

**Кристаллохимический анализ локализации собственных и примесных дефектов в структурах кремнезема**

**Научный руководитель – Еремин Николай Николаевич**

*Крыжановский Станислав Константинович*

*Студент (бакалавр)*

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Геологический факультет, Кафедра кристаллографии и кристаллохимии, Москва, Россия

*E-mail: Blizzak007@yandex.ru*

В настоящее время кварц играет центральную роль в мире технологии, включая волоконную оптику и многие другие отрасли [1].

В данной работе проведено атомистическое моделирование и кристаллохимический анализ примесных дефектов в кристаллической структуре  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>.

Образование точечных дефектов требует определенных затрат энергии. Расчеты проводились методами атомистического моделирования. Для моделирования энергетики и геометрии областей дефектов в исследуемых структурах была использована модель потенциалов межатомного взаимодействия [2], которая позволила качественно воспроизвести структурные особенности исследуемых модификаций, а также рассмотреть энергетику замещения Si на примесные ионы Sn, Ti, Ge с различными зарядами, внедренными в тетраэдрические позиции. Расчеты проводились с использованием процедуры Мотта-Литтлтона, которая позволяет моделировать как электронейтральные дефекты, так и заряженные области.

**Источники и литература**

- 1) Pacchioni G. Skuja L. Griscom D.L. Defects in SiO<sub>2</sub> and Related Dielectrics: Science and Technology. Erice: Springer Science. 2010.
- 2) Pedone A., Malavasi G., Menziani M., Cormack A., Serge U. A New Self-Consistent Empirical Interatomic Potential Model for Oxides, Silicates, and Silica-Based Glasses. Journal of Physics and Chemistry of Solids. 2006. Vol. 110. № 24. P. 11780–11795.