

Содержание:

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

- Лаврентьев А.А., Габрельян Б.В., Никифоров И.Я.
Модельный расчет электронно-энергетической структуры алмаза, BN, BeCN₂
- Ерусалимский Я.М., Водолазов Н.Н.
Нестационарный поток в сети

ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ

- Нейдорф Р.А., Кобак В.Г., Титов Д.В.
Сравнительный анализ эффективности вариантов турнирного отбора генетического алгоритма решения однородных распределительных задач
- Тугенгольд А.К., Борисова Л.В., Димитров В.П.
Корректировка технологических регулировок на основе нечеткого логического вывода
- Чукарин А.Н., Шамшура С.А.
Моделирование вибраций акустической системы стендов при динамических испытаниях
- Радин В.В.,
Формализация динамических процессов в зернокомбайнах при оптимальном проектировании систем приводов рабочих органов
- Кунаков В.С., Тызыхян В.А.
Определение взаимосвязи между силами, действующими на влажный зерновой материал, находящийся в бункере
- Ермольев Ю.И., Лукинов Г.И.
Моделирование технологической операции предварительной сепарации зернового вороха
- Каменский Е.Н., Булыгин Ю.И.
Исследование технико-экологических и экономических характеристик тепловозных ДВС при использовании топлив качества еуро стандарта
- Тамаркин М.А., Тищенко Э.Э., Лебеденко В.Г.
Повышение качества поверхностного слоя деталей при обработке поверхностным пластическим деформированием в гибких гранулированных средах
- Зинченко Ю.А.,
Оптимизация состава футеровки плавильных печей
- Закалин Е.Н., Русин А.П.,
Улучшение качества дизельного двигателя с ограниченным теплоотводом
- Вассель Н.П., Курень С.Г., Вассель С.С., Павлова И.В.,
Полупроводящие плёнки на основе синтезированного методом твёрдофазных реакций полифосфата галлия
- Попов А.П., Винокуров М.Р.,
Расчет и экспериментальное исследование параметров образцов ферромагнитного материала

- Базюк Т.Ю.
Математическое моделирование процессов управления городским пассажирским транспортом
- Чернышев Ю.О., Венцов Н.Н.,
Минимизация логических функций методом альтернативной адаптации
- Ахвердиев К.С., Лагунова Е.О., Мукутадзе М.А.
Гидродинамический расчет радиального подшипника при наличии электромагнитного поля с учетом зависимости вязкости и электропроводимости от температуры
- Демьянов Ал.Ал., Демьянов Ал.Ан., Соседкина О.С.
Обеспечение сохранности элементов колесных пар подвижного состава при башмачном торможении

ГУМАНИТАРНЫЕ НАУКИ

- Орехова Л.Г.,
Метафизика страха в искусстве

СОЦИАЛЬНО-ЭКОНОМИЧЕСКИЕ НАУКИ

- Хашин С.М., Сафронов А.Е., Калугина В.В.
Концептуальные особенности и практические аспекты эффективной организации процесса осуществления научно-технических нововведений
- Воскобойников С.Г.
Социально-экономическая ситуация и реформы начала XIX века на Дону
- Ефременко И.Н.
Особенности экономической и валютной интеграции стран Африки

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

УДК 546.2

А.А. ЛАВРЕНТЬЕВ, Б.В. ГАБРЕЛЬЯН, И.Я. НИКИФОРОВ**МОДЕЛЬНЫЙ РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОННО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ АЛМАЗА, BN И BeCN_2**

Исследована электронно-энергетическая структура ряда подобных соединений: алмаза (C), BN и BeCN_2 . Установлено, что для BeCN_2 вершина валентной полосы формируется p-состояниями N, а дно полосы проводимости - s-состояниями Be и C. Оценена ширина запрещенной полосы E_g в BeCN_2 . Проведено сравнение парциальных и полной плотностей состояний алмаза и BN с рентгеновскими K-спектрами эмиссии и поглощения и рентгеноэлектронными спектрами, а также сравнение соответствующих парциальных плотностей состояний последних с соответствующими плотностями в BeCN_2 .

Ключевые слова: электронно-энергетическая структура, метод локального когерентного потенциала, плотности электронных состояний

Введение. Поиск новых веществ со свойствами, близкими свойствам известных материалов, а также с превосходящими параметрами был всегда важен с точки зрения прикладной науки. Отправной точкой поиска часто служат хорошо изученные и широко применяемые соединения, а новые получают в результате внесения различных искажений (допирование, вакансии, замещение и т.д.) в их кристаллическую решетку. Теоретическое исследование новых (быть может, еще не синтезированных) соединений должно базироваться на сравнении энергетических структур этих и уже известных подобных соединений.

Алмаз и BN уже давно представляют интерес с точки зрения прикладного применения как сверхтвердые материалы, а также и с точки зрения академического интереса к их электронно-энергетическому строению (ЭЭС). Отметим некоторые из работ, посвященные исследованию ЭЭС. Электронно-энергетическое строение в алмазе исследовалось методами рентгеноэлектронной спектроскопии [1-3], а также рентгеновской эмиссионной [4] и абсорбционной [5] спектроскопии. Так, в одной из последних работ [3] приводится экспериментальное значение 23.0 ± 0.2 эВ ширины валентной полосы в алмазе, которое сравнивается с теоретическим значением ширины в 21.5 ± 0.2 эВ, полученным из функционала локальной плотности. Это различие в 2 эВ объясняется наличием возбужденной дырки и связанными с ней многоэлектронными эффектами.

Соединению BN уделено в литературе и продолжает уделяться также достаточно большое внимание. Это относится к рентгеноспектральным исследованиям его гексагональной модификации [6-8], а также аналогичным исследованиям его кубической модификации [7, 9, 10]. Отметим также лишь некоторые теоретические работы по исследованию электронно-энергетической структуры BN [11-13]. Однако результаты работ [11, 12] не доведены до кривых плотностей состояний (приводятся только зависи-