

# ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ПОДХОДЫ К МОДЕЛИРОВАНИЮ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР НЕОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Блатов В.А.<sup>1,@</sup>

<sup>1</sup>*Самарский государственный технический университет*

@ [blatov@topospro.com](mailto:blatov@topospro.com)

На основе предложенной ранее топологической модели реконструктивных твердофазных превращений разработаны методы моделирования кристаллических структур неорганических соединений. Основным этапом всех этих методов является преобразование атомных сеток удалением или образованием межатомных контактов и формированием из исходной сетки соответственно подсеток или надсеток. В результате цепочки таких преобразований из исходной кристаллической структуры можно получить набор структур, находящихся в ее ближайшей топологической окрестности в конфигурационном пространстве химической системы. Уникальность этих структур определяется топологическим различием соответствующих им атомных сеток, что позволяет не рассматривать большое количество структур-кандидатов, имеющих одну и ту же топологию. Дополнительные геометрические и топологические критерии позволяют также существенно сократить число рассматриваемых различных структурных топологий. В частности, введено понятие зоны твердофазной реакции как максимального свободного пространства кристаллической структуры, в котором новые межатомные контакты образуются таким образом, чтобы исключить пересечение или переплетение с уже имеющимися контактами. Разработанные методы использованы для моделирования новых боридов, карбидов, нитридов и силицидов металлов, а также аллотропов углерода. Проведенные расчеты методами теории функционала плотности позволили выявить новые потенциально стабильные фазы и выявить корреляции между их геометрико-топологическими и механическими свойствами.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (проект 22-13-00062).