

**Применение программного обеспечения в области вычислений твердости минералов и сверхтвердых материалов**

**Научный руководитель – Еремин Николай Николаевич**

**Ковалев Валентин Николаевич**

*Студент (бакалавр)*

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Геологический факультет, Кафедра геохимии, Москва, Россия

*E-mail: kovvn99.msu16@gmail.com*

Твердость отражает особенности внутреннего строения веществ, это положение дало начало развитию кристаллохимической теории твердости. В настоящее время основные ее положения используются для синтеза материалов. Автор взял для анализа твердости довольно известное семейство природных шпинелидов. Были описаны основные положения теории твердости и факторы, оказывающие существенное влияние на величину твердости [2,3]. Для более полной картины в работе представлены особенности, присущие данной группе минералов [1,4]. В основе вычислений лежит инновационный компьютерный код «USPEX», в процессе своей работы он использует структурные данные веществ (тип химической связи и количество таких связей, электроотрицательность атомов, степень ионности связи, объем элементарной ячейки) [5]. Из этого следует, что данный программный продукт является эмпирической интерпретацией теории твердости. Результаты вычислений твердости некоторых представителей шпинелидов представлены ниже:

- Шпинель  $MgAl_2O_4$  (твердость 8 - 8,5; вычисленная твердость 14,1268 ГПа)
- Герцинит  $FeAl_2O_4$  (твердость 7,5; вычисленная твердость 12,4000 ГПа)
- Ганит  $ZnAl_2O_4$  (твердость 7,5 - 8; вычисленная твердость 13,4503 ГПа)
- Магнезиоферрит  $MgFe_2O_4$  (твердость 5,5 - 6,5; вычисленная твердость 11,3420 ГПа)
- Магнетит  $FeFe_2O_4$  (твердость 5,5 - 6,5; вычисленная твердость 11,1564 ГПа)
- Якобсит  $MnFe_2O_4$  (твердость 5,5 - 6,5; вычисленная твердость 11,1087 ГПа)
- Магнезиохромит  $MgCr_2O_4$  (твердость 5,5; вычисленная твердость 9,6395 ГПа)
- Хромит  $FeCr_2O_4$  (твердость 5,5; вычисленная твердость 9,9342 ГПа)

Данный продукт удобен и несложен в использовании. При работе с данным программным кодом полученные расчетные данные согласуются с данными, взятыми из справочников и определителей [4], значит, данный продукт рекомендуется использовать для вычислений твердости минералов. В дальнейшем использование данной программы могло бы упростить решение многих научных и технических проблем, одна из которых - направленный синтез сверхтвердых материалов.

**Источники и литература**

- 1) Белов Н.В. Очерки по структурной минералогии, М., «Недра», 1976.
- 2) Поваренных А.С., Твердость минералов и определяющие ее факторы, Зап. Узб. отд. Всес. мин. общ-ва, 1958, в.12.
- 3) Поваренных А.С., Твердость минералов, Изд-во АН УССР, 1963 г.
- 4) Типоморфизм минералов: Справочник/ Под ред. Л.В.Чернышевой. М.,Недра,1989.
- 5) Lyakhov A. O. & Oganov A. R. Evolutionary search for superhard materials: Methodology and applications to forms of carbon and TiO<sub>2</sub>. Phys. Rev. B 84, 092103, 2011.