

МОДЕЛИРОВАНИЕ АЭРОГЕЛЯ SiO_2 МЕТОДОМ СИЛЬНОЙ СВЯЗИ

Валуев И.А.

ИТЭС ОИВТ РАН, Москва

valuev@ihed.ras.ru

Разработанный несколько десятилетий назад полуэмпирический метод сильного связывания (МСС) [1, 2] начал с нарастающей интенсивностью использоваться в современных расчетах потенциальных поверхностей атомных систем. Интерес к методу обусловлен его вычислительной простотой и в тоже время возможностью его детального теоретического обоснования с помощью теории функционала плотности. Метод позволяет численно моделировать энергию взаимодействия в системе многих атомов в зависимости от координат атомов. МСС использует понятие электронной структуры и является простейшим квантово-химическим методом, в то же время он обладает во многих случаях точностью, сравнимой с точностью метода функционала плотности. Особенно перспективным является использование МСС для больших систем (более тысячи частиц).

В настоящей работе МСС, адаптированный для широкого диапазона межатомных расстояний, используется для моделирования больших кластеров SiO_2 (до 10^4 частиц). Кластеры являются прототипом структуры аэрогеля. Моделирование проводится методом молекулярной динамики. Исследуются отличия в электронной структуре аэрогеля по сравнению с электронной структурой сплошного SiO_2 , обусловленные наличием зоны поверхностных состояний. Произведен численный эксперимент по адиабатическому сжатию системы кластеров SiO_2 .

1. Харрисон У. Электронная структура и свойства твердых тел. М., 1983.
2. Horsfield A.P. et al. // Phys. Rev. B. 1996. V.53. P.12694.