

## МОДЕЛИРОВАНИЕ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ КРИСТАЛЛИТОВ НАНОМЕТРОВЫХ РАЗМЕРОВ НА СУПЕРКОМПЬЮТЕРЕ МВС-1000

Дементьев В.А. (ГЕОХИ РАН)

*dementiev@geokhi.ru*

---

Ключевые слова: кристаллиты, наночастицы, колебания, спектры, моделирование, численные расчеты.

Разработан программный комплекс для моделирования колебаний в кристаллитах заданной формы и размеров. Для решения задачи принято молекулярное приближение, в котором рассчитывается полный колебательный спектр гармонических колебаний кристаллита. Точность расчетного колебательного спектра кристаллита ограничивается только точностью задания его геометрических и силовых параметров, а также машинной точностью вычислительных процедур. Это дает возможность решать такие ключевые для минералогии задачи, как выяснение роли поверхностных и внутренних колебаний кристаллитов в генезисе различных поликристаллических форм вещества.

Программный комплекс предусматривает визуальное моделирование структуры элементарной ячейки и кристаллита реальных размеров на персональном компьютере. Далее для кристаллитов с простыми элементарными ячейками расчеты ведутся также на ПК, а для кристаллитов со сложными элементарными ячейками используется суперкомпьютер МВС-1000, на котором расчеты ведутся в режиме параллельных вычислений. Затем колебания кристаллита визуализируются и анализируются на ПК.

Мы предлагаем следующую последовательность действий при формировании кристаллической модели и соответствующие алгоритмы.

Для истинного кристалла декартовы координаты атомов и геометрические параметры элементарной кристаллической ячейки обычно известны из рентгеноструктурных данных. Эти данные вводятся в специальную программу Crystall.m, написанную в системе программирования MatLab. Вводятся химические символы всех атомов ячейки, а также векторы трансляций. Программа транслирует каждый из атомов введенной элементарной ячейки в направлении первого вектора трансляции. При этом программа отслеживает перекрытия новых атомов на грани элементарной ячейки. Такие атомы отбрасываются. Получается столбик из двух элементарных ячеек. Процесс можно повторить любое число раз, задавая для новой модели кратный размер вектора трансляции. В результате получается «одномерная» кристаллическая цепочка. Этим способом можно сформировать пространственную модель кристаллической нити. Известно, что подобные нано-нити уже получены в эксперименте, и их свойства изучаются.

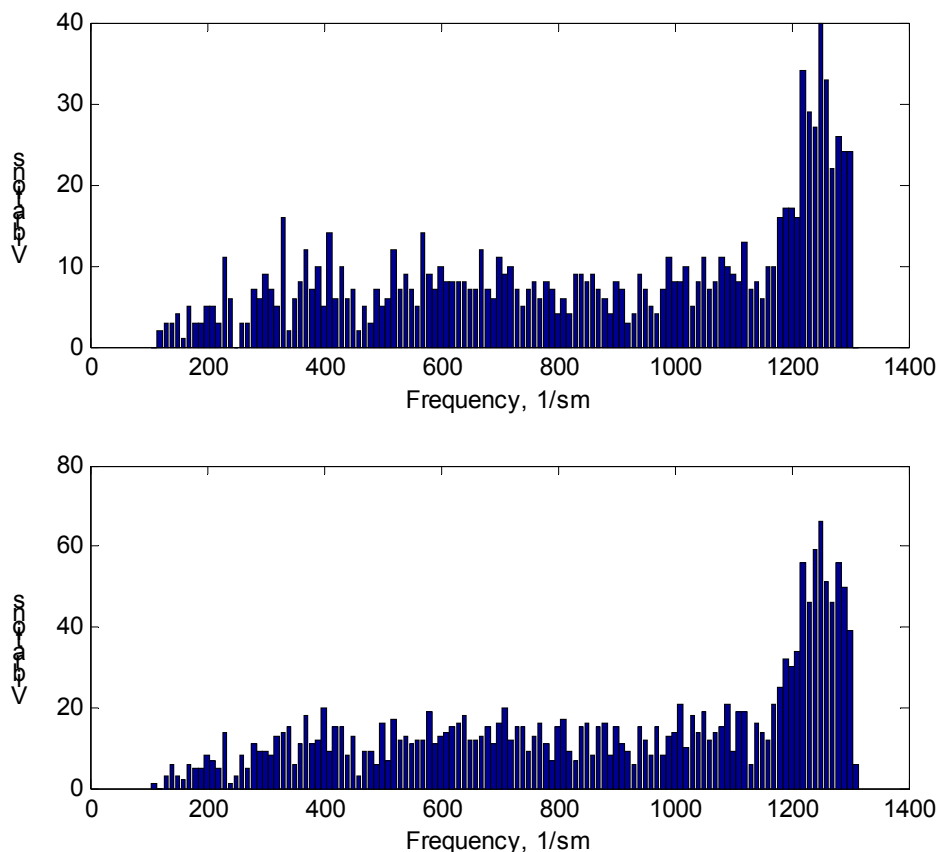
Далее аналогичным способом полученная «одномерная» структура транслируется во втором кристаллическом направлении. При этом получается модель «двумерной» сверхтонкой кристаллической пленки. Такие пленки представляют большой интерес для нанотехники. Затем полученную модель кристаллической пленки можно транслировать в третьем направлении, получая в итоге модель кристаллита любой формы и размеров. В отличие от модели бесконечного кристалла, такая модель имеет четко выраженные поверхности, к которым при желании можно добавить пленки другой структуры, что необходимо для моделирования поверхностных реакций и явлений катализа.

Закончив формирование пространственной структуры кристаллита, программа анализирует расстояния между атомами, находит минимальные расстояния и для найденных таким образом пар атомов делает необходимые отметки в формируемой матрице смежности. Это соответствует возможным валентным связям между атомами в кристалле. На выходе программа создает текстовый файл. В файл помещается число атомов и число валентных связей в кристаллической модели, затем для каждого атома записываются его декартовы координаты и химический символ, затем записывается матрица смежности своим верхним треугольником. Это отвечает формату файлов с расширением .CT, в которые вносит информацию о пространственных структурах молекул известная система химического моделирования ChemOffice. Исследователь при желании может воспользоваться возможностями ChemOffice, чтобы построить нужную ему

кристаллическую модель, и выдать ее во внешний файл в данном формате. Однако наша программа позволяет резко увеличить производительность труда исследователя, поскольку она берет на себя все операции по трансляции элементарной ячейки и по формированию системы валентных связей модели.

Колебательный гамильтониан составляется специализированной программой в зависимых координатах. Затем он автоматически приводится к блочному виду с помощью преобразования симметрии. При диагонализации кинематической части гамильтониана при этом возникают нулевые собственные числа. Их количество равно количеству линейных зависимостей между колебательными координатами. Мы отбрасываем нулевые собственные числа и соответствующие собственные векторы. Динамическая часть гамильтониана составляется программой, которая разыскивает характеристические силовые постоянные в молекулярных базах данных. Эта часть гамильтониана приводится к новым независимым колебательным координатам с помощью полученной ранее системы собственных чисел и векторов. При диагонализации преобразованной динамической части гамильтониана получаются частоты и формы колебаний модели. Формы колебаний описаны в исходной системе зависимых колебательных координат, что значительно облегчает интерпретацию получаемых результатов. В дополнение, формы колебаний преобразуются в декартовы смещения атомов, что позволяет получить визуальную анимационную картину колебаний модели.

В качестве примера приведены результаты расчета колебаний кристаллитов алмаза размером  $4 \times 3 \times 3$  и  $4 \times 4 \times 4$  элементарных ячейки. На рисунке приведены гистограммы распределения частот в колебательных спектрах кристаллитов. Видно, как меняется полный спектр колебательных частот в зависимости от размера и формы кристаллита.



*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (по проекту № 01-07-90042)*

---

*Вестник Отделения наук о Земле РАН - №1(21) 2003*

*Информационный бюллетень Ежегодного семинара по экспериментальной минералогии, петрологии и геохимии 2003 года (ЕСЭМПГ-2003)*

*URL: [http://www.scgis.ru/russian/cp1251/h\\_dgggms/1-2003/informbul-1/mineral-2.pdf](http://www.scgis.ru/russian/cp1251/h_dgggms/1-2003/informbul-1/mineral-2.pdf)*

*Опубликовано 15 июля 2003 г.*

*© Отделение наук о Земле РАН, 1997 (год основания), 2003*

*При полном или частичном использовании материалов публикаций журнала, ссылка на "Вестник Отделения наук о Земле РАН" обязательна*