



УДК 548.4

© 2005 г. **Е.А. Ванина**, канд. физ.-мат. наук,
И.В. Гопиенко,
А.С. Калашников,
А.Н. Чибисов

(Амурский государственный университет, Благовещенск)

РАСЧЕТ ЭНЕРГИИ ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПАКЕТА ПРОГРАММ FHI96MD

Для кристаллов форстерита с помощью программного пакета FHI96MD рассчитаны энергетические характеристики связи атомов в кристалле, энергии дефектообразования и ширина запрещенной зоны.

Введение

Кристаллы форстерита, легированные хромом, широко применяются в устройствах квантовой электроники в качестве пассивных затворов и активных элементов перестраиваемых твердотельных лазеров [1]. Особое внимание уделяется структурному совершенству лазерных кристаллов, поскольку наличие большого числа структурных дефектов ухудшает оптические свойства кристаллов.

Целью данной работы является уточнение энергетических характеристик связи атомов и дефектообразования в кристалле форстерита.

Форстерит (семейство оливина) относится к ортосиликатам с изоли-

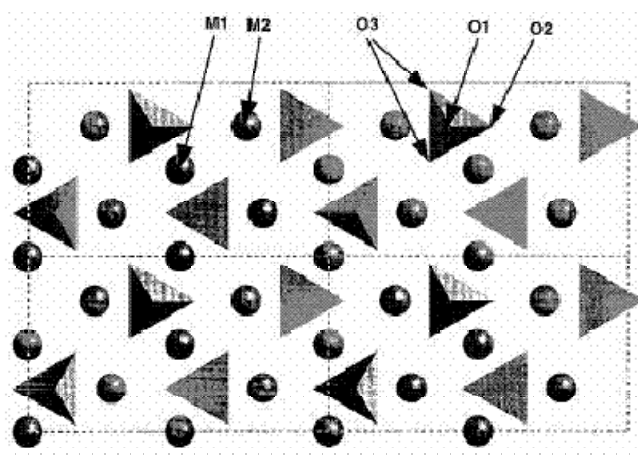


Рис. 1. Кристаллическая структура кристаллов форстерита.

рованным (рис. 1) расположением отдельных тетраэдров $[\text{SiO}_4]$. Кристалл имеет пространственную группу симметрии $P6mm$. В кристаллической структуре форстерита Mg_2SiO_4 ионы O^{2-} образуют несколько искаженную гексагональную плотнейшую упаковку, половина октаэдрических пустот заполнена катионами Mg^{2+} , и 1/8 тетраэдрических пустот – катионами Si^{4+} .

В форстерите атомы магния занимают две кристаллографически неэквивалентные октаэдрические позиции: одна половина атомов находится в октаэдрах с центром инверсии C_i (как M1), а другая – в октаэдрах с плоскостью зеркальной симметрии C_s (как M2); а атомы кремния находятся в изолированных тетраэдрических позициях с зеркальной C_s симметрией [4].

Метод и детали вычислений

Для расчета мы использовали пакет программы FHI96MD [5], структура которой изображена на рис. 2.

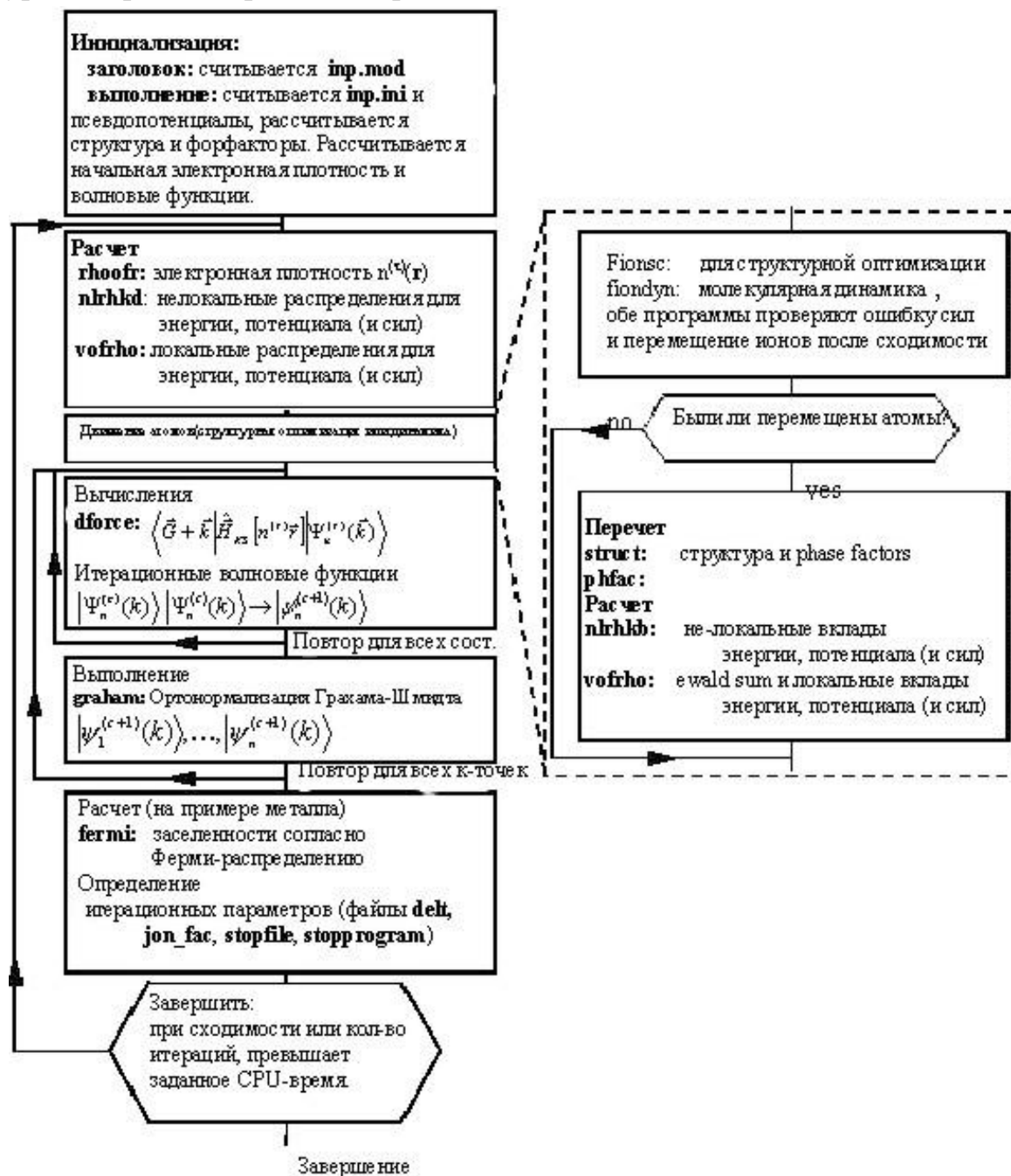


Рис. 2. Блок-схема программы fhi96md.

Пакет представляет собой эффективный инструмент для проведения полноэнергетических расчетов многоатомных систем, таких как молекулы, кристаллы, дефекты в кристаллах и другие структуры.

В пакете реализован метод функционала электронной плотности (DFT) [6, 7], включающий возможность использования псевдопотенциалов и плоских волн.

Метод функционала электронной плотности относится к так называемым *ab initio*, или методам из первых принципов. Это класс методов, который основан только на уравнениях и законах квантовой механики, и при расчетах в них не используются различные параметры и приближения, взятые из эксперимента (что характерно для полуэмпирических методов). Работает теория функционала электронной плотности в рамках адиабатического приближения Борна-Оппенгеймера.

Программа использует методы зонной структуры и позволяет транслировать заданную геометрию элементарной ячейки, что дает возможность распространить расчеты на бесконечный кристалл.

Для вычисления обменной и корреляционной энергии использовалось градиентное приближение в форме, предложенной Педью и Вэнгом (Perdew, Wang: PW91) [8]. Псевдопотенциалы конструировались по методике Труллера-Мартинса (Troullier, Martins) [9] с помощью программы FHI98PP [10]; они были испытаны на отсутствие ложных состояний [ghost states] и проверены на способность воспроизвести основные решеточные характеристики объемных материалов (постоянную решетки и модуль упругости).

Обсуждение результатов

Элементарная ячейка форстерита содержит 28 атомов, то есть 8 атомов магния Mg, 4 атома кремния Si и 16 атомов кислорода O. В элементарной ячейке форстерита начальные координаты атомов магния, кремния и кислорода соответствовали экспериментальным значениям [11]. Производилась релаксация атомной системы. Для этого подбирались такие значения параметров элементарной ячейки, при которых значение полной энергии системы минимально. В табл. 1 приведены равновесные значения параметров и объема ячейки.

На рис. 3 – 6 показаны зависимости полной энергии системы от равновесных значений параметров и объема ячейки. Разброс рассчитанных данных аппроксимировался выражением:

$$E_{fit} = A_1 d^2 + A_2 d + A_3, \quad (1)$$

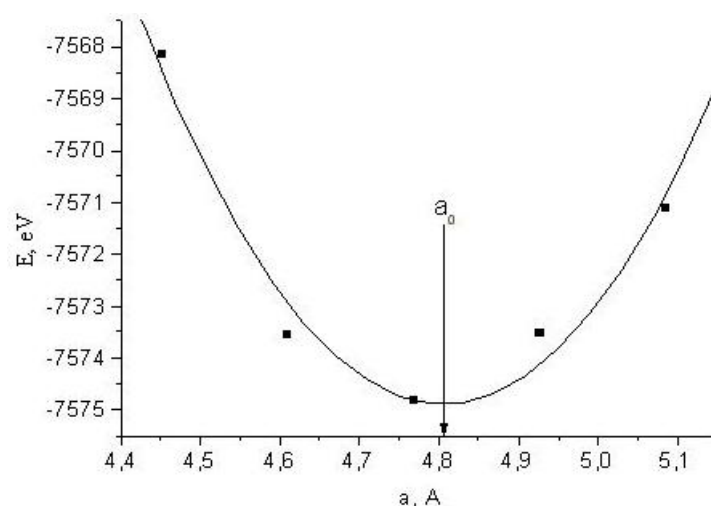
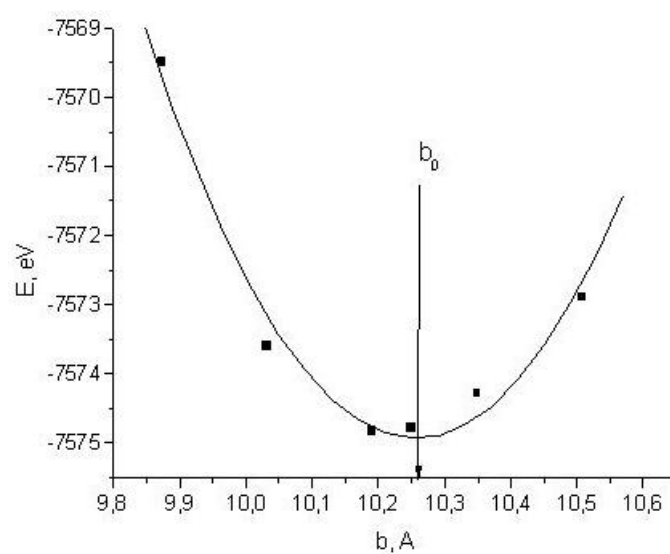
где значения подгоночных параметров A_1 , A_2 и A_3 для постоянных ячейки a, b, c и объема V определялись при минимальном среднеквадратичном отклонении и приведены в табл. 2.

Таблица 1

Параметры ячейки	Расчет $\text{\AA}$	Эксперимент $\text{\AA}$ [12]	Объем ячейки $V, \text{\AA}^3$	
			Эксп. данные	Данные [12]
a	4.805	4.733	299.13	289.75
b	10.256	10.210		
c	6.070	5.996		

Таблица 2

Параметры ячейки	A_1	A_2	A_3
a	51.684 eV/E ²	-496.644 eV/E	-6381.811 eV
b	35.477 eV/E ²	-727.703 eV/E	-3843.267 eV
c	15.492 eV/E ²	-188.074 eV/E	-7004.011 eV
Объем ячейки V	0.011 eV/ $\text{\AA}^2$	-6.786 eV/ $\text{\AA}$	-6560.480 eV

Рис. 3. Зависимость полной энергии от параметра ячейки a .Рис. 4. Зависимость изменения полной энергии от параметра b .

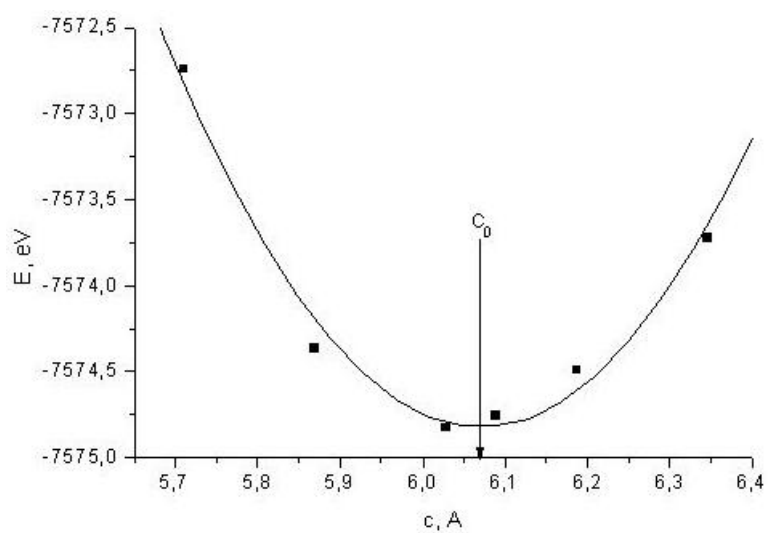


Рис. 5. Зависимость полной энергии от параметра c .

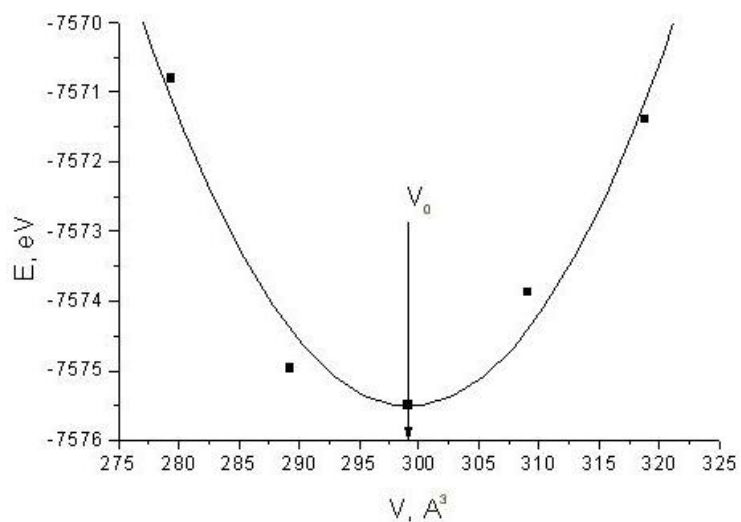


Рис. 6. Зависимость полной энергии от объема ячейки.

В табл. 3 даны равновесные межатомные расстояния для ячейки.

Таблица 3

№	Связь	$\text{\AA}$ [11]	Расчет, $\text{\AA}$
1	Mg1-O4	2.084	2.081
2	Mg1-O5	2.068	2.010
3	Mg1-O6	2.131	2.141
4	Mg2-O4	2.181	2.175
5	Mg2-O5	2.041	2.010
6	Mg2-O6	2.213	2.230
7	Si-O4	1.614	1.609
8	Si-O5	1.655	1.680
9	Si-O6	1.637	1.620

Получив отрелаксированную систему, мы рассчитали энергии связи атомов в ячейке. Один из атомов удаляли из элементарной ячейки на расстояние, при котором силы взаимодействия между атомами несущественны. Определяли энергию связи атома как разницу между энергией связи полной системы и энергией связи системы без одного атома.

В табл. 4 представлены результаты расчета энергий связи атомов в кристалле форстерита.

Таблица 4

Обозначение	эВ [3]	Расчет эВ
Полная энергия системы E_{tot}	-7547.40	- 7575.47
Энергия атома магния E_{Mg}	-42.05	-22.74
Энергия атома кремния E_{Si}	-144.64	-101.96
Энергия атома кислорода E_{O}	-421.54	-424.32
Энергия связи	-112.2	-196.59

Нами рассчитана ширина запрещенной зоны форстерита (широкощелевой диэлектрик).

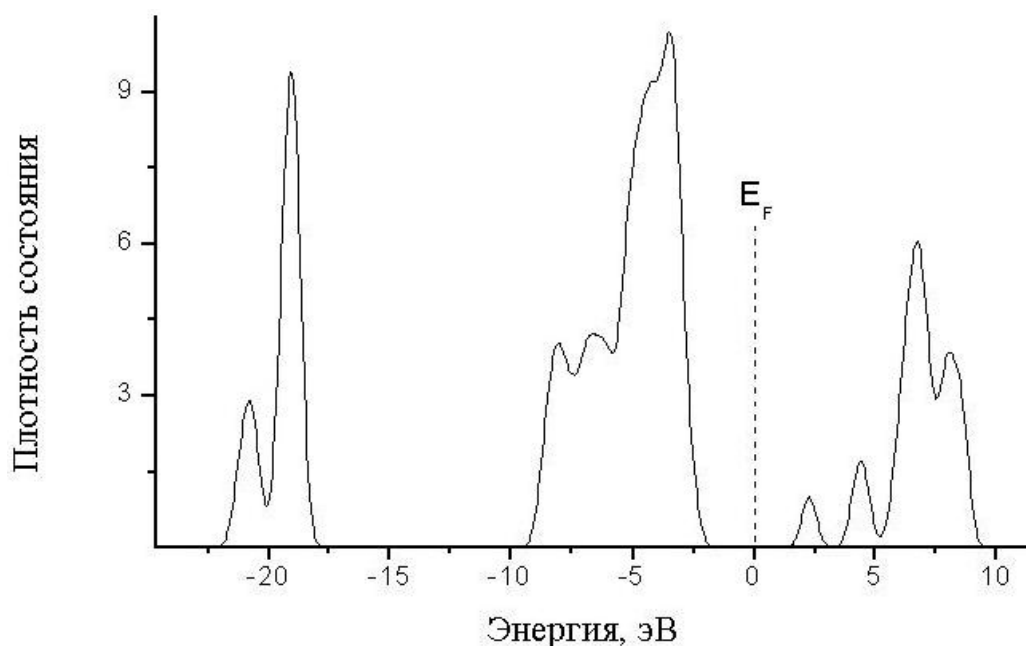


Рис. 7. Распределение электронной плотности.

Ширина запрещенной зоны для данных кристаллов, рассчитанная нами (рис. 7), составляет приблизительно 4,5 эВ. В работе [13] экспериментально установлена ширина запрещенной зоны 6,4 эВ.

Рассчитанные энергии дефектообразования в Mg_2SiO_4 представлены в табл. 5, где V – вакансия.

Таблица 5

Обозначение	Значение энергии дефекта, эВ
$V(\text{Mg})$	16.35
$V(\text{Si})$	17.14
$V(\text{O})$	16.20

Заключение

В работе рассчитаны энергии дефектообразования с использованием пакета программ fhi96md. В основе расчета лежит метод функционала электронной плотности. Для построения равновесной структуры минимизирована равновесная энергия системы (табл. 1, рис. 3 – 6). В методе псевдопотенциала в расчет принимаются только валентные электроны, а влияние ядра и остовых электронов учитывается с помощью псевдопотенциалов, подбираемых таким образом, чтобы отклонения экспериментальных значений от значений, рассчитанных с их использованием, составляли не более 2%.

Для проверки правильности подобранных псевдопотенциалов рассчитаны межатомные расстояния в ячейке форстерита (табл. 3). Энергии отдельных атомов в ячейке рассчитаны для определения энергии связи в кристалле (табл. 4). По распределению электронной плотности определена ширина запрещенной зоны (рис.7). Рассчитанные нами с использованием пакета прикладных программ fhi96md энергии дефектообразования согласуются с результатами расчета [2, 3].

ЛИТЕРАТУРА

1. Гайстер А.В., Жариков Е.В., Лебедев В.Ф. и др. // Квантовая электроника. 2004. Т.34. № 8. С.693.
2. Walker M., Wright K., Staler B. Phys Chem Minerals. 2003. Т.30. Р.536-545.
3. Brobhol J. American Mineralogist. V.82. P.1049-1053.
4. Лебедев В.Ф., Гайстер А. В., Теняков С.Ю., Левченко А.Е., Дуанов Е.М., Жариков Е.В. // Квантовая электроника. 2003. Т.33.
5. Bockstedte M., Kley A., Neugebauer J., Scheffler M. Density-functional theory calculations for poly-atomic systems: electronic structure, static and elastic properties and *ab initio* molecular dynamics. // Comp. Phys. Commun. 1997. V.107. P.187.
6. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous Electron Gas. // Phys. Rev. 1964. V. 136 P. 864.
7. Kohn W., Sham L.J. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects // Phys. Rev. 1965. V.140 A. P.1133.
8. Perdew J. P. and Wang Y. Phys. Rev. B. 1986. V.33. P.8800.
9. Troullier N. and Martins J. L. Phys. Rev. B. 1991. V.43. P.1993.
10. Fuchs M., Scheffler M. Comp. Phys. Commun. 1999. V.119. P.67.
11. http://database.iem.ac.ru/mincryst/rus/s_carta.php?Форстерит+1583
12. Гопиенко И.В., Ванина Е.А., Астапова Е.С., Грохольский А.В., Калашиников А.С. Влияние электронного облучения на структуру кристаллов Mg_2SiO_4 // Вестник АмГУ. 2004. Вып. №25. С.12-15.



13. Morin F.J, Oliver J.R. and Housley R.M. Electrical properties of forsterite, Mg_2SiO_4 // Phys. Rev. 1977. V.16. №10. P. 4434-4445.

Статья представлена к публикации членом редколлегии Е.С. Астаповой.

УДК 621.9.06

© 2005 г. **Н.А. Грек**

(Амурский государственный университет, Благовещенск),

А.Г. Ивахненко, д-р техн. наук,

О.Н. Подленко

(Курский государственный технический университет)

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМООБРАЗОВАНИЯ НА СТАНКАХ С ПАРАЛЛЕЛЬНОЙ КИНЕМАТИКОЙ

Разработаны математические модели формообразующей системы станков с параллельной кинематикой, режущих инструментов и процесса формообразования сложных поверхностей. Полученные модели предназначены для управления процессом формообразования.

Введение

Металлорежущие станки с параллельной кинематикой получают широкое применение в качестве альтернативы многокоординатным обрабатывающим центрам традиционной компоновки с последовательным соединением узлов формообразующей системы. Наиболее распространенными являются фрезерные станки с шестью степенями свободы, реализованные на основе платформы Стюарта [1], – гексаподы. Область их применения – обработка сложных поверхностей. Однако использование при синтезе законов управления формообразующей системы этих станков строится на традиционных подходах [2], заключающихся в назначении технологической траектории перемещения режущего инструмента только на основе его личного опыта. Это не позволяет полностью использовать ресурс гексаподов по точности и производительности обработки. В данной работе поставлена и решена задача разработки модели процесса формообразования для станков с параллельной кинематикой.

Постановка задачи

Узлы станка с параллельной кинематикой на основе платформы Стюарта и различные виды режущих инструментов рассматриваются как