

## ЛОКАЛЬНАЯ СТРУКТУРА В СИСТЕМЕ БРОМЕЛЛИТ-ЦИНКИТ ПО ДАННЫМ АТОМИСТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

С. В. Колупаева, А. М. Горяева, Н. Н. Еремин

Геологический факультет МГУ имени М. В. Ломоносова, Москва,  
*sdf\_13-16@mail.ru, a\_goryaeva@mail.ru, neremin@geol.msu.ru*

Набор межатомных потенциалов для атомистического моделирования оксидов бериллия разработанный ранее в [Еремин и др., 2009], был дополнен согласованным потенциалом межатомного взаимодействия Zn-O, который позволил хорошо воспроизвести структурные и упругие свойства цинкита. Рассчитанные параметры элементарных ячеек отличаются от соответствующих экспериментальных значений не более чем на 0.4 %, а объем ячейки – на 0.23 %. Рассчитанные упругие константы цинкита также находятся в согласии с экспериментальными данными и результатами *ab-initio* расчетов [Шейн и др., 2007].

Расширенный набор межатомных потенциалов был использован для геометрического анализа локальной структуры твердых растворов замещения в системе бромеллит BeO – цинкит ZnO. Для расчетов использовалась как модель «вложенных сфер» (метод Мотта-Литтлтона), так и метод сверхячеек. Расчеты велись в сверхячейке 4×4×4 структурного типа вюртцита в пр. гр. *P1* со снятой нетрансляционной симметрией (рис. 1), что обусловлено реальной структурой твердого раствора. Расчеты проводились по программе GULP версии 3.1 [Gale, 2005] на суперкомпьютерном комплексе СКИФ-МГУ «Чебышев». Были построены гистограммы межатомных расстояний M-O и O-O, оценены объемы тетраэдров MO<sub>4</sub>, а также изучены зависимости этих величин от состава твердого раствора.

Оцененные значения податливостей катионных позиций  $C_S$  составили ~32 % для Zn и ~24 % для Be. Столь низкие значения податливостей катионных позиций в сравнении с соответствующими значениями  $C_S$  в других изоморфных системах показывают, что в этом структурном типе тетраэдры ZnO<sub>4</sub> и BeO<sub>4</sub> являются полиэдрами с достаточно сильно выраженной степенью релаксации, а геометрические различия этих полиэдров

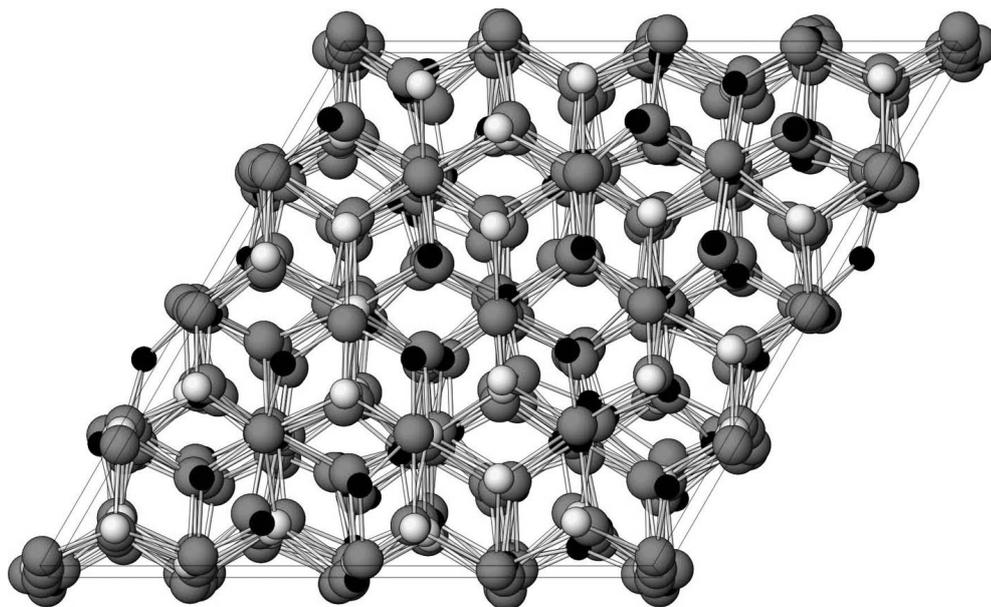


Рис. 1. Сверхячейка, использованная для расчета локальной структуры. Крупные шары – атомы кислорода, мелкие шарики – Be (черные) и Zn (светлые).

сильно ограничивают возможности системы бромеллит-цинкит к образованию смешанных кристаллов при низких температурах. Этот вывод согласуется с рассчитанным в настоящей работе относительно высоким значением энтальпии смешения  $\Delta H_{\text{см}}$  твердого раствора ZnO-BeO достигающего своего максимума = 22 кДж при составе  $\text{Be}_{0.55}\text{Zn}_{0.45}\text{O}$ .

*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 09-05-00403-а.*

### Литература

*Еремин Н. Н., Громалова Н. А., Урусов В. С.* Атомистическое моделирование и предсказание структуры, энергетики точечных дефектов, термодинамических и упругих свойств простых и сложных оксидов бериллия // Физика и химия стекла. 2009. Т. 35. № 6. С. 812–819.

*Шейн И. Р., Кийко В. С., Макурин Ю. Н., Горбунова М. А., Ивановский А. Л.* Упругие параметры моно- и поликристаллических вюрцитоподобных BeO и ZnO: ab-initio расчеты // Физика твердого тела. 2007. Т. 49. № 6. С. 1015–1020.

*Gale J. D.* GULP: Capabilities and prospects // Z. Kristallogr. 220 (2005) 552–554.