Таблица 1. Значения степеней ковалентности, металличности и ионности некоторых гетероядерных соединений, а также их физико-химические свойства

Связь	характеристика	$C_К$	$C_М$	$C_И$	Плотность ρ кг/м^3 [1]	Температура плавления ºС [1]	Диэлектрическая проницаемость, ε [1]	Ширина запрещенной зоны при 20 ºС, эВ [1, 2]	Подвижность м^2/(В*с) [1, 2]		Общая характеристика различных материалов [1]	
									электронов	дырок	Удельное электрическое сопротивление, ρ	Ширина запрещенной зоны
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
Al	Проводник	44.52	55.48	0,00	2698,90	660,24			0		$10^{-8} – 10^{-5}$ (ρ_{Al} = $0.028*10^{-6}$)	0
AlP	полупроводник	48,62	47,51	3,87	2420,00	2550,00	9,80	2,450	0,008	0,003	$10^{-6} – 10^{+8}$	0.05 – 3
GaP		48,40	47,56	4,04	4130,00	1467,00	10,00	2,200	0,019	0,012		
InP		47,92	47,66	4,42	4790,00	1070,00	12,10	1,350	0,460	0,015		
AlAs		48,14	49,29	2,58	3600,00	1750,00	10,90	2,160	0,028	-		
GaAs		47,93	49,35	2,72	5320,00	1238,00	13,80	1,430	0,950	0,045		
InAs		47,48	49,48	3,04	5690,00	943,00	14,55	0,356	3,300	0,046		
AlSb		46,90	52,25	0,85	4220,00	1060,00	11,21	1,620	0,020	0,055		
GaSb		46,72	52,35	0,94	5620,00	712,00	15,69	0,700	0,400	0,140		
InSb		46,32	52,54	1,14	5780,00	525,00	17,72	0,180	7,800	0,075		
SiO	диэлектрик	51,734	22,340	25,926							10^{7} - 10^{17}	Больше 3

Анализ таблицы 1 показывает, что в ряду фосфидов Al, Ga, In уменьшаются значения $C_К$, увеличиваются значения $C_М$ и $C_И$ и соответственно уменьшаются температуры плавления, ширина запрещенной зоны, а также увеличиваются значения диэлектрической проницаемости и подвижности дырок и электронов. Последнее логично увязывается с увеличением степени металличности и уменьшеним ковалентности. Практически аналогичные изменения происходят и в других классах соединений. Так, например, в ряду арсенидов Al, Ga, In уменьшаются значения $C_К$, увеличиваются значения $C_М$ и $C_И$, уменьшаются температуры плавления, ширины запрещенной зоны, а также увеличиваются значения плотности, диэлектрической проницаемости и подвижности дырок и электронов, последнее связано с увеличением степени металличности. В ряду антимонидов Al, Ga, In уменьшаются значения $C_К$, увеличиваются значения $C_М$ и $C_И$, уменьшаются температуры плавления, ширины запрещенной зоны, а также происходит увеличение плотности, диэлектрической проницаемости и подвижности электронов, что связано с увеличением $C_М$, а подвижность дырок увеличивается от AlSb до элементе GaSb, а затем падает.

Данные приведенные в столбцах (12) и (13) таблицы 1 и литературные данные [4, 5] подтверждаются нашими расчетами. Действительно, различие между классами проводниковых, полупроводниковых и диэлектрических соединений определяется соотношением трех компонент химической связи. В первом классе соединений, представителем которого в таблице 1 является алюминий, $C_К$ меньше 47% (граничные значения для полупроводников), а $C_М$ – более 54% (граничные значения для полупроводников). В полупроводниках $C_К$ и $C_М$ соизмеримы между собой и значительно превалируют над $C_И$, $C_К$ изменяется от 51,72 до 45,07, $C_М$ – от 53,54 до 39,85 и $C_И$ – от 12,69 до 0,85. Что касается диэлектриков, представителем класса которых мы выбрали кремнезем, его степень ковалентности составляет 51,74%, $C_М$ – 22,34 и $C_И$ – 25,93%. Это говорит о том, что чем больше $C_М$ у соединения, тем более он способен проявлять проводящие свойства и наоборот, у диэлектриков эта характеристика составляет наименьшее значение – 22,34%, а ковалентность – наибольшее. Этим и объясняется их полная неспособность проводить электрический ток.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Колесов С.Н., Колесов И.С. Материаловедение и технология конструкционных материалов. М.: Высшая школа, 2004.
2. Физическая химия силикатов учеб. для ВУЗов под ред. чл.-корр. АН УССР А.А. Пащенко. М.: В.Шк. 1986.
3. Скаков Ю.А. Интерметаллиды. Химическая энциклопедия, т 2, М., БРЭ, 1998 с.478 – 486
4. Кислый П.С. Карбиды. Химическая энциклопедия, т 2, М., БРЭ, 1998 с.623 – 625
5. Федоров П.И. Кобальт. Химическая энциклопедия, т 2, М., БРЭ, 1998 с.819 – 822

ДИНАМИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ ВНУТРИМОЛЕКУЛЯРНОГО ВРАЩЕНИЯ В НЕКОТОРЫХ СИСТЕМАХ ДИЕНОВОГО ТИПА

Харченко В.И.
Читинский государственный университет,

Динамический подход, основанный на концепции гамильтониана реакционного пути, позволяет решать колебательные задачи для полученных срезов поверхности потенциальной энергии основного со-

стояния молекулы при ее внутреннем вращении [1,2]. С помощью неэмпирических и полуэмпирических квантовохимических методов получены теоретические функциональные зависимости потенциала от величины двухгранного угла XCCX в соединениях типа HX=CHCH=XH, X= N, P. Существенным фактором является наличие в двойных связях атомов, имеющих неподеленные электронные пары.

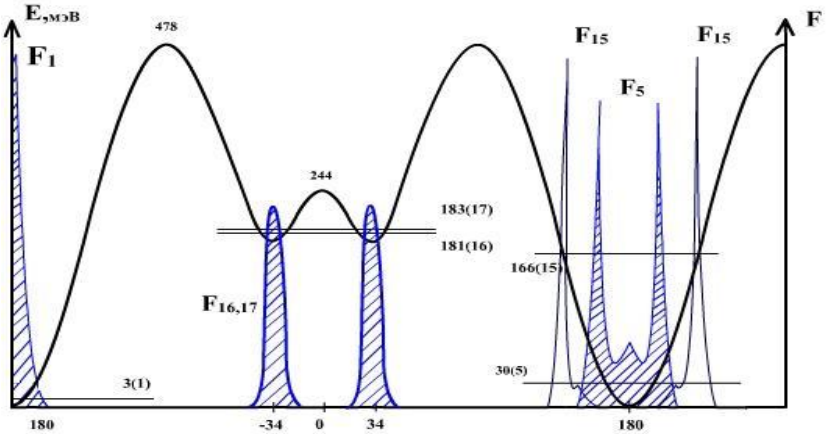

Рисунок 1. Колебательные уровни (мэВ) 1, 5, 15-17 и функции распределения F_i в транс-конформере HP=CH-CH=PH; 181(16) –16-й колебательный уровень соответствует энергии 181 мэВ, 244 мэВ – высота барьера относительно ближайшего мимнимума

Полученный циклический потенциал характеризуется тремя минимумами (рис.1). Например, для соединения HP=CHCH=PH минимумы потенциала наблюдаются при значениях углов φ= ±34° (гош-конформеры) и 180 ^{o} (транс-конформер) [2]. Видно, что потенциальный барьер при φ= 0°, разделяющий два неглубоких минимума, составляет около 60 мэВ, что сопоставимо с тепловой энергией kT молекулы. Поэтому даже при комнатной температуре молекулярная система, находящаяся в наиболее вероятном колебательном состоянии, способна совершить переход между гош-конформациями, обусловленный квантовым туннельным эффектом. Таким образом, структура молекулы в области цис-конформации (φ= 0°) характеризуется широким интервалом допустимых значений φ, что прямо отражается и на электронном строении, и на реакционной способности соединения. При такой динамической нежесткости молекулы даже незначительное ее возбуждение, влияние растворителя и другие факторы способны понизить потенциальный барьер. В этом случае в молекулярной системе могут наблюдаться вызванные туннельным механизмом вращательные колебания большой амплитуды (более 60°) относительно φ= 0°.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Мамаев В.М., Горчаков В.В. Основы химической динамики: потенциальные поверхности и туннельная динамика. - Владивосток: Издательство ДВГУ, 1988.- 112с.

2. Харченко В.И., Бабин Ю.В., Алексейко Л.Н., Мамаев В.М., Павленко С.А. Динамическое строение 1,4-дифосфа-1.3-бутадиена// X Всесоюзное совещание по квантовой химии: Тезисы докладов. - Казань, 1991.- С.89.

Прикладные исследования и разработки по приоритетным направлениям науки и техники

УЧЕТ СИНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЭФФЕКТОВ ПРИ ИНТЕГРАЦИИ В ИНДУСТРИИ ТУРИЗМА

Ашинов С.А.
Территориальное управление Росимущества по КБР, Нальчик

В настоящее время для международного туристического рынка характерны процессы жесткой конкурентной борьбы за клиента, рынки сбыта и сферы влияния. На российском рынке увеличивается число иностранных компаний, занимающихся туризмом, что неизбежно приводит к тому, что большая часть прибыли от международного туризма в России достается иностранным компаниям. Российские туристические организации из-за отсутствия достаточного опыта, знаний, финансовых возможностей, поддержки со стороны государственных органов испытывают большие сложности, чтобы противостоять конкуренции со стороны давно функционирующих на международном рынке компаний, занимающихся туристской деятельностью.

Изменить неблагоприятную ситуацию возможно применяя стратегию синергизма, т.е. путем создания новых моделей организации и управления туристской индустрией, вобравших в себя последние достижения теории и практики глобального хозяйствования и управления. Стратегия синергизма предполагает наличие у организации конкурентного преимущества за счет совместного использования ресурсов (стратегия технологий и издержек), рыночной инфраструктуры (совместный сбыт) или сфер деятельности (синергия планирования и управления). Значение стратегии си-