина можно воспользоваться следующим методическим приемом: понизить симметрию молекулы до C_s , несущественно изменив (в пределах точности микроволнового эксперимента [6]) длину одной из связей РН. Это позволит не только осуществить решение задачи в ангармоническом приближении теории молекулярных колебаний, но и выяснить достоверность получаемых результатов при использовании указанного выше методического приема. Отметим, что попытки оценить потенциальную функцию фос-

фина на основе экспериментальных данных, были предприняты в работе [1], а ангармонических параметров адиабатического потенциала в работе [10].

Неэмпирические квантовые расчеты параметров адиабатического потенциала фосфина и метилфосфина осуществлены для 12-ти базисных наборов: от 6-31 G(d) до 6-311++ G(d, p). Такой подход диктуется следующими обстоятельствами. Имеет место зависимость рассчитанных значений фундаментальных колебательных состояний, кубических и квартичных силовых постоянных от используемого базиса, по разным схемам осуществляется учет ангармонического смещения фундаментальных полос. Это можно объяснить или различием в расчетных формулах адиабатической теории возмущения второго порядка [2], или в методике учета ангармонических резонансов Ферми [4] между фундаментальными колебаниями и обертонами. Выбор схемы определяется пороговым значением энергетической щели между резонирующими колебательными состояниями. Подробно эти вопросы рассмотрены в работах [3, 8].

Для анализа колебательной подсистемы молекулы использовано модельное квантовое уравнение с гамильтонианом в форме [2]:

$$H = \frac{1}{2} \left[P_i^2 + (v_i Q_i)^2 + F_{ijk} Q_i Q_j Q_k + F_{ijkl} Q_i Q_j Q_k Q_l \right]. \quad (1)$$

Решением уравнения (1) является известное выражение

$$E^{(n)} = v_i (n_i + g_i / 2) + \chi_{ij} (n_i + 1/2)(n_j + 1/2)(1 + \delta_{ij} / 2). \quad (2)$$

Здесь v_i – частоты гармонических колебаний, n_i – колебательные квантовые числа, χ_{ij} – ангармонические постоянные, вычисляемые с помощью соотношений:

$$\begin{aligned} \chi_{ii} = \frac{1}{4} \left\{ 6F_{iii} - \frac{15F_{iii}^2}{v_i} - \sum_j \frac{F_{ij}^2}{v_j} \frac{8v_i^2 - 3v_j^2}{4v_i^2 - v_j^2} \right\}, \\ \chi_{ij} = \frac{1}{4} \left\{ F_{iij} - \frac{6F_{ij}F_{ij}}{v_i} - \frac{4F_{ij}^2 v_i}{4v_i^2 - v_j^2} - \sum_k \frac{(F_{ik} - F_{kj})^2}{v_k} - \right. \\ \left. - \sum_k \frac{F_{ijk} v_k (v_k^2 - v_i^2 - v_j^2)}{(v_i + v_k + v_k)(v_i + v_k - v_k)(v_i - v_k + v_k)(v_i - v_k - v_k)} \right\}. \end{aligned} \quad (3)$$

Сдвиг фундаментальных полос колебаний определяется ангармоническими поправками $X_{ii} = \frac{9}{4} \chi_{ii}$ и $X_i = \frac{3}{4} \sum_r \chi_{ir}$. Резонансные знаменатели для ангармонических постоянных в выражении (3) ограничивают область их применения.

По умолчанию в технологии Gaussian – 03 значение энергетической щели между резонирующими колебательными состояниями должна превышать 10 см^{-1} . В противном случае схема (3) в заложенном в технологии Gaussian – 03 алгоритме, заменятся на схему учета резонансов Ферми:

$$E = \frac{1}{2} \left\{ (v_i + v_j + v_k) \pm \sqrt{\frac{1}{2} F_{ijk}^2 (1 + \delta_{jk}) + (v_i - v_j - v_k)^2} \right\}. \quad (4)$$

Оптимизация геометрии фосфина приводит к следующим значениям длин валентных связей и валентных углов: $R_{\text{PH}} = 1,42 \text{ \AA}$ ($1,42 \text{ \AA}$), $A_{\text{HPH}} = 93,4-93,6^\circ$ ($93,5^\circ$). В скобках приведены данные микроволнового эксперимента из монографии [6]. Для метилфосфина: $R_{\text{PH}} = 1,42-1,43 \text{ \AA}$ ($1,42 \text{ \AA}$), $A_{\text{HPH}} = 93,4-93,6^\circ$ ($93,5^\circ$), $R_{\text{CH}} = 1,09 \text{ \AA}$ ($1,04 \text{ \AA}$), $R_{\text{CP}} = 1,87-1,88 \text{ \AA}$ ($1,83 \text{ \AA}$), $A_{\text{HCH}} = 108,7-108,8^\circ$ ($109,5^\circ$). Влияние базиса на значения геометрических параметров не вы-

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ, МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

ходит за рамки точности экспериментальных данных и не сказывается на кинематической части модельного гамильтониана (1).

Таблица 1

Интерпретация фундаментальных колебаний фосфина

Тип симмет.	Форма колеб.	$\nu_{\text{экс}}$		Гармонич. прибл.			Ангармонич. прибл.			
		ИК	КР	ν_2	ν_m	ИК	ν_2	ν_m	$\nu_{\text{анг}}$	ИК
				Минимум (расчет)						
$A_1(A')$	q_{PH}	2328	2306	2370	2279	46,3	2371	2279	2280	47,2
$E(A')$	q_{PH}	2328	2306	2377	2285	79,7	2379	2287	2262	78,7
$E(A')$	α_{HPH}	1122	1115	1143	1110	12,7	1143	1111	1115	12,7
$A_1(A')$	α_{HPH}	992	979	1023	995	25,2	1023	995	1006	25,2
$E(A'')$	q_{PH}	2328	2306	2377	2285	79,7	2376	2285	2287	79,7
$E(A'')$	α_{HPH}	1122	1115	1143	1110	12,7	1143	1110	1117	12,7
				Максимум (расчет)						
$A_1(A')$	q_{PH}	2328	2306	2404	2311	54,1	2406	2313	2301	55,8
$E(A')$	q_{PH}	2328	2306	2418	2324	114	2421	2327	2296	113
$E(A')$	α_{HPH}	1122	1115	1170	1137	14,8	1170	1137	1141	14,8
$A_1(A')$	α_{HPH}	992	979	1055	1026	33,4	1055	1026	1036	33,4
$E(A'')$	q_{PH}	2328	2306	2418	2324	114	2419	2324	2319	114
$E(A'')$	α_{HPH}	1122	1115	1170	1137	14,8	1170	1137	1143	14,8

Результаты анализа колебательных состояний фосфина представлены в таблицах 1–4. Из них следует, что искусственное понижение симметрии молекулы практически не сказывается на расчетных значениях частот фундаментальных колебательных состояний и интенсивностей полос. Операция масштабирования дает оценку ангармонического смещения, адекватную расчету в ангармоническом приближении при искусственном понижении симметрии фосфина с C_{3v} до C_s . Ангармонических резонансов для порогового значения в 10 см^{-1} не наблюдается, а резонансы Дарлинг-Деннисона расчетную картину спектра не меняют. Разброс значений постоянных ангармоничности, кубических и квартичных силовых постоянных, показывающий влияние атомного базиса, не оказывает существенного влияния на теоретическую оценку ангармонического смещения полос.

Таблица 2

Ангармонические постоянные фосфина $\chi_{ij}, \text{ см}^{-1}$

Индексы		X_{ij}		Индексы		X_{ij}		Индексы		X_{ij}	
i	j	Мин.	Макс.	i	j	Мин.	Макс.	i	j	Мин.	Макс.
1	1	–36,6	–30,2	3	2	–11,6	–7,21	6	3	–2,44	–1,70
2	1	–55,9	–38,6	4	2	–1,77	0,18	4	4	–6,13	–5,04
3	1	–9,81	–8,55	5	2	–66,2	–60,3	5	4	–2,43	–1,40
4	1	–8,16	–7,16	6	2	–8,80	–4,62	6	4	–2,11	–0,75
5	1	–20,5	–11,9	3	3	–4,74	–3,40	5	5	–21,3	–19,1
6	1	–21,4	–20,4	4	3	–2,01	–0,74	6	5	–7,55	–6,05
2	2	–16,7	–15,6	5	3	–18,6	–17,6	6	6	–4,18	3,26

Таблица 3

Диапазон изменения кубических силовых постоянных фосфина, см⁻¹

Индексы			F_{ijk}		Индексы			F_{ijk}		Индексы			F_{ijk}	
<i>i</i>	<i>j</i>	<i>k</i>	Мин.	Макс.	<i>i</i>	<i>j</i>	<i>k</i>	Мин.	Макс.	<i>i</i>	<i>j</i>	<i>k</i>	Мин.	Макс.
1	1	1	-1060	-803	4	1	1	63,8	76,4	5	5	2	-932	-880
2	1	1	-767	-625	4	2	1	-16,6	-10,3	5	5	3	29,2	31,5
2	2	1	66,0	130	4	2	2	18,2	24,5	5	5	4	76,9	85,5
2	2	2	-882	-847	4	3	1	-40,1	-33,1	6	5	1	34,7	36,4
3	1	1	-29,6	-22,3	4	3	2	3,8	7,2	6	5	2	0,4	3,1
3	2	1	15,4	19,6	4	3	3	-26,6	-8,8	6	5	3	28,2	34,3
3	2	2	-7,2	-2,6	4	4	1	14,4	31,7	6	5	4	-40,6	-34,4
3	3	1	-27,8	-15,6	4	4	2	151	170	6	6	1	38,6	44,9
3	3	2	57,8	70,7	4	4	4	-99,2	-78,6	6	6	2	46,6	60,1
3	3	3	-59,4	-41,2	5	5	1	401	517	6	6	3	38,1	56,5

Результаты модельных расчетов колебательных состояний метилфосфина представлены в таблицах 5–8. Неэмпирические квантовые расчеты подтверждают интерпретацию фундаментальных колебаний, предложенную в монографии [6].

Таблица 4

Диапазон изменения квартичных силовых постоянных фосфина, см⁻¹

Индексы				F_{ijkl}		Индексы				F_{ijkl}		Индексы				F_{ijkl}	
<i>i</i>	<i>j</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	Мин.	Макс.	<i>i</i>	<i>j</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	Мин.	Макс.	<i>i</i>	<i>j</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	Мин.	Макс.
1	1	1	1	386	484	4	3	3	1	-3,5	-2,3	5	5	4	3	-42,3	-41,6
2	1	1	1	154	167	4	3	3	2	5,2	11,8	5	5	4	4	-98,7	-95,2
2	2	1	1	135	191	4	3	3	3	-2,1	2,5	5	5	5	5	416	431
2	2	2	1	-93,9	-65,4	4	4	1	1	-122	-119	6	5	1	1	-2,5	-0,2
2	2	2	2	253	301	4	4	2	1	-12,3	-10,2	6	5	2	2	-1,8	1,0
3	1	1	1	10,1	12,8	4	4	2	2	-103	-97,1	6	5	3	3	-1,8	-0,7
3	2	1	1	8,3	11,8	4	4	3	1	-15,7	-14,0	6	5	4	4	-17,7	-15,3
3	2	2	1	-6,3	-1,5	4	4	3	2	2,5	5,0	6	5	5	5	5,6	7,7
3	2	2	2	2,6	5,7	4	4	3	3	-7,8	-2,3	6	6	1	1	-162	-156
3	3	1	1	-67,0	-58,0	4	4	4	1	1,7	7,1	6	6	2	1	-41,7	-28,9
3	3	2	1	27,1	32,8	4	4	4	2	37,6	43,1	6	6	2	2	-76,4	-64,5
3	3	2	2	-97,9	-93,0	4	4	4	3	2,3	3,4	6	6	3	1	-3,0	0,7
3	3	3	1	-2,7	-0,3	4	4	4	4	-17,3	2,5	6	6	3	2	-13,1	-9,4
3	3	3	2	11,7	17,1	5	5	1	1	69,6	107	6	6	3	3	-7,3	-5,9
3	3	3	3	-21,2	-19,0	5	5	2	1	-178	-153	6	6	4	1	-2,3	2,0
4	1	1	1	-32,6	-28,9	5	5	2	2	300	350	6	6	4	2	4,2	9,8
4	2	1	1	-23,1	-15,7	5	5	3	1	-2,2	-0,2	6	6	4	3	-0,1	4,5
4	2	2	1	-1,4	3,7	5	5	3	2	-8,1	-6,5	6	6	4	4	-8,2	-2,0
4	2	2	2	-16,6	-12,5	5	5	3	3	-143	-139	6	6	5	5	-61,0	-58,6
4	3	1	1	52,8	61,6	5	5	4	1	15,6	18,1	6	6	6	5	-7,8	-3,4
4	3	2	2	-14,8	-6,1	5	5	4	2	-24,9	-23,0	6	6	6	6	-16,0	-12,6

Имеет место резонансное взаимодействие между фундаментальными состояниями, интерпретированными как валентные колебания связей СН и РН, и составными тонами (ν_i и ν_j

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ, МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

+ ν_k). Однако расхождение резонирующих колебательных состояний в рамках схемы резонанса Ферми (4) за счет возмущения, определяемого соответствующими кубическими постоянными, не превышает 10 см^{-1} (табл. 7). Имеет место значительное (около $80\text{--}100 \text{ см}^{-1}$) расхождение фундаментальных частот, обусловленное учетом констант ангармоничности χ_{ij} (табл. 6). При этом значения обертоновых частот, вычисленные в ангармоническом приближении, находятся в лучшем согласии с приведенными в монографии [6] экспериментальными данными. Объяснить этот факт можно тем, что в реальном эксперименте сильные по интенсивности в ИК- и КР-спектрах полосы в области $2240\text{--}2310 \text{ см}^{-1}$ не были интерпретированы как совокупность двух резонирующих состояний, а были отнесены к фундаментальному колебанию связи РН. Косвенным подтверждением такого предположения может служить расхождение в оценке ($\sim 15 \text{ см}^{-1}$) положения полос в ИК- и КР-спектрах и присутствия по одной полосе [6] в каждом из спектров.

Кроме того, после расхождения близких (резонансных) состояний говорить о принадлежности полосы к фундаментальному или обертоновому состоянию можно только при условии, если имеется численная оценка интенсивности полос. Для обертонов на сегодняшний день такие оценки носят, в лучшем случае, качественный характер.

Впрочем, имеющееся расхождение (около 50 см^{-1}) экспериментальных значений частот фундаментальных колебаний и рассчитанных в ангармоническом приближении теории молекулярных колебаний на интерпретацию спектра не влияет, поскольку в высокочастотном диапазоне валентные колебания связей СН и РН разнесены на величину $\sim 700 \text{ см}^{-1}$. Именно по частоте валентного колебания связи РН можно осуществлять спектральную идентификацию фосфорорганических соединений, содержащих фрагмент РН₂. Отметим, что частота валентного колебания связи РН этого фрагмента в фенилфосфине и дифенилфосфине [7] равна приблизительно 2280 см^{-1} .

Таблица 5

Интерпретация колебательных состояний метилфосфина

Форма колеб.	$\nu_{\text{экc}}$ [2]	Минимум					Максимум				
		ν_z	ν_M	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР	ν_z	ν_M	$\nu_{\text{анг}}$	ИК	КР
Тип симметрии A'											
q_{CH}	3000	3122	2982	2972	9,97	71,9	3155	3013	3004	13,1	79,4
q_{CH}	2926	3040	2906	2927	15,6	103	3065	2929	2971	21,0	139
q_{PH}	2297	2356	2266	2215	78,0	162	2392	2299	2242	97,7	205
α_{CH_3}	1440	1474	1428	1429	5,17	10,1	1508	1461	1484	6,72	18,3
β_{PCH}	1288	1337	1297	1311	0,23	0,41	1363	1322	1337	0,49	1,14
β_{HPH}	1093	1118	1087	1077	16,6	24,2	1145	1113	1103	21,4	53,7
β_{PCH}	977	1000	973	980	50,3	4,67	1015	987	995	68,5	16,7
β_{CPH}	740	743	724	720	0,54	8,66	749	731	728	0,69	11,8
Q_{CP}	673	666	650	648	6,77	15,1	670	654	653	9,16	21,0
Тип симметрии A''											
q_{CH}	2992	3113	2973	2966	9,88	66,9	3144	3002	2995	13,1	74,7
q_{PH}	2312	2360	2269	2219	96,6	126	2401	2308	2251	131	174
α_{CH_3}	1440	1478	1433	1446	6,70	11,1	1510	1463	1476	9,36	18,2
β_{PCH}	1017	1039	1011	1008	19,7	9,66	1051	1022	1021	23,4	19,9
β_{CPH}	677	702	685	684	0,82	4,28	709	691	690	1,25	7,48
χ_{CH_3}	207	233	228	193	2,04	0,12	236	231	200	2,71	0,39

ПРИКАСПИЙСКИЙ ЖУРНАЛ: управление и высокие технологии № 4 (8) 2009

Представляется интересным характер поведения ангармонических и силовых постоянных метилфосфина при смене базиса расчета (табл. 6, 7). Имеющиеся изменения наблюдаются при замене базиса 6–31 G на 6–311 G.

Таблица 6

Ангармоническое смещение фундаментальных состояний в метилфосфине, см^{-1}

	V ₁	V ₂	V ₃	V ₄	V ₅	V ₆	V ₇	V ₈	V ₉	V ₁₀	V ₁₁	V ₁₂	V ₁₃	V ₁₄	V ₁₅
6–31 G(d)															
X _{ii}	–77	–38	–59	–28	–17	–10	–2	–14	–11	–69	–56	–28	–3	–3	–24
X _i	–75	–55	–90	4	–8	–32	–18	–6	–6	–80	–93	–6	–28	–15	–12
6–31 G(d, p)															
X _{ii}	–75	–38	–57	–20	–17	–11	–2	–2	–16	–68	–54	–20	–3	–3	–25
X _i	–76	–70	–87	–17	–4	–30	–18	–19	–1	–80	–89	–15	–28	–15	–12
6–311 G(d)															
X _{ii}	–75	–38	–56	–22	–16	–11	–2	–1	–11	–67	–52	–23	–3	–3	–25
X _i	–76	–64	–86	–12	–8	–31	–19	–20	–7	–80	–89	–10	–29	–15	–14
6–311 G(d, p)															
X _{ii}	–74	–38	–55	–18	–17	–11	–3	9	–7	–67	–52	–19	–3	–4	–25
X _i	–76	–73	–85	–29	–15	–32	–19	–33	–12	–79	–88	–14	–29	–16	–15
6–311+ G(d, p)															
X _{ii}	–73	–38	–56	–17	–17	–10	–3	8	–7	–67	–52	–19	–3	–4	–25
X _i	–77	–74	–86	–28	–14	–31	–19	–31	–12	–80	–88	–14	–29	–16	–16

Однако ангармоническое смещение и в этом случае не выходит за границы критерия точности предсказательных расчетов в 10 см^{-1} , предложенных в публикации [5] для фосфорорганических соединений.

Таблица 7

Кубические силовые постоянные метилфосфина (в см^{-1})

Индексы			6–31 G(d)	6–31 G(d, p)	6–311 G(d)	6–311 G(d, p)	6–31 +G(d, p)
i	j	k					
8	3	1	1,93	–1,81	2,04	1,81	1,84
9	3	2	1,23	1,27	1,23	1,27	1,22
11	10	8	0,60	–0,55	0,61	0,46	0,49
13	11	5	–3,74	–3,87	–3,49	–3,79	–3,92
3	7	5	–5,78	–6,11	–6,06	–6,55	–6,62

Таблица 8

Интерпретация резонирующих колебательных состояний в метилфосфине

i	j	k	6–31 G(d)		6–31 G(d, p)		6–311 G(d)		6–311 G(d, p)		6–311+ G(d, p)	
1	8	3	3000	2961	3004	2953	2977	2934	2976	2946	2972	2943
2	9	3	2971	2894	2955	2889	2944	2865	2931	2880	2927	2879
10	8	11	2992	2970	2995	2962	2969	2938	2969	2952	2966	2950
11	5	13	2251	2355	2249	2336	2219	2349	2239	2315	2238	2311
3	7	5	2242	2330	2240	2310	2215	2325	2233	2289	2232	2283

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ, МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Проведенный численный эксперимент дает основания полагать, что метод функционала плотности позволяет оценивать геометрическую и электронную структуру фосфорорганических соединений, содержащих фрагменты PH и PH_2 , строить структурно-динамические модели таких соединений и осуществлять предсказательные расчеты колебательных состояний.

Библиографический список

1. Бехтерева, К. С. Об определении потенциальных функций молекул H_2CO , PH_3 и CH_4 на основе экспериментальных данных / К. С. Бехтерева // Известия вузов. – 2008. – № 2. – С. 58–63. – (Физика).
2. Браун, П. А. Введение в теорию молекулярных спектров / П. А. Браун, А. А. Киселев. – Л. : Наука, 1983. – 342 с.
3. Гречухина, О. Н. Использование информационной технологии “Gaussian” в моделировании адиабатических потенциалов кислородосодержащих соединений / О. Н. Гречухина, А. М. Лихтер, П. М. Элькин // Прикаспийский журнал: управление и высокие технологии. – 2009. – № 2 (6). – С. 37–45.
4. Лисица, М. П. Резонанс Ферми / М. П. Лисица, А. М. Яремко. – Киев : Наукова думка, 1984. – 250 с.
5. Мясоедов, Б. Ф. Фрагментарные методы расчета ИК-спектров фосфорорганических соединений / Б. Ф. Мясоедов, Л. А. Грибов, А. И. Павлючко // Журнал структурной химии. – 2006. – Т. 47, № 3. – С. 449–456.
6. Свердлов, Л. М. Колебательные спектры многоатомных молекул / Л. М. Свердлов, М. А. Ковнер, Е. П. Крайнов. – М. : Наука, 1970.
7. Элькин, П. М. Колебательные спектры и структурно-динамические модели арсин- и фосфин-замещенных дифенила / П. М. Элькин, В. Ф. Пулин, Е. А. Джалмухамбетова // Журнал прикладной спектроскопии. – 2008. – Т. 75, № 4. – С. 464–467.
8. Эрман, Е. А. Информационная технология Gaussian и структурно-динамические модели кислородосодержащих соединений / Е. А. Эрман, П. М. Элькин, О. Н. Гречухина // Вестник СГТУ. – 2009. – № 2 (39), вып. 2. – С. 108–114.
9. Frisch, M. J. Gaussian 03, Revision B.03; Gaussian / M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel et al. – Pittsburgh : Gaussian Inc., 2003.
10. Wang, D. An ab initio quartic force field of PH_3 / Dong Wang, Quang Shi, Qing-Shi Zhu // Journal of Chemical Physics. – 2000. – Vol. 112, № 21. – P. 9624–9631.

УДК 519.6

МОДЕЛИРОВАНИЕ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ ДВОЙНЫХ ПЕРОВСКИТОВ НА ОСНОВЕ НЕЙРОННОЙ СЕТИ ХОПФИЛДА

Т.В. Панченко

Исследуется влияние степени разупорядочения в подрешетках катионов на магнитные свойства двойных перовскитов $\text{A}_2\text{B1B2O}_6$ с применением нейронной сети Хопфилда. Моделирование проводилось на кубической решетке, в узлах которой располагаются атомы сортов B1 и B2. Распределение атомов в решетке задается соответственно степени разупорядочения в подрешетках катионов. Энергия сети Хопфилда описывается гамильтонианом энергии модели Изинга. Моделирование проводилось для соединений $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ и $\text{PbFe}_{1/2}\text{Nb}_{1/2}\text{O}_3$.

Ключевые слова: двойные перовскиты, нейронная сеть Хопфилда, модель Изинга, антиструктурный дефект, степень разупорядочения, магнитные свойства, SFTMO, PFN.