

МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ КРИСТАЛОУТВОРЕННЯ З ВРАХУВАННЯМ КРИСТАЛІЧНОЇ РЕШІТКИ

Газдюк К.П., Галочкін О.В., Жихаревич В.В., Чижевський В.В.
*Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича,
м. Чернівці*

Сучасний етап розвитку спрямованого синтезу і моделювання процесів кристалоутворення неорганічних систем пов'язаний з впровадженням комп'ютерних методів аналізу при моделюванні механізму формування кристалічних структур і, в першу чергу, із здійсненням програмної реалізації універсальних математичних концепцій. Дослідження механізмів формування кристалічної структури матеріалів має майже столітню історію, однак, повна ясність в питанні яким чином формується та чи інша структурна модифікація цих матеріалів до цих пір відсутня. Одним із найважливіших завдань сучасної кристалохімії є пошук закономірностей, пов'язаних з геометричними і топологічними властивостями структур, які б давали можливість отримувати матеріали з необхідними якостями, а також вивчення процесів самоорганізації систем, причому, безумовно важливим є визначення механізму спонтанного формування, селективного відбору і еволюції кластерів, які формують тривимірні періодичні структури. Центральне місце в цьому завданні займають питання визначення універсального алгоритму протікання процесів самоорганізації та матричної самозбірки кристалічних структур на нанорівні з використанням комп'ютерних методів.

Для побудови таких алгоритмів використано метод рухомих клітинних автоматів (МСА від англ. Movable cellular automata). Слід зазначити, що даний метод дозволяє застосовувати різні підходи і моделі для опису модельованих середовищ. Так, в залежності від функції взаємодії клітинного автомата, існує можливість опису процесів в твердому тілі як на мезомасштабному рівні (з явним урахуванням анізотропії), так і на макрорівні (в наближенні ізотропності автоматів). Важливою перевагою методу МСА в порівнянні з методами механіки суцільного середовища є можливість прямого моделювання процесів самозбірки. Така можливість безпосередньо випливає з постулатів методу, тому не потребує штучних надбудов.

Робота полягає у побудові універсального середовища комп'ютерного моделювання, що дозволяє дослідникам у області кристалоутворення проводити широкомасштабні дослідження з доступом до простої системи 3D-візуалізації змодельованих наноструктур.

Велика увага при цьому приділяється методам аналізу атомних сіток, атомних і молекулярних упаковок, конфігурації пустот і структурних каналів. При моделюванні рухомі автомати є аналогами атомів в кристалічній решітці, впливаючи один на одного, вони приймають участь у самозбірці, прямуючи до стану з мінімумом потенціальної енергії, що відповідає впорядкованій структурі.