

3. Гусев Б.В., Ин Иен-лян С., Кузнецова Т.В. Цементы и бетоны – тенденции развития. / Под общей редакцией Б.В. Гусева. – М.: Научный мир, 2012. – 136 с.

4. Сидоренко Ю.В., Коренькова С.Ф. Многоуровневый синергетический подход к формированию механизма

твердения контактно-конденсационных систем силикатного типа: монография. – Самара: СГАСУ, 2005. – 112 с.

5. Коренькова С.Ф., Сидоренко Ю.В. Бинарные наполнители для строительных материалов. // Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований, 2014. – № 6. – С. 39 – 40.

Физико-математические науки

ЛОКАЛИЗАЦИЯ АТОМОВ В КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУРАХ НА ОСНОВЕ РАСЧЕТА СУММ ВАЛЕНТНОСТЕЙ СВЯЗЕЙ

Голубев А.М., Кучина Ю.В., Горячева В.Н.,
Березина С.Л., Шаповал В.Н., Якушева Е.А.

Московский государственный технический
университет им. Н.Э. Баумана, Москва,
e-mail: amgol@bmstu.ru

Концепция валентностей связей в настоящее время широко используется в кристаллохимическом анализе структур неорганических соединений с ионным типом химических связей [1]. Согласно данной концепции по аналогии с порядком связи для органических соединений вводится понятие валентности связи для взаимодействий катион – анион в структурах неорганических соединений. Сумма валентностей связей для каждого иона должна равняться абсолютному значению его заряда. Зависимость валентности связи от межатомного расстояния не является линейной. Наилучшее совпадение табличных и рассчитанных зарядов ионов получается при использовании экспоненциальной зависимости валентности связи s от межатомного расстояния d :

$$s = \exp[(R_0 - d)/b],$$

где R_0 и b – табулированные эмпирические параметры. Параметр R_0 характеризует конкретное взаимодействие катион – анион. Для параметра b предложено универсальное значение 0.037 нм^{-1} для всех пар катион – анион, но также используются и индивидуальные значения для каждой пары.

Наряду с оценкой корректности определения кристаллической структуры и идентификации катионов и анионов в спорных случаях применение концепции валентностей связей расширилось до энергетических расчетов [2] и моделирования кристаллических структур [3, 4]. На современном этапе развития компьютерной техники и программного обеспечения по массивам данных сумм валентностей связей, рассчитанных для элементарной ячейки кристалла возможно построение трехмерного распределения отдельных или всех ионов в кристалле [5, 6]. Построение поверхностей одинакового уровня сумм валентностей связей дает информацию о характере распределения ионов в кристалле: локальном или не локальном. Не локальное распределение позволяет в структурах определить каналы проводимости или пути миграции ионов в процессе ионной проводимости.

В настоящей работе нами получены массивы данных сумм валентностей связей для ряда структур с целью оценки возможности использования поверхностей одинакового уровня не только при определении путей миграции ионов, но также при расшифровке кристаллических структур и анализе фазовых переходов первого рода. В целях удобства сравнения результатов для разных структур рассчитывалась разность Δ суммы валентностей связей и абсолютного значения заряда $|z|$ соответствующего иона:

$$\Delta = \sum \exp[(R_0 - d)/b] - |z|.$$

Локализации ионов отвечали в этом случае области около нулевых значений Δ . Для оценки возможности миграции ионов и оценки смещений атомов в результате тепловых колебаний использовались значения Δ с относительными отклонениями $0.1 - 0.2$ от нулевого значения. Суммирование при расчете сумм валентностей связей проводилось в пределах $0.5 - 0.7 \text{ нм}$ в целях гарантированного учета ионов противоположного знака в пределах первой координационной сферы. Значения параметров R_0 были взяты из [1], использовалось универсальное значение параметра b , равное 0.037 нм^{-1} . Для получения поверхностей одинакового уровня полученные массивы данных сумм валентностей связей обрабатывались с помощью программы VESTA [6].

Проведенные нами расчеты для структуры суперионного проводника AgI (рис. 1а) свидетельствуют о корреляции полученных результатов по распределению ионов Ag^+ с высокой ионной проводимостью данного соединения. Поверхности одинакового уровня образуют непрерывное распределение по всему объему кристалла в виде связанных вершинами искаженных тетраэдров. В структуре SrTiO_3 (рис. 1б) поверхности одинакового уровня не образуют непрерывного распределения, что свидетельствует о малой вероятности суперионной проводимости данного соединения. Формы поверхностей одинакового уровня указывают на ангармоничный характер тепловых смещений катионов и аниона кислорода. Для катиона Ti^{4+} – это куб с «вытянутыми» вершинами, для катионов Sr^{2+} – искаженная за счет удлинений вдоль координатных осей сфера, для анионов O^{2-} – тетрагональная призма с закругленными ребрами и вершинами. Данные результаты коррелируют с известными экспериментальными фактами и свидетельствуют о возможности анализа характера тепловых смещений по известным координатам атомов.

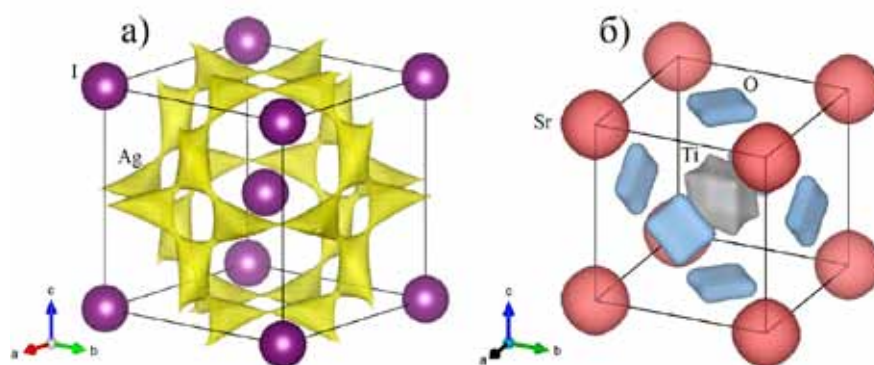


Рис. 1. Поверхности одинакового уровня сумм валентностей связей для катионов Ag^+ в структуре AgI (а) и для катионов Sr^{2+} , Ti^{4+} и анионов O^{2-} в структуре $SrTiO_3$ (б)

Кристаллические структуры PbF_2 и PbS имеют гранецентрированные кубические элементарные ячейки с близкой метрикой. В данных структурах катионы свинца образуют плотнейшую кубическую шаровую упаковку. В структуре PbF_2 анионы фтора расположены в тетраэдрических пустотах катионной упаковки, а в структуре PbS анионы серы – в октаэдрических пустотах. Нами были проведены расчеты поверхностей одинакового уровня сумм валентностей связей анионов для этих структур с одним и тем же усредненным параметром элементарной ячейки 0.5933 нм. Разница в исходных данных при расчетах заключалась только в параметре взаимодействия катион-анион R_0 : 0.203 нм в случае структуры PbF_2 и 0.2541 нм в случае структуры PbS . Полученные результаты однозначно указывают на заполнение анионами тетраэдрических пустот в первом случае и октаэдрических – во втором (рис. 2). Причем для структуры PbF_2 (рис. 2а) проявляется как ангармоничный характер тепловых смещений ионов фтора, так и наличие путей миграции этих ионов, что коррелирует

с экспериментальными данными по ионной проводимости PbF_2 .

В структуре PbS форма поверхностей одинакового уровня близка к сферической (рис. 2б). Локальный характер трехмерного распределения сумм валентностей связей вокруг центров октаэдрических пустот плотнейшей шаровой упаковки катионов Pb^{2+} указывает на низкую вероятность наличия ионной проводимости в PbS .

Фазовый переход первого рода в структуре ZnS при повышении давления связан с превращением структуры типа сфалерита в структуру типа $NaCl$. Нами был проведен расчет поверхностей одинакового уровня для фазы ZnS низкого давления и фазы высокого давления с целью локализации ионов серы. При расчетах использовался параметр $R_0 = 0.209$ нм и параметры элементарных ячеек 0.5394 нм для фазы низкого давления и 0.5094 для фазы высокого давления. Полученные результаты (рис. 3) однозначно указывают на структуру сфалерита в случае фазы низкого давления (рис. 3а) и на структуру типа $NaCl$ в случае фазы высокого давления (рис. 3б).

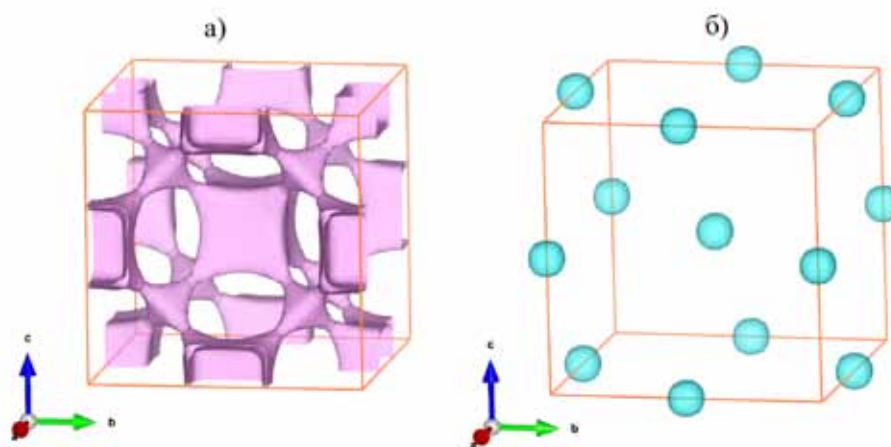


Рис. 2. Поверхности одинакового уровня сумм валентностей связей для анионов F^- в структуре PbF_2 (а) и для анионов S^{2-} в структуре PbS (б)

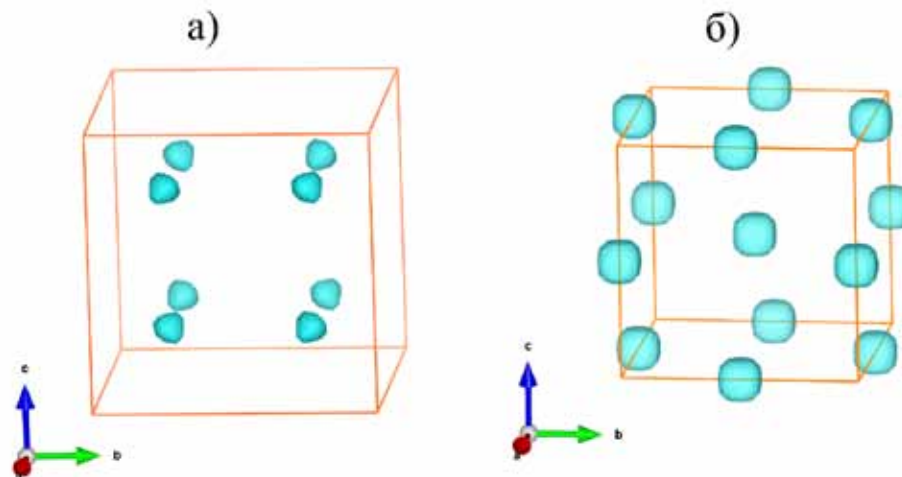


Рис. 3. Поверхности одинакового уровня сумм валентностей связей для анионов S^{2-} в структуре ZnS: а – фаза низкого давления; б – фаза высокого давления

Полученные в настоящей работе результаты указывают на перспективность использования поверхностей одинакового уровня сумм валентностей связей в кристаллохимическом анализе при локализации атомов в структурных исследованиях и при анализе фазовых переходов первого рода.

Список литературы

1. Brown I.D. // Chem. Rev. – 2009. – V. 109. – No. 12. – P. 6858–6919.
2. Sale M., Avdeev M. // J. Appl. Cryst. – 2012. – V. 45. – No. 5. – P. 1054–1056.
3. Голубев А.М., Татьяна И.В., Горячева В.Н., Березина С.Л., Шаповал В.Н. // Совр. естеств.-науч. и гуман. пробл. Сб. тр. М., «Логос». – 2005. – С. 177–183.
4. Голубев А.М., Кучина Ю.В. // Журн. неорг. хим. – 2014. – Т. 59. – № 3. – С. 355–360.
5. Adams S. // J. Power Science. – 2006. – V. 159. – No. 1. – P. 200–204.
6. Momma K., Izumi F. // J. Appl. Cryst. – 2011. – V. 44. – No. 6. – P. 1272–1276.

Философские науки

ФУНКЦИОНАЛЬНОСТЬ ЧЕЛОВЕКА: ЕДИНСТВО ВОЗМОЖНОСТИ И ДЕЙСТВИТЕЛЬНОСТИ

Гаранина О.Д.

Московский государственный технический
университет гражданской авиации, Москва,
e-mail: ogaran@yandex.ru

Особенностью научного исследования человека в современном социогуманитарном знании выступает обращение к трактовке субъекта как силы, способной активно воздействовать на ход развития социальных процессов разного вида. Человек создает новый социальный мир, становится его частью, включаясь в систему детерминационных связей, определяющих функционирование и развитие общества, воплощая в себе его сущностные черты. Кардинальная смена технологической основы общества, осуществляемая в процессе экспансии информационных технологий, неизбежно ведет к кардинальному изменению образа жизни большей части людей, трансформации социально-психологической модели поведения каждой личности и общества в целом. Данная ситуация порождает вопрос о новом социальном типе человека, дискурсивное развертывание которого интенцировано на презентацию его имманентных свойств. Ка-

ким должен быть человек, созидаящий новое общество? Что он представляет в своей функциональной возможности (как потенциал социальной трансформации) и действительности (как фактор динамики общества)?

Логико-гносеологическая интерпретация активности человека в научном знании традиционно осуществлялась в таких словосочетаниях как: «личный фактор», «человеческий фактор», в философских и социологических работах сегодня встречается понятие «антропологический фактор». Стремление к синтетическому выражению функционирования человека в социальной жизни нашло отражение в концепциях человеческого капитала и человеческого потенциала. Возникает вопрос о методологических предпосылках появления данных словосочетаний и о роли, которая отводится рассматриваемым понятиям в рефлексии взаимодействия человека и информационного общества.

Исходный смысл выражения «человеческий фактор» заключается в акцентировании активной роли личности в преобразовании действительности, в рассмотрении человека как творческой преобразующей силы, синкретично включенной в структуры своей деятельности. Полагаем, что в настоящее время дискурс о человеческом факторе должен разрабатываться в русле парадигмы