

Атомистическое моделирование

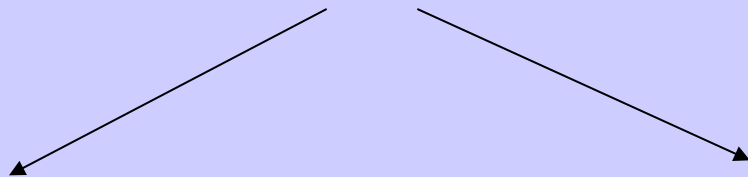


**КРИТЕРИЙ: условие минимума структурной энергии
кристаллического ансамбля**

Задача решается **«ТОЧНО»** квантовохимически и приближенно - с помощью кристаллохимических атомистических полуэмпирических методов моделирования.

Использование кристаллохимических подходов на сегодняшний день, способно принести успех там, где квантовохимические методы пока не в состоянии решить задачу поиска устойчивой атомной конфигурации

Атомистические полуэмпирические методы моделирования.



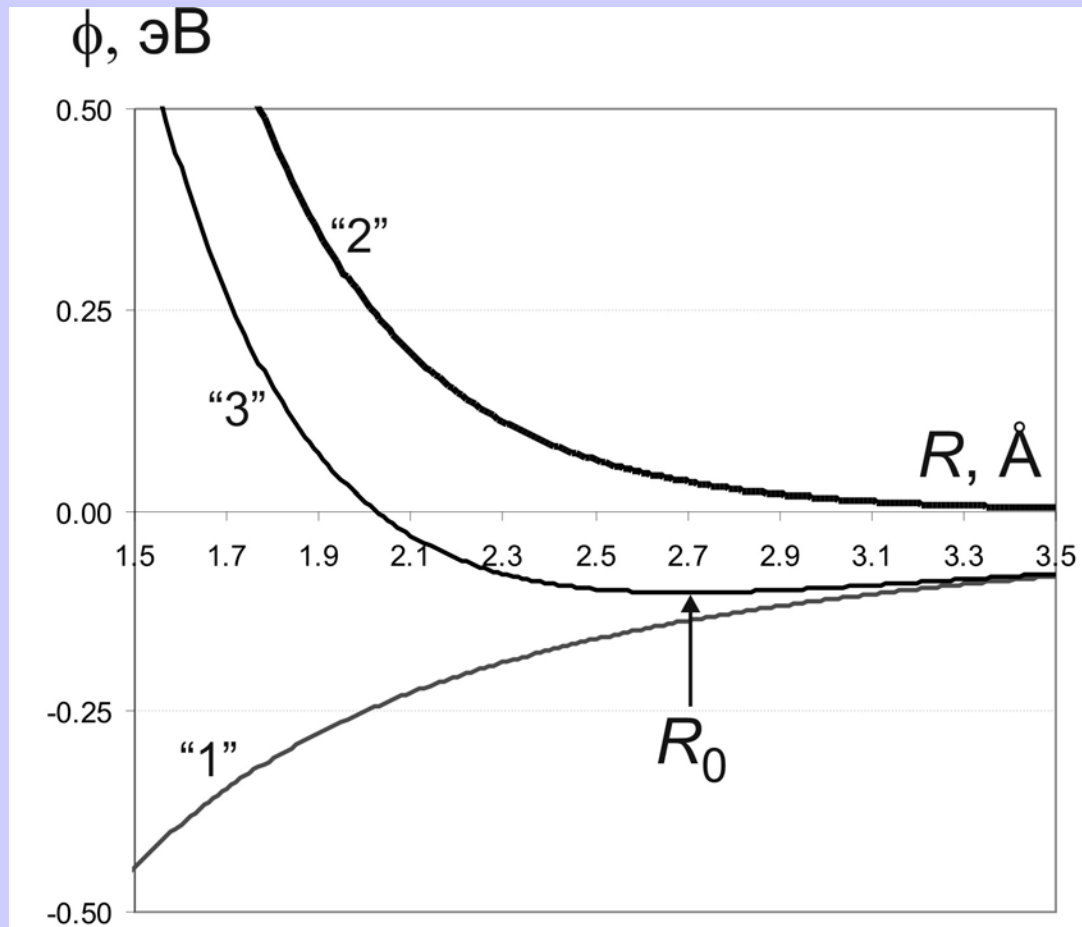
Молекулярная механика
(статическое моделирование)

Молекулярная динамика
(динамическое моделирование)



Потенциалы межионного и межатомного взаимодействия.

$$E_{\text{стат}}^{\text{кул}} = \varphi N = -NA \frac{z^2 e^2}{R}$$

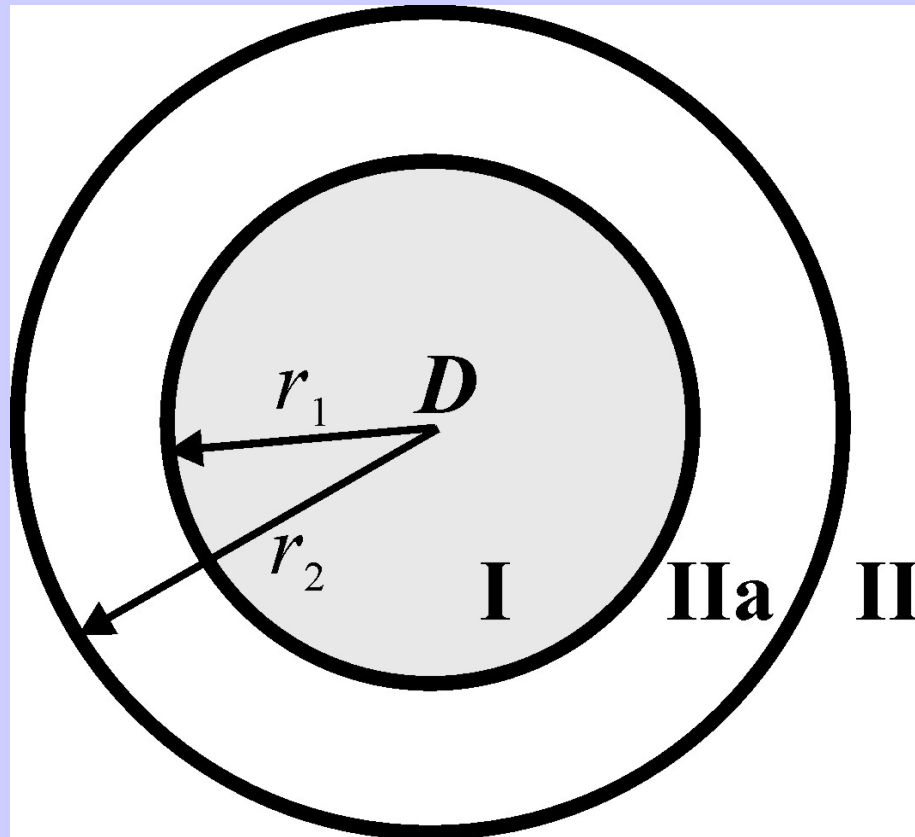


Наиболее распространенные в методе атомистического
моделирования парные потенциалы
(задаются для двух ионов, r – расстояние между ними)

Букингем/Buckingham	$A \exp(-r/\rho) - C/r^6$
Леннард-Джонс/ Lennard-Jones	$A/r^m - C/r^6$
Морзе / Morse	$D[(1 - \exp(-\sigma(r - r_0)))^2 - 1]$
Гармонический (с возможностью включения ангармонических вкладов) / Harmonic	$\frac{1}{2}k_2(r - r_0)^2 + \frac{1}{6}k_3(r - r_0)^3 + \frac{1}{24}k_4(r - r_0)^4$
Полиномиальный/ Polynomial	$c_0 + c_1r + c_2r^2 + c_3r^3 + c_4r^4 + c_5r^5$
«Общий»/ General	$\frac{A \exp(-r/\rho)}{r^m} - C/r^n$

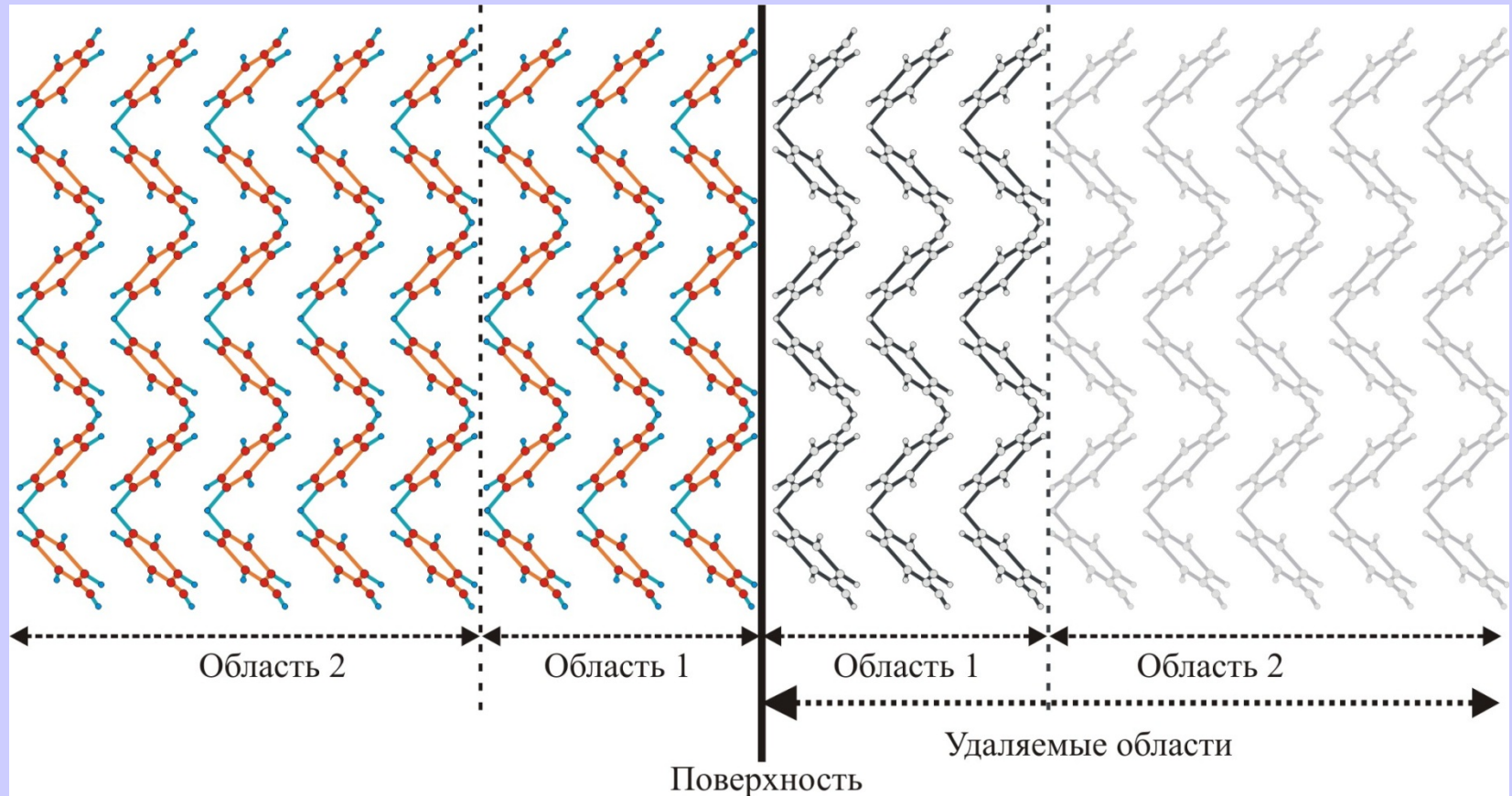
От идеального статического
кристалла к реальному, структурно-
несовершенному
кристаллу

Методика расчета точечных, одно- и двух- мерных дефектов в кристаллах, включая поверхности



Модель «вложенных сфер»

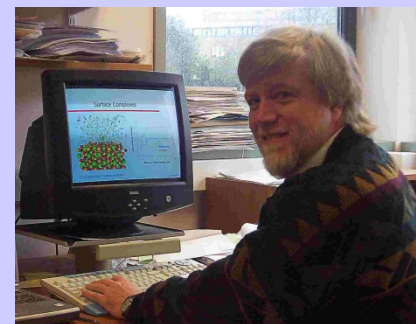
Методика расчета точечных, одно- и двух- мерных дефектов в кристаллах, включая поверхности



Модель двух слоев

Статическое моделирование с использованием межатомных потенциалов

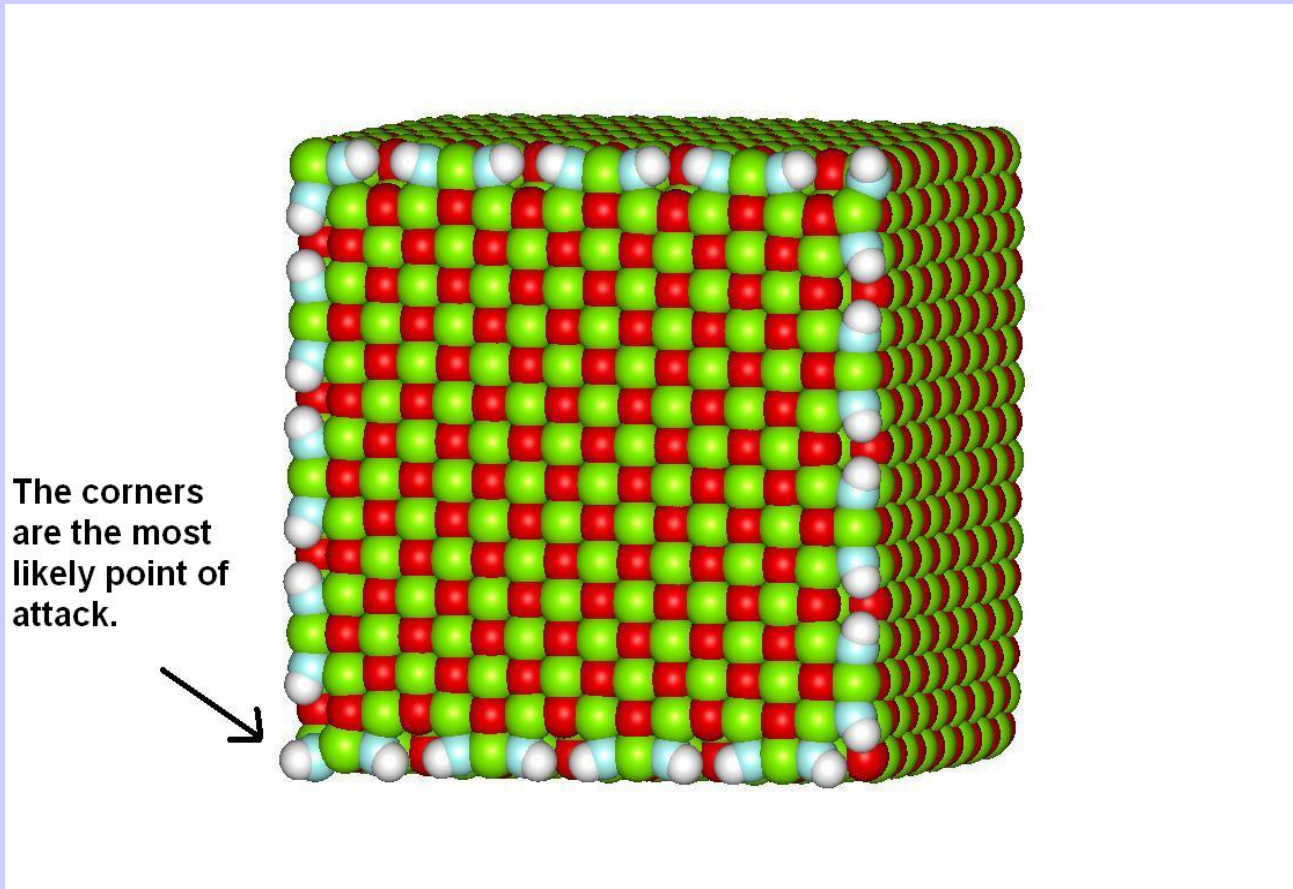
- В исследованиях по структурному моделированию неорганических кристаллов используется ряд программ, (WMIN, EMIN, METAPOCS, PLUTO, CASCADE, GULP и.т.д.).
- **EMIN** программа была написана Л.С.Дубровинским в середине 80-х годов и явилась пионерской отечественной программой в структурном моделировании. К сожалению, программа была написана для компьютеров устаревших несовместимых моделей и в настоящее время не может быть использована.
- Программа **METAPOCS** (С.Паркер) позволяет проводить минимизацию конфигурационной энергии как с фиксированными параметрами элементарной ячейки, так и с возможностью их варьирования по определенным критериям. В отличие от программы METAPOCS в программе **WMIN** существует возможность фиксации некоторой части структурных параметров, что дает возможность проводить частичную оптимизацию с выбранными переменными величинами.



**Professor
Steve
Parker**

Моделирование с использованием межатомных потенциалов

- Программа **METADISE** позволяет проводить энергетическую минимизацию поверхности кристалла – выход на реальную морфологию



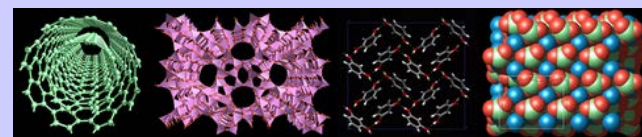
GULP – статическое и динамическое моделирование

• Наиболее мощной программой для подобного рода вычислений является GULP Дж. Гэйла. Этот программный продукт позволяет проводить практически все возможные вычисления в данной области кристаллохимии.



Основные возможности программы следующие:

- выбор алгоритма минимизации;
- использование подавляющего большинства различных потенциалов межатомного взаимодействия;
- оптимизация параметров потенциала и зарядов атомов под различные экспериментальные характеристики кристаллов;
- проведение моделирования при заданных Р-Т условиях;
- использование молекулярно-динамических расчетов;
- расчет фононных спектров кристаллов; ИК- и рамановских спектров, расчет упругих и диэлектрических свойств кристалла, градиентов электрических полей;
- расчет дефектных областей кристалла; расчет парциальных зарядов атомов в кристалле по методу выравнивания орбитальных электроотрицательностей;
- расчет конечных непериодических молекул; расчет путей миграции атомов в кристалле.



<http://www.ivec.org/GULP/>

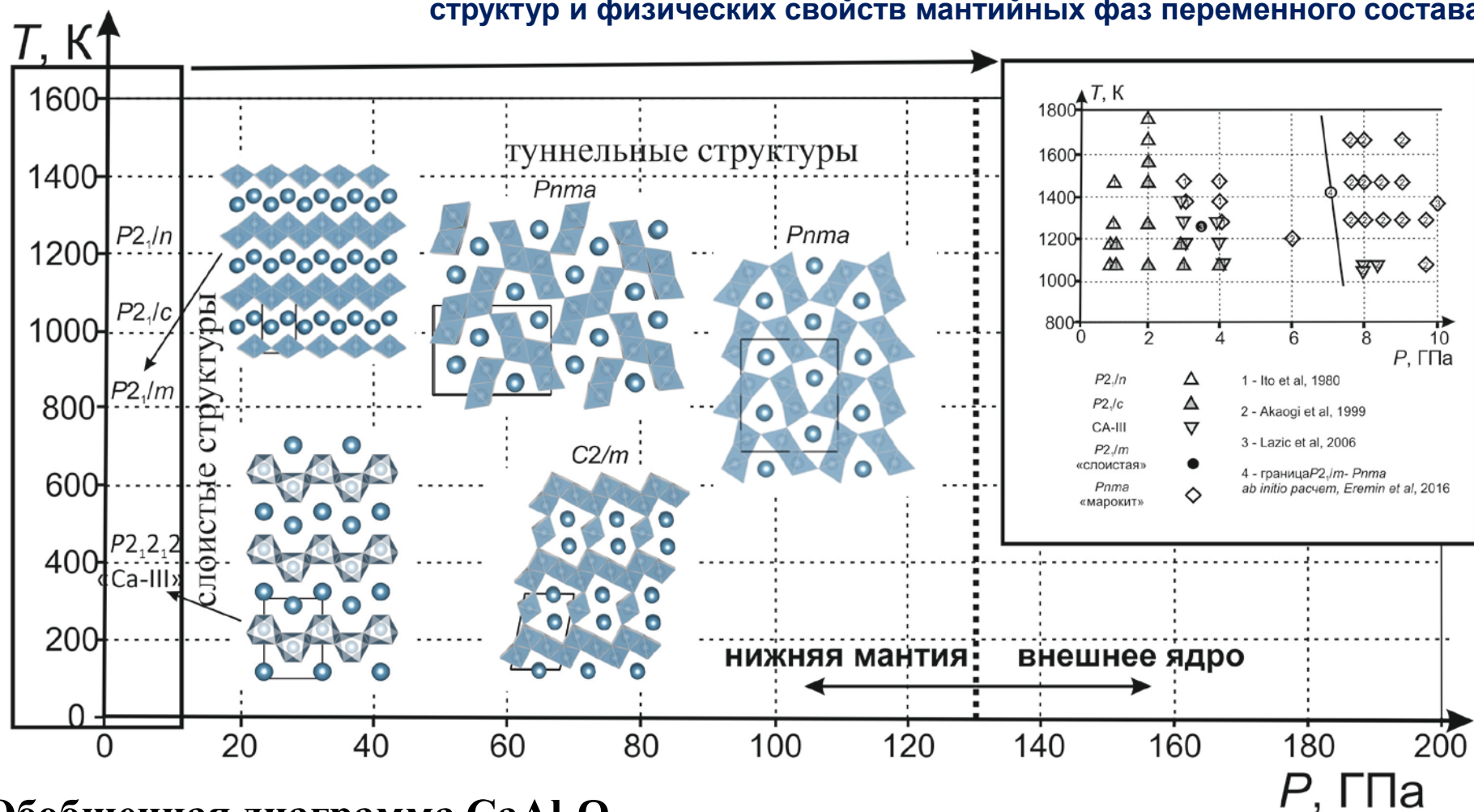
Atomistic and Ab initio modeling of CaAl_2O_4 high-pressure polymorphs under Earth's mantle conditions

Authors

Authors and affiliations

N. N. Eremin , A. E. Grechanovsky, E. I. Marchenko

Атомистическое и квантово-химическое моделирование кристаллических структур и физических свойств мантийных фаз переменного состава

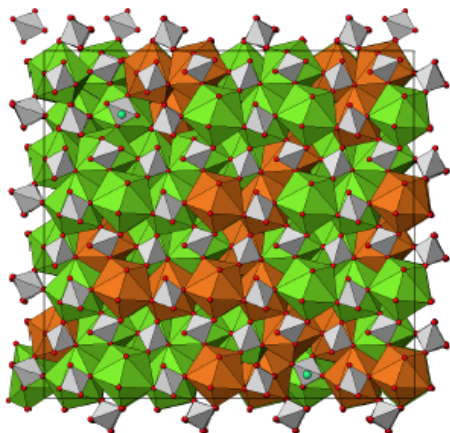
Обобщенная диаграмма CaAl_2O_4

[Ito et al., 1980], [Akaogi et al., 1999], [Lazic et al, 2006] + настоящие расчеты.

Основная литература на этот семестр

Еремин Н.Н., Марченко Е.И., Еремина Т.А.

Современные методы
кристаллохимического прогноза.



Москва, 2024

2025 Современные методы кристаллохимического прогноза: учебно-методическое пособие

Еремин Н.Н., Марченко Е.И., Еремина Т.А.

место издания *Книжный дом Университет Москва*,
ISBN 978-5-00247-088-4, 150 с.

2024 Современные методы кристаллохимического прогноза. Электронное издание сетевого распространения

Еремин Н.Н., Марченко Е.И., Еремина Т.А.

место издания Книжный дом Университет Москва,
ISBN 978-5-00247-081-5, 114 с.

Современные методы кристаллохимического прогноза: учебно-методическое пособие / Н.Н Еремин., Е.И. Марченко, Т.А. Еремина. – М.: «КДУ», 114 с.

URL: <https://bookonline.ru/node/78302>

doi: 10.31453/kdu.ru.978-5-00247-081-5-2024-114.

