

електронегативними, ніж атоми С, якісніше забезпечує стабільність перерозподілу зарядів з переходом від центральних атомів вуглецю до атомів С, розміщених по периферії фрагменту, що приводить до ефективнішого усунення проблеми крайових ефектів, дозволяючи зберігати властивості трансляційної симетрії твердого тіла; а наявність зв'язків С-О в реальних зразках склоуглецевого електроду і в кластері, моделюючому його поверхню, дозволяє адекватно передавати фізико-хімічні властивості склоуглецевого матеріалу. Такий висновок підтверджується порівняльним аналізом енергетичних, зарядових і електронних характеристик 4 «конкурентних» КМП, який свідчить на користь КМП  $C_{24}H_{12}$  та  $C_{26}O_{20}$ .

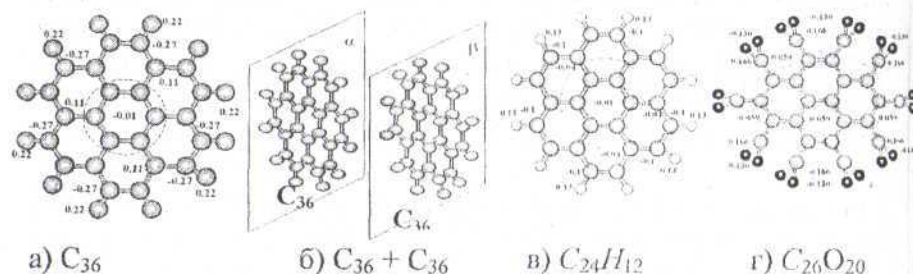


Рисунок 1 – Варіанти рівноважних структур КМП

Заряд на атомах КМП приведений в а.о.з. за Льовдінім;

Вихідні геометричні параметри КМП: а)-г)  $R(C-C) = 1,42 \cdot 10^{-10}$  м;  
б)  $R(\alpha-\beta) = 3,60 \cdot 10^{-10}$  м; в)  $R(C-H) = 1,08 \cdot 10^{-10}$  м; г)  $R(C-O) = 1,17 \cdot 10^{-10}$  м.

Таким чином, до методики загальноприйнятого насичення обірваних зв'язків КМП атомами Н для продовження властивостей трансляційної симетрії [4], можна додати запропонований у цій роботі підхід "навішування" інших частинок, наприклад, молекул  $O_2$ , які суттєво відрізняються своєю електронегативністю від атомів Н, що, на наш погляд, дає можливість не тільки продовжувати, але й зберігати властивості трансляційної симетрії поверхні твердого тіла при моделюванні

поверхні кластером. Разом із тим отриманий результат, безумовно, не виключає традиційний варіант насичення обірваних зв'язків КМП атомами Н для продовження властивостей трансляційної симетрії у твердому тілі, а тільки розширює коло загальноприйнятих методів моделювання поверхні твердого тіла в рамках кластерного підходу.

1. Шаповал В.И., Соловьев В.В., Мальшев В.В. Электрохимически активные частицы и многоэлектронные процессы в ионных расплавах // Успехи химии. – 2001. – Т.№70, №2. – С.182–199.

2. Шаповал В.И., Соловьев В.В. Квантовохимический расчет влияния трех основных факторов на процесс электровосстановления анионов // Укр. хим. журн. – 1995. – Т.61, №8. – С.100–106.

3. <http://www.msg.ameslab.gov/GAMESS/GAMESS.html>

4. Жидомиров Г.М., Багатурьянц А.А., Аброни И.А. Прикладная квантовая химия. М.: Химия, 1979. –295 с.