

УДК 621.315:004.94

Математическое моделирование метрических параметров ГПУ металлов

© 2022 г. П. А. Сеченых^{1,2},✉

¹ *Федеральный исследовательский центр
«Информатика и управление» Российской академии наук,
ул. Вавилова, д. 44, корп. 2, Москва, 119333, Российская Федерация*

² *Московский авиационный институт
(национальный исследовательский университет),
Волоколамское шоссе, д. 4, Москва, 125993, Российская Федерация*

✉ Автор для переписки: p-sechenyh@mail.ru

Аннотация. Электронные, магнитные, механические и другие свойства кристаллических веществ обусловлены особенностью их строения — периодичностью и симметрией решетки, поэтому определение структуры является важным этапом исследования таких материалов. В работе рассмотрен ряд металлов, имеющих кристаллическую решетку структурного типа ГПУ (гексагональная плотная упаковка) — бериллий, церий, кобальт, диспрозий, эрбий, гадолиний, гафний, гольмий, лантан, лютеций, магний, неодим, осмий, празеодим, рений, рутений, скандий, тербий, титан, таллий, тулий, иттрий, цирконий. Показано применение алгоритма имитации отжига для нахождения метрических параметров рассматриваемых материалов с использованием модели плотной упаковки, широко применяемой в кристаллографических расчетах. Представленная в работе собственная программная реализация алгоритма имитации отжига позволяет по заданным химической формуле и пространственной группе симметрии определить координаты атомов, входящих в элементарную ячейку кристаллической решетки, вычислить постоянные решетки и плотность упаковки атомов в ячейке кристалла структурного типа ГПУ. Перечисленные структурные характеристики могут быть использованы в качестве входных параметров при моделировании электронных, магнитных и других свойств рассмотренных соединений. В статье приведено сравнение значений постоянных кристаллической решетки, полученных в результате численного моделирования, с опубликованными данными.

Ключевые слова: алгоритм имитации отжига, гексагональная плотная упаковка, ГПУ

Благодарности: Работа выполнена при поддержке проекта № 075–15–2020–799 Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Для цитирования: Сеченых П.А. Математическое моделирование метрических параметров ГПУ металлов. *Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники.* 2022; 25(4): 283—287. <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2022-4-283-287>

Краткое сообщение подготовлено по материалам доклада, представленного на VI-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов», Москва, 24–26 октября 2022 г.

© 2022 National University of Science and Technology MISiS.

This is an open access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution License (CC-BY 4.0), which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original author and source are credited.

Mathematical modeling of the metrical parameters of hexagonal close-packed metals

P. A. Sechenykh^{1,2,✉}

¹ *Federal Research Center “Computer Science and Control”
of the Russian Academy of Sciences,
44–2 Vavilova Str., Moscow 119333, Russian Federation*

² *Moscow Aviation Institute (National Research University),
4 Volokolamskoe Highway, Moscow 125993, Russian Federation*

✉ *Corresponding author: p-sechenyh@mail.ru*

Abstract. The electronic, magnetic, mechanical and other properties of crystalline substances are due to the feature of their structure — the periodicity and symmetry of the lattice, therefore, the determination of the metrical parameters is an important stage in the study of the characteristics of such materials. The paper considers a number of metals having a crystal lattice of the *hcp* structural type (hexagonal close packing) – beryllium, cerium, cobalt, dysprosium, erbium, gadolinium, hafnium, holmium, lanthanum, lutetium, magnesium, neodymium, osmium, praseodymium, rhenium, ruthenium, scandium, terbium, titanium, thallium, thulium, yttrium, zirconium. The paper shows the application of the annealing simulation algorithm to find the metric parameters of the materials under consideration using the dense packing model, which is widely used in crystallographic calculations. The own software implementation of the annealing simulation algorithm presented in the paper makes it possible to determine the coordinates of the atoms included in the unit cell of the crystal lattice, to calculate the lattice constants and the packing density of atoms in the cell of the crystal of the *hcp* structural type, using the given chemical formula and space symmetry group. These structural characteristics can be used as input parameters in modeling the electronic, magnetic, and other properties of the considered materials. The paper compares the values of the crystal lattice constants obtained as a result of numerical simulation with published data.

Keywords: annealing simulation algorithm, hexagonal close-packed, HCP

Acknowledgments. The work was supported by project No. 075–15–2020–799 of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation.

For citation: Sechenykh P.A. Mathematical modeling of the metrical parameters of hexagonal close-packed metals. *Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronics Engineering*. 2022; 25(4): 283–287. <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2022-4-283-287>

Введение

Металлы (в том числе, редкоземельные) широко применяются в различных отраслях электронной промышленности, что обуславливает актуальность исследования их свойств.

Информация о структуре и свойствах материалов особенно важна при работе с объектами микро- и наноразмеров из-за высокой сложности проведения натурального эксперимента с ними. Это делает актуальным применение математического моделирования и аналитических исследований для прогнозирования материалов с требуемыми характеристиками.

Данная статья посвящена численному моделированию метрических параметров кристаллических материалов — постоянных кристаллической решетки (a , b , c) и плотности упаковки атомов в элементарной ячейке. Рассмотрен ряд металлов, реализуемых в структурном типе ГПУ (гексагональная плотная упаковка).

Расчет метрических параметров

Для расчета метрических параметров была использована модель плотной упаковки, широко распространенная для моделирования кристаллических материалов. Согласно данной модели, атомы

заменяют твердыми несжимаемыми шарами определенного радиуса [1]. Под плотностью упаковки понимают отношение суммарного объема атомов, входящих в элементарную ячейку, к объему ячейки [2—4], т. е.:

$$\rho = \frac{V_a}{V},$$

где V_a — суммарный объем атомов, входящих в ячейку; V — объем элементарной ячейки кристаллической решетки. Требуется найти такую конфигурацию атомов элементарной ячейки, которая соответствует минимальному значению объема ячейки, и, следовательно, максимальному значению плотности упаковки. Система атомов считается устойчивой в рамках рассматриваемой модели, если значение $\rho \in [0,47, 0,74]$. В работах [5—6] показано использование этого подхода для расчета метрических параметров соединений различных классов (оксиды металлов [5], перовскит, двойной перовскит [6]) с кристаллической решеткой кубического типа симметрии ($a = b = c$, углы ячейки $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$). В данной работе он применяется для кристаллов с гексагональной решеткой ($a = b \neq c$, $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$, рис. 1). Были рас-

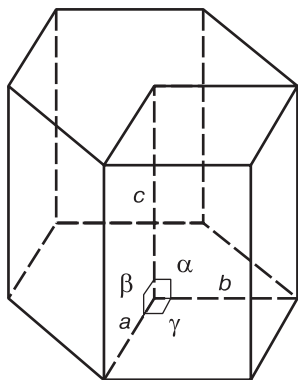


Рис. 1. Гексагональная кристаллическая решетка
Fig. 1. Hexagonal crystal lattice

смотрены металлы, кристаллическая решетка которых реализуется в структурном типе ГПУ (гексагональная плотная упаковка, рис. 2). Такая структура описывается пространственной группой симметрии $P6_3/mmc$ (№ 194 [7]), позиция Уайкова 2с. Кроме того, гексагональная кристаллическая решетка характеризуется величиной c/a . В идеальных плотно упакованных металлах с гексагональной кристаллической решеткой отношение $c/a = 1,633$ [2].

Программная реализация

Для решения поставленной задачи применялась собственная программная реализация алгоритма имитации отжига [8] на языке программирования C# [9], входными данными для которой

являются химическая формула, радиусы атомов, входящих в соединение, а также пространственная группа симметрии и справочная кристаллографическая информация (в частности, операции симметрии и позиции Уайкова [7], входящие в выбранную пользователем группу).

Справочная информация, необходимая для расчетов, хранится в ранее разработанной базе данных. Для работы была выбрана реляционная система управления базами данных (СУБД) MS SQL Server [10], которая позволяет обеспечить логическую целостность спроектированной схемы и возможность доступа к информации посредством SQL-запросов. Доступ к данным осуществляется с использованием библиотеки Entity Framework 6.1.3 для взаимодействия с СУБД и обработки данных [11, 12].

Выходными данными, получаемыми в результате работы расчетного модуля, являются:

- постоянные кристаллической решетки (a, b, c);
- плотность упаковки;
- координаты входящих в элементарную ячейку атомов.

Результаты расчетов и набор входных параметров также сохраняются в соответствующей подсхеме базы данных и могут быть использованы для дальнейших исследований.

Радиусы атомов химических элементов для проведения расчетов были взяты из [13].

Результаты моделирования

Основные результаты вычислений приведены в табл. 1.

Данные, приведенные в табл. 1, показывают, что результаты моделирования структурных ха-

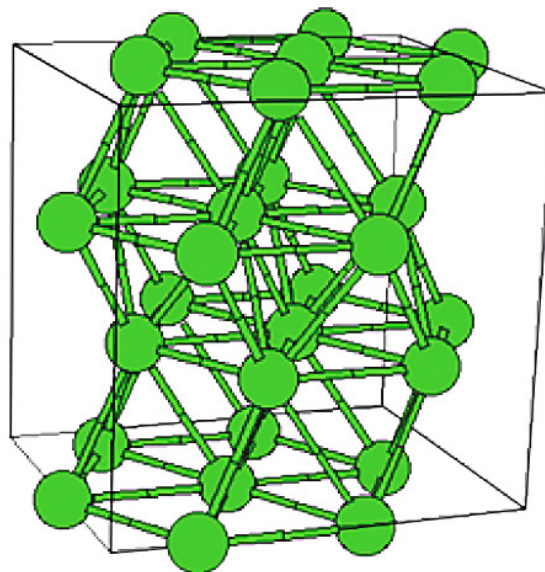


Рис. 2. Структура ГПУ
Fig. 2. Structure of a hexagonal close packing

Таблица 1

Метрические параметры [Metric parameters]

Химический элемент	Параметры кристаллической решетки						
	вычисленные			табличные [14]		погрешность	
	a , нм	c , нм	c/a	a , нм	c , нм	Δa	Δc
Бериллий (Be)	0,2269	0,3615	1,593	0,229	0,358	0,009	0,010
Церий (Ce)	0,3559	0,5590	1,571	0,365	0,596	0,025	0,062
Кобальт (α -Co)	0,2419	0,3810	1,575	0,251	0,407	0,036	0,064
Диспрозий (Dy)	0,3599	0,5754	1,599	0,359	0,565	0,003	0,018
Эрбий (Er)	0,3567	0,5772	1,618	0,356	0,559	0,002	0,033
Гадолиний (Gd)	0,3644	0,5822	1,598	0,364	0,578	0,001	0,007
Гафний (Hf)	0,3246	0,5254	1,619	0,320	0,506	0,014	0,038
Гольмий (Ho)	0,3575	0,5721	1,600	0,358	0,562	0,001	0,018
Лантан (La)	0,3810	0,6240	1,638	0,375	0,607	0,016	0,028
Лютеций (Lu)	0,3501	0,5576	1,593	0,350	0,555	0,000	0,005
Магний (Mg)	0,3217	0,5177	1,609	0,321	0,521	0,002	0,006
Неодим (Nd)	0,3707	0,6019	1,624	0,366	0,590	0,013	0,020
Осмий (Os)	0,2728	0,4473	1,640	0,274	0,432	0,004	0,035
Празеодим (Pr)	0,3732	0,6098	1,634	0,367	0,592	0,017	0,030
Рений (Re)	0,2780	0,4537	1,632	0,276	0,446	0,007	0,017
Рутений (Ru)	0,2700	0,4303	1,594	0,270	0,428	0,000	0,005
Скандий (Sc)	0,3227	0,5078	1,574	0,331	0,527	0,025	0,036
Тербий (Tb)	0,3620	0,5784	1,598	0,360	0,569	0,006	0,017
Титан (Ti)	0,2959	0,4670	1,578	0,295	0,469	0,003	0,004
Таллий (Tl)	0,3145	0,4938	1,570	0,346	0,553	0,091	0,107
Тулий (Tm)	0,3531	0,5653	1,601	0,354	0,555	0,003	0,019
Иттрий (Y)	0,3557	0,5592	1,572	0,365	0,573	0,025	0,024
Цирконий (Zr)	0,3258	0,5339	1,639	0,323	0,515	0,009	0,037

рактических рассмотренных соединений согласуются с опубликованными значениями [14].

Заключение

В работе выполнено моделирование металлов с кристаллической структурой типа ГПУ. Полученные значения метрических параметров согласуются с табличными данными.

Полученные результаты могут быть использованы при проведении квантовомеханических расчетов на базе теории функционала электронной плотности [15, 16], с помощью которых можно уточнить координаты системы атомов, а также рассчитать электронные, магнитные и другие свойства соединений.

Библиографический список

1. Абгарян К.К. Многмасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения. М.: МАКС Пресс; 2017. 284 с.

2. Шаскольская М.П. Кристаллография. М.: Высш. шк.; 1976. 391 с.

3. Загальская Ю.Г., Литвинская Г.П., Егоров-Тисменко Ю.К. Геометрическая кристаллография. 2-е изд. М.: Издательский дом (Типография) МГУ; 1986. 165 с.

4. Белов Н.В. Структура ионных кристаллов и металлических фаз. М.: Изд-ва Акад. наук СССР; 1947. 237 с.

5. Сеченых П.А., Абгарян К.К. Математическое моделирование кристаллической структуры оксидов металлов. Матер. I Междунар. конф. «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК-2019). 21–23 октября 2019 г., Москва. М.: МАКС Пресс; 2019. С. 74–76. <https://doi.org/10.29003/m682.MMMSEC-2019>

6. Сеченых П.А. Математическое моделирование кристаллической структуры перовскитоподобных соединений. Матер. III Междунар. конф. «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК-2021). 25–27 октября 2021 г. М.: МАКС Пресс; 2021. С. 86–88. <https://doi.org/10.29003/m2479.MMMSEC-2021/86-88>

7. Volume A. Space-group symmetry–2005. In: *International tables for crystallography*. Hahn T., ed. 5th ed. Springer; 2005. 911 p. <https://www.lpl.arizona.edu/>

PMRG/sites/lpl.arizona.edu.PMRG/files/ITC-Vol.A%20%282005%29%28ISBN%200792365909%29.pdf

8. Metropolis N., Ulam S. The Monte Carlo method. *Journal of the American Statistical Association*. 1949; 44(247): 335—341. <https://doi.org/10.1080/01621459.1949.10483310>

9. Документация по C#. Начало работы, руководства, справочные материалы. <https://learn.microsoft.com/ru-ru/dotnet/csharp/> (дата обращения: 02.11.2019).

10. Техническая документация по SQL Server. SQL Server. Microsoft Learn. <https://learn.microsoft.com/ru-ru/sql/sql-server/?view=sql-server-ver15> (дата обращения: 01.11.2021).

11. Документация по Entity Framework 6.1.3. <https://learn.microsoft.com/ru-ru/ef/ef6/what-is-new/past-releases#ef-613> (дата обращения: 01.11.2021).

12. Сеченых П.А. Математическое моделирование перспективных структур оксидов металлов. *Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники*. 2019; 22(4): 268—271. <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2019-4-268-271>

13. The periodic table of the elements by WebElements. <https://www.webelements.com/index.html> (дата обращения 20.09.2022).

14. Ashcroft N.W., Mermin N.D. Solid state physics. NY, USA: Saunders College Publishing; 1976. 848 p.

15. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous electron gas. *Physical Review B*. 1964; 136(3B): 864—871. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.136.B864>

16. Kohn W., Sham L.J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical Review A*. 1965; 140(4A): 1133—1138. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.140.A1133>

References

1. Abgaryan K.K. Multiscale modeling in problems of structural materials science. Moscow: MAKS Press; 2017. 284 p. (In Russ.)

2. Shaskol'skaya M.P. Crystallography. Moscow: Vysshaya shkola; 1976. 391 p. (In Russ.)

3. Zagal'skaya Yu.G., Litvinskaya G.P., Egorov-Tismenko Yu.K. Geometric crystallography. 2nd ed. Moscow: Moscow University press; 1986. 165 p. (In Russ.)

4. Belov N.V. Structure of ionic crystals and metallic phases. Moscow: Izd-va Akad. nauk SSSR; 1947. 237 p. (In Russ.)

5. Sechenykh P.A., Abgaryan K.K. Mathematical modeling of the crystal structure of metal oxides. In: *Proceed. of the inter. conf. "Mathematical modeling in materials science of electronic components" (MMMSEC-2019). October 21-23, 2019*. Moscow: MAKS Press; 2019. P. 74—76. (In Russ.). <https://doi.org/10.29003/m682.MMMSEC-2019>

6. Sechenykh P.A. Mathematical modeling of the crystal structure of perovskite-like materials. In: *Proceed. of the III international conference "Mathematical modeling in materials science of electronic components" (MMMSEC-2021). October 25-27, 2021, Moscow*. Moscow: MAKS Press; 2021. P. 86—88. (In Russ.). <https://doi.org/10.29003/m2479.MMMSEC-2021/86-88>

7. Hahn T., ed. Volume A. Space-group symmetry-2005. In: *International tables for crystallography*. 5th ed. Springer; 2005. 911 p. <https://www.lpl.arizona.edu/PMRG/sites/lpl.arizona.edu.PMRG/files/ITC-Vol.A%20%282005%29%28ISBN%200792365909%29.pdf>

8. Metropolis N., Ulam S. The Monte Carlo method. *Journal of the American Statistical Association*. 1949; 44(247): 335—341. <https://doi.org/10.1080/01621459.1949.10483310>

9. Documentation on C#. Getting started, guides, reference materials. (In Russ.). <https://learn.microsoft.com/ru-ru/dotnet/csharp/> (accessed on 02.11.2019).

10. Technical documentation for SQL Server. SQL Server. Microsoft Learn. (In Russ.). <https://learn.microsoft.com/ru-ru/sql/sql-server/?view=sql-server-ver15> (accessed on 01.11.2021).

11. Documentation for Entity Framework 6.1.3. (In Russ.). <https://learn.microsoft.com/ru-ru/ef/ef6/what-is-new/past-releases#ef-613> (accessed on 01.11.2021).

12. Sechenykh P.A. Mathematical modeling of perspective structures of metal oxides. *Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii. Materialy Elektronnoi Tekhniki = Materials of Electronics Engineering*. 2019; 22(4): 268—271. (In Russ.). <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2019-4-268-271>

13. The periodic table of the elements by WebElements. <https://www.webelements.com> (accessed on 20.09.2022).

14. Ashcroft N.W., Mermin N.D. Solid state physics. NY, USA: Saunders College Publishing; 1976. 848 p.

15. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous electron gas. *Physical Review B*. 1964; 136(3B): 864—871. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.136.B864>

16. Kohn W., Sham L.J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical Review A*. 1965; 140(4A): 1133—1138. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.140.A1133>

Информация об авторах / Information about the authors

Сеченых Полина Алексеевна — младший научный сотрудник, Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук, ул. Вавилова, д. 44, корп. 2, Москва, 119333, Российская Федерация; старший преподаватель, Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), Волоколамское шоссе, д. 4, Москва, 125993, Российская Федерация; e-mail: p-sechenyh@mail.ru

Polina A. Sechenykh — Junior Researcher, Federal Research Center "Computer Science and Control" of the Russian Academy of Sciences, 44-2 Vavilova Str., Moscow 119333, Russian Federation; Senior Lecturer, Moscow Aviation Institute (National Research University), 4 Volokolamskoe Highway, Moscow 125993, Russian Federation; e-mail: p-sechenyh@mail.ru

Поступила в редакцию 29.11.2022; поступила после доработки 13.12.2022; принята к публикации 19.12.2022
Received 29 November 2022; Revised 13 December 2022; Accepted 19 December 2022