

УДК 53

DOI 10.21661/r-113596

Д.В. Фомин

**РАСШИРЕНИЕ ПРИМЕНИМОСТИ МЕТОДА
КОМПАКТНОГО МАТРИЧНОГО ОПИСАНИЯ
КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР М.С. СЫЧЁВА**

Аннотация: множество современных исследований посвящены созданию и изучению соединений, находящихся в конденсированном состоянии. В связи с этим актуальны разработка и совершенствование методов описания кристаллических структур. Для описания кристаллической структуры и расчёта её ключевых параметров разработаны и продолжают разрабатываться специальные методы. Среди них выделяется метод компактного описания кристаллической решётки предложенный в работах к.т.н. Сычёва М.С. В статье ставится задача исследования применимости этих методов к кристаллам гексагональной сингонии и предлагается способ решения поставленной задачи.

Ключевые слова: анализ, программное обеспечение, кристаллография, кристаллическая решётка, кубическая сингония, гексагональная сингония, постоянная маделунга, коэффициент компактности, матричная модель, гексагональный алмаз, лонсдейлит, кубическая сетка.

D. V. Fomin

**EXTENSION OF APPLICABILITY OF THE CRYSTAL STRUCTURES
COMPACT MATRIX DESCRIPTION METHOD BY M.S. SYCHEV**

Abstract: a lot of modern research devoted to the creation and study of compounds present in the condensed state. In this regard, development and improvement of methods of description of crystalline structures are actual. To describe the crystal structure and the calculation of its key parameters is developed and continue to develop special techniques. Among them is the method of compact

description of the crystal lattice proposed in Ph. D. Sychev M. S. The article seeks to study the applicability of these methods to crystals of hexagonal crystal structure and a method of solving this problem.

Keywords: *analysis, software, crystallography, crystal cell, cubic syngony, hexagonal syngony, constant madelung, coefficient of compactness, matrix model, hexagonal diamond, lonsdaleite, cubic grid.*

В настоящее время много внимания уделяется исследованию и созданию новых соединений, находящихся в конденсированном состоянии. Соответственно, большую актуальность имеют задачи, связанные с созданием моделей различных кристаллических структур, позволяющие рассчитывать их параметры и прогнозировать свойства. Примером создания таких моделей и методов расчёта с их помощью ключевых параметров кристаллических решёток (постоянной Маделунга и коэффициента компактности) можно назвать работы М.С. Сычёва [4; 5].

Авторы работ [4; 5] предлагает новый способ описания кристаллов – матричные модели, представляющие собой математические абстракции реальных кристаллических решёток, а также алгоритмы расчёта энергетического параметра кристалла – постоянной Маделунга и коэффициента компактности. Сильными сторонами предложенных методик являются [4, с. 33]:

- относительная простота;
- компактность;
- значительное уменьшение объёма исходных данных, необходимых для получения результата;
- универсальность (в пределах кристаллических соединений кубической сингонии);
- более высокая точность получаемых результатов.

Но приведённые в работах [4, с. 33, 57; 5 с. 87] методики построения модели и расчёта параметров кристаллической решётки применены только к кристаллическим структурам *кубической сингонии* [2, с. 410–424; 5, с. 86–101;

3, с. 69–79]. Учитывая названные выше сильные стороны данной методики, было бы значительным достижением распространить её применение к соединениям, имеющим более сложную структуру кристалла. Например, к соединениям, образующим кристаллы гексагональной сингонии. Одним из таких материалов является аллотропная модификация углерода – гексагональный алмаз или лонсдейлит [1, с. 3437–3446].

Если методы, приведённые в работах [4, 5], удастся применить к лонсдейлиту, то принципиальная применимость этих методов к кристаллам гексагональной сингонии можно будет считать доказанной.

Возможны различные подходы к поиску ответа на вопрос о применимости методов из работ [4; 5] к кристаллам гексагональной сингонии. Эти методы основаны на формировании матричных моделей исследуемой кристаллической структуры и на расчёте параметров решётки на основе полученных матричных моделей. Формирование матричных моделей в свою очередь основывается на соотношении частиц структуры с определёнными точками куба [4, с. 33–56]. Соответственно, ответ на поставленный вопрос может дать моделирование структуры гексагонального алмаза и соотношение её с кубической сеткой: если кубическую сетку и структуру лонсдейлита удастся соотнести так, чтобы все частицы углерода, составляющие кристалл гексагонального алмаза, оказались в узлах кубической сетки, то применимость метода из работы [4] к лонсдейлиту можно будет считать доказанной.

Кристаллическая структура гексагонального алмаза представима в виде слоёв правильных тетраэдров. При этом тетраэдры каждого следующего слоя можно считать развёрнутыми вокруг своей вертикальной оси на 60° . Узлами этой структуры являются атомы углерода. Фрагмент модели кристаллической структуры гексагонального алмаза представлена на рисунке 1.

Кубическая сетка в данном случае представляет собой структуру, состоящую из кубов с одинаковым ребром, расположенных так, что соседние кубы имеют либо 1 общую грань, либо 1 общее ребро, либо 1 общую вершину. Такая кубическая сетка представлена на рисунке 2.

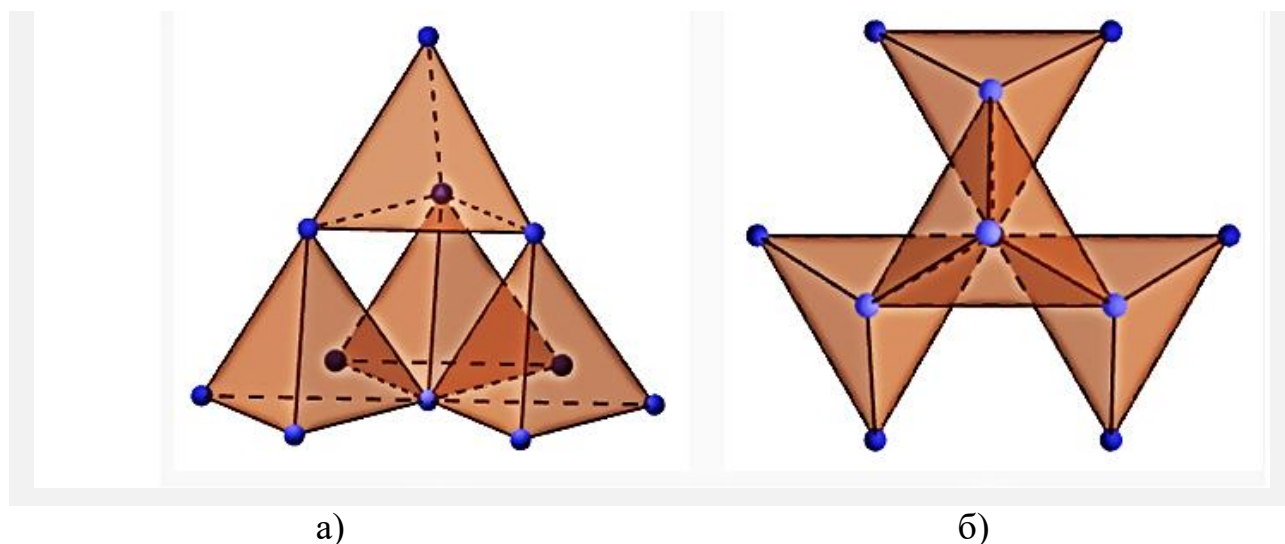


Рис. 1. Фрагмент модели кристаллической структуры гексагонального алмаза: а) – вид с боку, б) – вид сверху

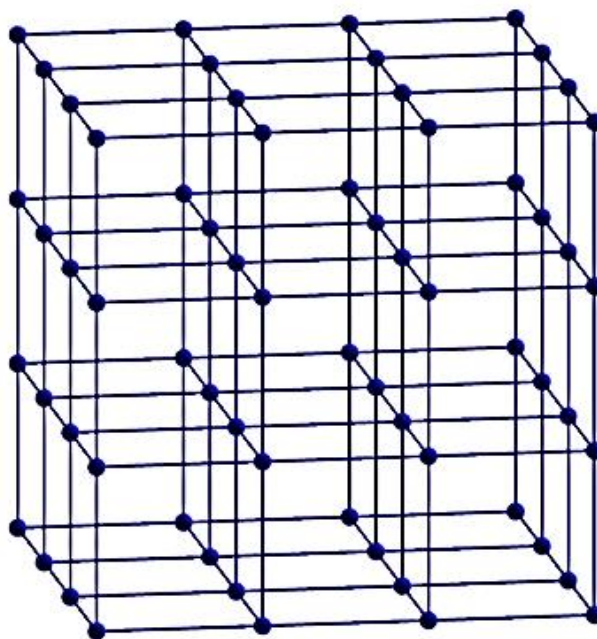


Рис. 2. Фрагмент кубической сетки размерами 3 x 3 x 3 элементарных ячеек

Очевидно, что различные варианты взаимного расположения и размеров моделей структуры гексагонального алмаза и кубической сетки даёт различные результаты в плане наложения этих структур друг на друга и в частности совпадения их точек. Таким образом, вопрос о возможности применения методов

работы [4] к кристаллам гексагональной сингонии сводится к вопросу поиска взаимного расположения и относительных размеров тетраэдрической модели структуры лонсдейлита и кубической сетки, при которых все узлы тетраэдрической модели совпадают с некоторыми узлами кубической сетки.

Для проверки на соответствие установленному критерию варианта взаимного расположения и относительных размеров кубической сетки и модели кристаллической структуры лонсдейлита нужно построить модели этих структур и попытаться их совместить. Результат совмещения должен дать либо сведения, способствующие дальнейшему поиску, либо заключение о совместимости или не совместимости данных структур. При этом результат моделирования и совмещения должен иметь как визуальное выражение, так и числовое.

Так как речь идёт о больших трёхмерных структурах, состоящих из множества элементов, их взаимном расположении и различных размерах друг относительно друга, визуализация этих структур имеет важное значение для оценки промежуточного и поиска итогового результата. Числовое выражение анализа взаимного расположения рассматриваемых структур позволяет повысить точность промежуточных и итоговых заключений о результатах моделирования.

Множество современных исследований посвящены созданию и изучению соединений, находящихся в конденсированном состоянии. В связи с этим большую важность имеют методы описания кристаллических структур таких соединений и основанные на них методы расчёта ключевых параметров кристаллических решёток. Параметры кристаллических решёток во многом определяют свойства соединения. Одними из наиболее важных параметров решёток можно назвать постоянную Маделунга и коэффициент компактности.

Для решения задачи описания кристаллической структуры и расчёта её ключевых параметров разработаны и продолжают разрабатываться специальные методы. Среди них можно выделить метод описания кристаллической решётки соединения с помощью набора специальных матриц и основанные на этом

описании методы расчёта постоянной Маделунга и Коэффициента компактности, предложенные в работе [4, с. 33–56, 57–84].

Данные методы имеют ряд преимуществ перед другими, но, пока, они применимы только к соединениям с кристаллической структурой, относящейся к кубическому типу сингонии. Поэтому, расширение применения этих методов описания и расчёта к соединениям, относящимся к другим типам сингонии, является актуальной задачей.

Таким образом для развития метода компактного описания кристаллических решёток М.С. Сычёва в сторону расширения его применимости к кристаллам других типов сингоний и в частности к кристаллам гексагональной сингонии потребуется выбрать или создать специализированное программное обеспечение. Это программное обеспечение должно позволить строить модели структуры гексагонального алмаза и кубической сетки, выполнять их совмещение и производить анализ полученных данных. Для выбора или создания подходящего программного инструмента исследования необходимо сформулировать чёткие критерии отбора и выполнить анализ существующих программных продуктов, а также перспективы разработки специализированного программного инструмента, отвечающего выбранным критериям.

Список литературы

1. Bundy F.P. Hexagonal diamond-a new form of carbon [Текст] / F.P. Bundy, J.S. Kasper // Journal of Chemical Physics. – 1967. – №46. – С. 3437–3446.
2. Ерёмин И.Е. Моделирование коэффициента компактности кристаллической решетки кристобалита [Текст] / И.Е. Ерёмин, А.А. Остапенко, М.С. Сычёв // В мире научных открытий. – 2015. – №2. – С. 410–424.
3. Ерёмин И.Е. Моделирование коэффициента компактности кристаллической решетки флюорита [Текст] / И.Е. Ерёмин, А.А. Остапенко, М.С. Сычёв // В мире научных открытий. – 2014. – №8. – С. 69–79.

4. Сычёв М.С. Моделирование структурных параметров кубических кристаллических решёток [Текст]: Дис. ... канд. техн. наук: 05.13.18 / Сычёв Михаил Сергеевич. – Благовещенск, 2015. – 130.

5. Сычёв М.С. Численный расчет компактности простых кубических решеток [Текст] / М.С. Сычёв, А.А. Горевой // В мире научных открытий. – 2013. – №2. – С. 86–101

Фомин Денис Васильевич – аспирант кафедры информационных и управляющих систем ФГБОУ ВО «Амурский государственный университет», Россия, Благовещенск.

Fomin Denis Vasilievich – postgraduate student of the Department of Information and control systems of FSBEI of HE «The Amur State University», Russia, Blagoveshchensk.
