

МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР
АЛЮМООКСИДНЫХ МАТЕРИАЛОВРуднев С.В., Клишин А.П. (aklishin@yandex.ru)

Томский политехнический университет

MODELING OF CRYSTAL STRUCTURES OF ALUMINUM OXIDE
MATERIALS**Rudnev S.V., Klishin A.P.**

Tomsk Polytechnic University

Постоянно растущие потребности в получении высококачественных кристаллических материалов вызывает пристальный интерес к новым подходам, основанным на моделировании кристаллических структур с использованием различных модельных пространств. В настоящее время все шире используется концепции неевклидовых фазовых пространств для описания общих эволюционных принципов различных физических систем. В связи с этим отмечается особый интерес исследователей к вопросам возможной реализации федоровских групп в неевклидовых пространствах. Реализация федоровских групп симметрии рассматривалась в псевдоевклидовом пространстве, пространстве Лобачевского и пространстве Минковского. Недостатком подобных исследований является то, что в указанных пространствах для модели решеток используют бесконечное протяженное пространство. В настоящей работе предлагается другой, альтернативный, подход к описанию, как строения, так и создания материалов с особыми или уникальными свойствами с помощью интерпретации пространства опыта.

1. Геометрический подход к моделированию кристаллических структур

Для построения геометрических моделей алюмооксидных кристаллических структур был использован подход, применяемый в работе [Rudnev 1988].

Изучать особенности кристаллических структур в R_E можно в сечениях его евклидовой плоскостью двояким образом:

Случай 1: Симметрия структуры известна. Модель кристаллической структуры рассматривается в виде точечных систем, где точки имитируют распределение центров атомов в узлах решетки – так называемые R -системы, которые строятся на компьютере по специальной программе. Сечение евклидовой плоскостью проводится либо перпендикулярно оси симметрии изучаемой структуры, либо под интересующим нас углом.

Случай 2: Симметрия структуры неизвестна или структура плохо изучена с точки зрения симметрии. При этих обстоятельствах задача

усложняется и решается в несколько этапов, которые подробно рассмотрены в [Rudnev 1988].

В пространстве интерпретации R_E складывается иная ситуация. Идеальный кристалл в пространстве интерпретации ограничен в размерах, имеет определенную форму и симметрию, зонален и секториален, а также обладает центром – то есть обладает практически полным набором структурно-симметричных характеристик, которые имеет реальный кристалл минерала.

2. Моделирование кристаллических структур в эллиптической геометрии Римана

В основе предлагаемого теоретического подхода к моделированию кристаллических структур в условиях геометрии Римана лежат исследования различных неевклидовых способов описания элементов кристаллической решетки [Rudnev 1988]. Для достижения результатов используется интерпретация геометрических объектов (S_K , F -групп, симметрий) в геометрии Римана. В трехмерном евклидовом пространстве поверхности Клиффорда (S_K) соответствует 2D тор T_2 , на котором рассматриваются основные геометрические преобразования (решетки, элементы федоровских групп).

Основное отличие от существующих подходов к моделированию заключается в утверждении, согласно которому организация решетчатой структуры происходит в соответствии с определенной F -группой ($I_E^R(F) = \Phi$), действующей в пространстве Римана V_4 .

3. Расчет парных потенциалов межатомного взаимодействия

В пространстве R_E построены модели электростатических компонент параметров ионов в случае парных взаимодействий с учетом распределения заряда на поверхности для следующих ионов, представленных в табл. 1. Предлагаемый подход использует схему, I_E^R , что позволяет изучать особенности и характер взаимодействия элементов в моделируемой кристаллической структуре, исследовать закономерности ее формирования [Rudnev 1988]. Атомные и ионные радиусы, использованные при моделировании, по Н.Белову.

Таблица 1

Расчет радиусов электростатических полей ионов

Ион	Атом. рад., Å	Ион. рад., Å	Радиус электростат. поля, Å
Al^{3+}	1.26	0.53	5.70
O^{2-}	0.66	1.36	11.04

Параметры¹ парного потенциала межъядерного взаимодействия для ряда рассматриваемых систем, рассчитанные с помощью предлагаемого подхода приведены в табл. 2.

¹Примечание: R_0 радиус жесткой компоненты электромагнитного поля, где силы отталкивания имеют преобладающий характер; R_{min} – координата минимума потенциала $V(r)$; ε – величина потенциальной ямы $V(r)$.

Расчет параметров потенциальных кривых межатомного взаимодействия

Тип связи	$R_0, \text{Å}$	$R_{\min}, \text{Å}$	ε, Ry	Радиус электростат. поля, Å
$[\text{Al}^{3+}] - \text{O}^{2-}$	4.66	5.41	-8.73	5.70
$[\text{O}^{2-}] - \text{Al}^{3+}$	5.31	5.84	-2.95	11.04

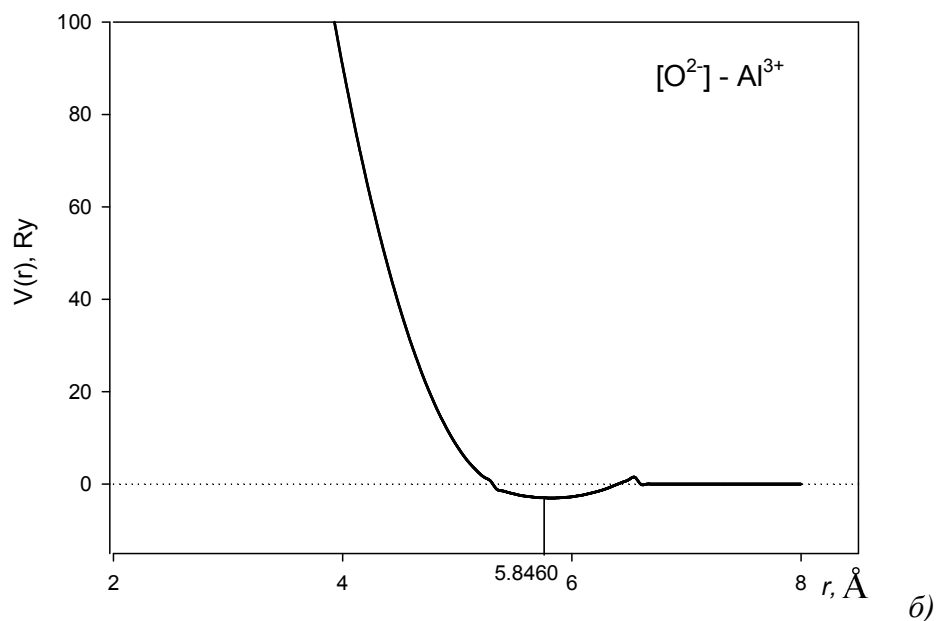
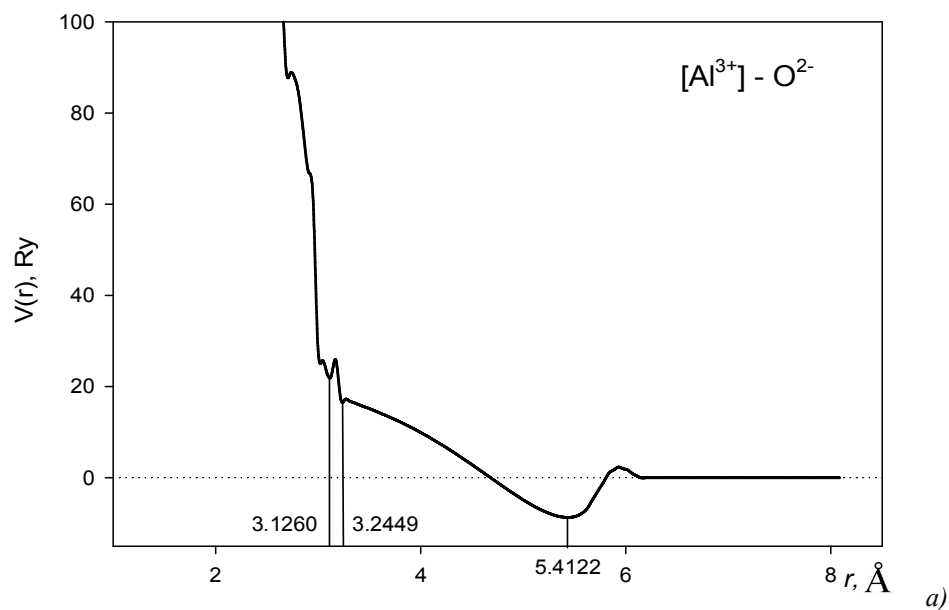


Рис. 1. Модельные кривые потенциалов межатомного взаимодействия, построенные в пространстве R_E

Согласно принципам моделирования изложенных в работах [Rudnev 1988, Семухин 2008, Rudnev 2011], проводился расчет параметров компонент электростатических полей ионов для Al^{3+} , O^{2-} (рис.) участвовавших в

формировании кристаллических подрешеток кристаллов. В пространстве R_E модель электростатического поля ионов характеризуется: ограниченным размером, замкнутостью и непрерывностью. Структура модельного электростатического поля имеет отчетливый зональный характер. Форма распределения энергетических зон, группа симметрий, энергетические параметры определяют тип конфигурации ионов, участвующих в организации подрешеток.

Предложенный подход может быть использован для расчетов геометрических параметров кластерной организации наноструктур оксидов и многих других неравновесных материалов, а так же для разработки практических приложений связанных с совершенствованием структурных характеристик кристаллических материалов.

Rudnev S.V., Semukhin B.S., Klishin A.P. Geometrical modeling of crystal structures with use of space of elliptic Riemannian geometry // Materials sciences and applications. – 2011. – V.2. – №6. – P.526-536.

Rudnev S.V. Application of Elliptic Riemannian Geometry to Problems Crystallography // Computers and mathematics with applications. – 1988. – V. 16, – N. 5-8, – P. 597-616.

Семухин Б.С., Руднев С.В., Галиулин Р.В. Application of Riemann geometry to structures of nano- and macrocrystals // Кристаллография. – 2008. – Т. 53, – № 4. – С. 541-544.