

ФИЗИКА ПОЛУПРОВОДНИКОВ И ДИЭЛЕКТРИКОВ

УДК 669.24' 783:539.389.1

DOI: 10.17223/00213411/62/12/49

В.В. СЫЗРАНЦЕВ¹, Ю.А. АБЗАЕВ²МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРНОГО СОСТОЯНИЯ АМОРФНЫХ ФАЗ
НАНОРАЗМЕРНОГО SiO₂*

Методами рентгеноструктурного анализа и имитационного моделирования проведено исследование структурного состояния наночастиц SiO₂, синтезированного плазмохимическим и жидкофазным методами. Проведено моделирование аморфного состояния элементарной ячейки фазы SiO₂ в рамках молекулярной динамики. Из первых принципов показано, что полученная ячейка SiO₂ является стабильной. Установлено, что наночастицы находятся в аморфном состоянии. В результате уточнения параметров модельной фазы SiO₂ методом Ритвельда установлена полная структурная информация, определены параметры примитивных ячеек, пространственное распределение атомов, занятость узлов ячеек.

Ключевые слова: метод Ритвельда, параметр решетки, фазовый анализ, аморфное состояние.

Введение

Наночастицы являются широко используемым классом неорганических материалов, свойства которых в значительной мере изучены и активно используются. В то же время ряд характеристик наночастиц при сохранении химического состава являются уникальными и определяются условиями синтеза. Свойства их высокоразвитой поверхности, включая содержание и распределение различных функциональных групп, вид и интенсивность межмолекулярных связей являются важнейшими факторами, определяющими свойства наночастиц и эффективность их применения. Ранее было показано, что возможна вариация атомной структуры наночастиц SiO₂ из плотноупакованной (аэросилы) на ленточную (силикагели) [1]. Кроме того, увеличение размера наночастиц влечет за собой замену поверхностных групп (ОН)₂ на (ОН). В работе [2] показано, что при разных методах синтеза (испарение электронным пучком и высокотемпературный гидролиз) создаются условия формирования плотноупакованных структур атомов SiO₂ с различными поверхностными свойствами наночастиц. На практике данный эффект приводит к изменению интенсивности взаимодействия наночастиц со средой, в которую они допированы, в частности в керамике [3], бетонах [4], полимерах [5].

При этом структурное состояние синтезированных наночастиц SiO₂ значительно менее изучено. Прежде всего это связано с отсутствием данных о пространственном распределении атомов в элементарных ячейках наночастиц, параметрах, пространственной группе, занятости узлов атомами в ячейках и т.д., т.е. отсутствием полной структурной информации синтезированных наночастиц SiO₂. В литературе отсутствуют также результаты имитационного моделирования аморфных структур SiO₂, которые могут быть использованы для структурной идентификации синтезированных разными методами аморфных наночастиц диоксида кремния. Поэтому представляется актуальным моделирование эталонного аморфного домена SiO₂, результаты которого могут быть в дальнейшем использованы для идентификации структур, как это было выполнено для наночастиц, полученных газофазным и пирогенным методами [1, 6].

- Целью настоящей работы является определение полной структурной информации и уточнение структурных свойств элементарных ячеек синтезированных наночастиц диоксида кремния методом Ритвельда, находящихся в рентгеноаморфном состоянии.
- Оценка стабильности элементарных ячеек наночастиц SiO₂, синтезированных плазмохимическим и жидкофазным методами на основе расчетов энергии связи атомов в наночастицах, которые синтезированы различными методами.

* Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 18-43-030012.

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>