

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Амурский государственный университет»

На правах рукописи



ФОМИН Денис Васильевич

**МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И КОМПЛЕКС ПРОГРАММ
ДЛЯ РАСЧЕТА ПАРАМЕТРОВ ТРЕХМЕРНЫХ РЕШЕТОК
ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ СИНГОНИИ**

Специальность 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и
комплексы программ

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата технических наук

Научный руководитель:
доктор технических наук,
профессор И. Е. Ерёмин

Благовещенск, 2024

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение.....	6
1 Пространственные упаковки сферических частиц.....	15
1.1 Общая характеристика плотных шаровых упаковок	16
1.1.1 Двухмерные упаковки равновеликих шаров	16
1.1.2. Многомерные упаковки равновеликих шаров.....	18
1.2 Трёхмерные решетчатые модели шаровых упаковок	21
1.2.1 Кубическая примитивная упаковка	22
1.2.2 Кубическая объёмно-центрированная упаковка	23
1.2.3 Кубическая гранецентрированная упаковка	24
1.2.4 Гексагональная плотнейшая упаковка.....	28
1.2.5 Гексагональная упаковка типа вюрцит.....	30
1.3 Макроскопический расчет междядерного расстояния.....	31
1.3.1 Кристаллографическая формула длины связи.....	32
1.3.2 Сравнительная оценка эффективности моделей	40
1.4 Методы математического описания пространственных решёток	43
1.4.1 Традиционный метод координатного описания	43
1.4.2 Компактный векторно-матричный метод	46
1.5 Постоянная Маделунга	52
1.5.1 Традиционные методы расчёта постоянной Маделунга	52
1.5.2 Метод Харрисона-Сычёва для расчёта постоянной Маделунга	54
1.6 Выводы по главе.....	56
2 Математические модели решёток типов вюрцит и магний.....	59
2.1 Создание кубических Брэгговских моделей	60
2.1.1 Брэгговский аналог ПК	60

2.1.2	Брэгговский аналог ОЦК.....	63
2.1.3	Брэгговский аналог ГЦК.....	66
2.1.4	Брэгговский аналог решётки типа магний.....	82
2.1.5	Брэгговский аналог решётки типа вюрцит.....	88
2.2	Создание компактных векторно-матричных моделей.....	91
2.2.1	Предлагаемый компактный векторно-матричный метод.....	91
2.2.2	Создание компактной матричной модели решётки типа магний..	94
2.2.3	Выявление кубического периода решётки типа магний.....	100
2.3	Возможность применения к сложны решёткам.....	109
2.3.1	Решётки цеолитов кубического типа.....	109
2.3.2	Определение параметров сетки для решётки АСО.....	111
2.4	Выводы по главе.....	116
3	Методы расчёта параметров гексагональных решёток.....	118
3.1	Основания для разработки численных методов.....	119
3.1.1	Расчёт коэффициента компактности.....	119
3.1.2	Связь базовых и составных координационных слоёв.....	121
3.1.3	Периодичность составных координационных слоёв.....	127
3.1.4	Прямой метод определения полного количества частиц.....	129
3.2	Структурный метод определения количества частиц.....	130
3.2.1	Расчёт полного количества частиц в матрицах первого шага.....	130
3.2.2	Расчёт полного количества частиц в матрицах второго шага.....	136
3.2.3	Расчёт полного количества частиц в матрицах третьего шага.....	141
3.2.4	Расчёт эффективного количества частиц.....	145
3.3	Оценка эффективности структурного метода.....	152
3.3.1	Теоретическая оценка эффективности.....	152

3.3.2 Экспериментальная оценка эффективности	156
3.3.3 Практическая оценка точности	162
3.4 Возможность применения для расчётов других параметров	164
3.4.1 Структурный метод расчёта постоянной Маделунга.....	164
3.4.2 Анализ структурного метода расчёта постоянной Маделунга	170
3.5 Выводы по главе	171
4 Комплекс программ «Оранжея»	174
4.1 Структура и технические особенности программного комплекса	175
4.1.1 Технологии и инструменты разработки	176
4.1.2 Структура программного комплекса «Оранжея»	179
4.2 Основные возможности комплекса программ	181
4.2.1 Модуль «Построитель структуры»	182
4.2.2 Модуль «Поиск периода»	185
4.2.3 Модуль «Схемы слоёв»	186
4.2.4 Модуль «Матрицы»	188
4.2.5 Модуль «Расчёты»	190
4.3 Выводы по главе	196
Заключение	198
Список литературы	201
Приложение А. Акты о внедрении результатов диссертации	221
Приложение Б. Свидетельства о регистрации программ для ЭВМ.....	226
Приложение В. Компактная матричная модель решётки ГПУ	234
Приложение Г. Компактная матричная модель решётки типа вюрцит.....	239
Приложение Д. Блок-схемы основных алгоритмов.....	244
Алгоритм построения трёхмерной модели пространственной решётки...	244

Алгоритм построения анаглифического представления.....	247
Алгоритм поиска кубического периода.....	249
Алгоритм формирования схемы координационного слоя.....	252
Алгоритм формирования трёхмерной матрицы куба-генератора.	262
Алгоритм формирования грани трёхмерной матрицы слоя.....	265
Алгоритм формирования матрицы первого шага сжатия.....	269
Алгоритм формирования матрицы второго шага сжатия.....	270
Алгоритм формирования компактной матрицы третьего шага сжатия. ...	271
Алгоритм расчёта полного количества частиц.	272
Алгоритм расчёта поправки количества частиц.	277

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность темы. Задачи описания и упаковки различных пространственных структур представляют теоретический и практический интерес в различных областях современной науки и техники. Решение подобных задач позволяет оптимальным образом использовать пространства контейнеров для хранения и транспортировки грузов, особенно в условиях жёстких ограничений, характерных для аэрокосмической сферы, а также для любых длительных автономных передвижений [1–15].

В свою очередь, задачи описания и упаковки пространственных структур находят свое применение в физике конденсированного состояния и физике плазмы. Например, современные исследования трехмерного строения плазменно-пылевых структур, выявили существование пространственных структур с объемными упаковками, аналогичными типовым кристаллическим решеткам твердых тел. В частности, объемно-центрированной, гранецентрированной кубической и гексагональной, представляющими собой, соответственно, плотнейшие и другие плотные способы упаковки [16–18]. Исследования в этой области представлены в работах следующих учёных: Василяк Л. М., Дзлиева Е. С., Иванов А. Ю., Карасев В. Ю., Поляков Д. Н., Шумова В. В., Эйхвальд А. И.

Пространственные решётки также имеют применения в математической теории групп, кристаллографии и теории телекоммуникации [16–43]. В особенности задачи: 1) упаковки равновеликих не перекрывающихся сфер, 2) поиска наиболее плотной упаковки пространства, 3) определения значения плотности получаемых упаковок.

В кристаллографии, материаловедении и ряде других областей соответствующие математические модели и методы расчётов используются для оценки свойств уже известных и разработке новых веществ, материалов и соединений, а также для описания и исследования происходящих в них структурных превращений с помощью энергетического подхода. Исследования в этих областях представлены в работах следующих учёных: Богданов О. С.,

Брэгг У. Л., Гончаров Ю. Д., Зуев В. В., Макаров В.Н., Поцелуева Л.Н., Сычёв М.С., Урусов, В.С., Dietrich D., Förster W., Nickel D., Pucklitzsch T., Ragavendran K., Vasudevan D., Veluchamy A.

Математические описания пространственных упаковок и численные методы оценки их характеристик исследуются в математической теории групп, а также применяются для разработки систем наиболее оптимального кодирования информации. Такие системы кодирования позволяют хранить и передавать данные с требуемым уровнем помехоустойчивости. При этом минимизируется сложность и стоимость программных и аппаратных средств связи. Также минимизируются затраты времени и энергии на передачу того же объёма данных. Исследования в этих областях представлены в работах следующих учёных: Вязовская М., Радченко Д., Cohn H., Conway J.H., Ferguson S.P., Hales T.C., Kumar A., Miller S.D., Sloane N.J.A. [44–54].

Методы математического описания, применяемые на данный момент для описания регулярных пространственных структур различной природы, и основанные на них методы расчётов структурных и энергетических параметров обладают рядом недостатков: 1) громоздкость математических моделей; 2) более высокое потребление вычислительных ресурсов; 3) более высокая погрешность, возникающая в следствии выполнения расчётов в вещественных числах и особенностях реализации работы с ними в компьютерной технике.

Очевидно, что задачи расчёта структурных и энергетических параметров становятся труднее по мере роста сложности структуры исследуемых соединений. Однако наибольший интерес сейчас представляют вещества и соединения именно со сложной структурой. При этом новые методы формирования математических моделей и расчётов параметров легче разрабатывать, проверять и отрабатывать сначала на простых решётках и просто рассчитываемых параметрах. Особенно на таких, для которых уже есть надёжные, много раз проверенные вычислениями, и экспериментами контрольные данные. А затем уже переносить новые подходы на более сложные пространственные структуры и более трудно рассчитываемые параметры.

Для решения задач моделирования регулярных кубических пространственных структур был разработан метод компактного матричного описания, представленный в работах Ерёмина И. Е. и Сычёва М. С. Данный метод предполагает разбиение кубической элементарной ячейки моделируемой структуры на координационные слои, и их описания с помощью набора плоских треугольных матриц [22–28].

Такой подход позволяет заменять полное классическое описание сколь угодно большого фрагмента исследуемой структуры описанием сравнительно небольшого её фрагмента. Более того, компактное матричное описание базового фрагмента структуры будет приблизительно в 48 раз меньше его координатной матричной модели. Что достигается благодаря использованию свойств симметрии куба.

Данный подход уже был применён к пространственным структурам кубической сингонии. Также были разработаны эффективные численные методы расчёта структурных и энергетических параметров на основе компактных матричных моделей [22–32]. При этом расчёты, выполненные с помощью данных численных методов, не только менее требовательны к вычислительным ресурсам, занимают меньше времени, но и приводят к более точным результатам. Однако для веществ с более сложной, в том числе, гексагональной пространственной структурой, такой подход, на данный момент, не применяются в силу фундаментальных особенностей метода компактного векторно-матричного описания [55–58].

Таким образом, совершенствование метода компактного матричного описания и разработка новых методов расчёта структурных и энергетических параметров регулярных пространственных структур, а также соответствующего программного обеспечения и их проверка на примере решёток гексагональной сингонии является актуальной задачей.

Объектом исследования являются гексагональные пространственные структуры типов вюртцит и магний, образованные равновеликими не перекрывающимися сферами в трёхмерном евклидовом пространстве.

Предметом исследования является плотность упаковки гексагональных решёток структурных типов вюртцит и магний.

Целью диссертационного исследования является повышение точности и скорости расчётов структурных и энергетических параметров пространственных структур на примере решёток структурных типов вюртцит и магний.

Задачи диссертационного исследования:

1. Разработать универсальный метод формирования компактного матричного описания регулярных пространственных структур.

2. Разработать метод расчёта коэффициента плотности пространственной упаковки исследуемых структур.

3. Разработать комплекс программ, для формирования компактных матричных описаний регулярных пространственных структур, расчётов коэффициента компактности.

4. Сформировать компактные матричные описания гексагональных решёток структурных типов вюртцит и магний.

5. Провести расчёты и проверить адекватность разработанных методов и их реализации в виде комплекса программ.

Методы исследования: теория симметрии, теория рядов, методы линейной алгебры, инженерная методика реализации машинных моделей сложных систем, общие принципы алгоритмизации, концепция объектно-ориентированного программирования, методы компьютерной графики, анаглифический метод визуализации объёмных структур.

Научная новизна:

1. Предложен метод компактного матричного описания регулярных пространственных структур, отличающийся применимостью к решёткам любых сингонии, а также более простой и эффективной структурой формируемого описания по сравнению с оригинальной версией данного метода.

2. Разработан скоростной численный метод расчёта количества частиц в заданном объёме структуры и коэффициента плотности пространственной

упаковки, позволяющий проводить соответствующие вычисления за малое фиксированное время для исследования фрагментов решёток любых размеров.

3. Разработан скоростной метод расчёта постоянной Маделунга, применимый для компактных матричных описаний любых регулярных пространственных структур.

4. Разработан комплекс программ, автоматизирующий процесс построения компактных матричных описаний, а также расчёты значений коэффициента компактности и величин межъядерного расстояния для веществ структурных типов вюртцит и магний.

Достоверность полученных научных результатов обуславливается строгостью применяемого математического аппарата, а также подтверждается результатами вычислительных экспериментов.

Соответствие паспорту специальности. Диссертация соответствует паспорту специальности 1.2.2 (05.13.18) «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» по пунктам: 1) п.1. «Разработка новых математических методов моделирования объектов и явлений»; 2) п.2. «Разработка, обоснование и тестирование эффективных вычислительных методов с применением современных компьютерных технологий»; 3) п.3. «Реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента».

Теоретическая значимость диссертации состоит в развитии метода компактного матричного описания трёхмерных пространственных решёток; развитии точных высокоскоростных методов расчётов структурных и энергетических параметров решёток.

Практическая значимость. Совокупность разработанных математических моделей и методов расчётов, реализованная в виде пакета программ, позволяет осуществлять компьютерное моделирование решёток структурных типов вюртцит и магний, а также структурных параметров веществ с соответ-

ствующими решётками. На разработанное программное обеспечение получено восемь свидетельств о государственной регистрации программ для ЭВМ [59–66].

Разработанное программное обеспечение используется в Институте геологии и природопользования Дальневосточного отделения Российской академии наук (ИГиП ДВО РАН) для разработки теоретически и технологически основ создания композиционных материалов с заданными свойствами на основе местного сырья.

Результаты диссертационного исследования используются в Федеральном государственном бюджетном научном учреждении «Дальневосточный научный центр физиологии и патологии дыхания» (ФГБНУ «ДНЦ ФПД») в исследованиях воздействия экстремальных факторов окружающей среды, включая загрязнения воздуха мелкими частицами, на состояние дыхательной системы человека.

Результаты диссертационного исследования используются в научно-исследовательской работе магистрантов и аспирантов в лаборатории радиационного и космического материаловедения (РКМ) Томского государственного университета систем управления и радиоэлектроники (ФГАОУ ВО ТУСУР).

Результаты диссертационного исследования используются в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Амурский государственный университет» (ФГБОУ ВО «АмГУ») для моделирования регулярных пространственных структур сложных соединений гексагональной сингонии с целью изучения происходящих в них структурных превращений в рамках выполнения госбюджетной НИР «Компьютерное моделирование характеристик природных и технических систем» № АААА-А21-121012190029-8 (план 2021-2025). А также основные результаты диссертационного исследования включены в образовательный процесс ФГБОУ ВО «АмГУ».

Результаты диссертационного исследования также используются в ООО «Интеллектуальные системы» для определения закономерностей, существующих между энергопотреблением и производительностью при использовании различных типов алгоритмов на базе аппаратных комплексов различных архитектур.

Положения, выносимые на защиту:

1. Усовершенствованная версия метода компактного матричного описания, позволяющая строить описания пространственных решёток независимо от их принадлежности к кубической сингонии.

2. Структурный метод расчёта количества частиц в заданном объёме пространственной решётки и её коэффициента компактности, позволяющий выполнять соответствующий расчёт с высокой степенью точности и за малое фиксированное время для фрагмента решётки любого объёма.

3. Комплекс программ, реализующий предложенные методы описания и расчётов значений коэффициента компактности и величин межъядерного расстояния веществ структурных типов вюртцит и магний.

Апробация результатов работы. Некоторые разделы диссертации выполнялись в рамках тематики государственной бюджетной НИР «Компьютерное моделирование характеристик природных и технических систем» № АААА-А21-121012190029-8 (план 2021-2025).

Результаты работы были представлены на 9 международных научных конференциях: XLVII международная научно-практическая конференция «Естественные и математические науки в современном мире» (Новосибирск, 2016); V международный круглый стол «Фундаментальные и прикладные разработки в области технических и физико-математических наук» (Казань, 2018); International scientific conference "Science. Research. Practice" (Saint-Petersburg, 2018); VI международный круглый стол «Фундаментальные и прикладные разработки в области технических и физико-математических наук» (Казань, 2018); XXIV международный междисциплинарный форум молодых

ученых (Екатеринбург, 2019); Международная научная конференция «Высокие технологии и инновации в науке» (Санкт-Петербург, 2019); International Conference «Scientific research of the SCO countries: synergy and integration» (Beijin, 2019); XXI международная научно-практическая конференция «European Scientific Conference» (Пенза, 2020); International Conference «Scientific research of the SCO countries: synergy and integration» (Beijin, 2020); а также на 1 всероссийской конференции: II всероссийская научно-практическая конференция «Интеллектуальный капитал и инновационное развитие общества, науки и образования» (Пенза, 2020).

Публикации по теме исследования. По теме диссертационного исследования опубликовано 31 печатных работ, из которых 13 статей, в том числе 11 опубликованы в российских журналах, рекомендованных ВАК, из них одна опубликована в российском издании, индексируемом системой цитирования SCOPUS; 9 докладов на международных конференциях; 1 доклад на всероссийской конференции; 8 свидетельств о государственной регистрации программы для ЭВМ.

Личный вклад автора. Все основные результаты диссертационного исследования получены лично автором. Участие соискателя в подготовке работ, опубликованных в соавторстве, состоит в следующем. В работах [67–70] им разработана методика вычислительного эксперимента, выполнен сам эксперимент. В работах [57, 71] им произведено построение двухкомпонентной кубической модели исследуемой кристаллической структуры на основе тетраэдрической. В работе [56] им проведён анализ тетраэдрической модели кристаллической решётки структурного типа вюртцит. В работе [72] им разработана методика эксперимента и проведён анализ полученных результатов. В работе [73] им выполнено описание интерфейса программного продукта «Астра». В работе [74] им выполнен расчёт параметров трёхмерной сетки. В работах [75–77] соискатель разработал и описал алгоритм построения стереометрической модели фрагмента исследуемой структуры. В работах [78, 79] соискатель вы-

полнил анализ компактного матричного описания, разработал и описал структурный численный метод подсчёта количества частиц и алгоритм расчёта коэффициента компактности, а также выполнил анализ эффективности разработанных методов. В работе [80] соискатель разработал и описал брэгговские аналоги решёток ПК, ОЦК, ГЦК и ГПУ.

В свидетельствах о регистрации программ для ЭВМ [59–66] автором разработана базовая часть программного кода, включая алгоритм численного расчёта количества пространственных узлов, занятых частицами в заданном объёме исследуемой кристаллической структуры.

Структура и объём работы. Рукопись диссертации состоит из введения, четырёх глав, заключения, списка цитируемой литературы и пяти приложений. Её полный объём составляет 280 страниц машинописного текста, 105 рисунка, 19 таблиц и 179 наименования библиографических ссылок.

1 ПРОСТРАНСТВЕННЫЕ УПАКОВКИ СФЕРИЧЕСКИХ ЧАСТИЦ

Задачи, связанные с пространственными упаковками сфер, занимают умы человечества уже больше четырёхсот лет. И имеют применения в разных, далёких друг от друга областях: математической теории групп, кристаллографии, теории телекоммуникации [2–5, 16–21, 81–87]. Одним из типов таких задач являются задачи упаковки равновеликих не перекрывающихся сфер. В особенности, задачи поиска наиболее плотной упаковки равновеликих сфер, а также определения значения плотности получаемых упаковок [33–40].

Упаковки сфер исследуются в пространствах различной размерности. В одномерных пространствах шары представляются как отрезки, в двумерных – рассматриваются укладки кругов, в трёх- и более мерных пространствах – упаковки сфер [33, 41, 54].

Очевидными сложностями в исследовании упаковок сфер в пространствах с более чем тремя измерениями являются трудность визуализации, быстро увеличивающееся количество вариантов взаимного размещения сфер в пространстве, а также увеличение количества эквивалентных способов упаковки и их выявления.

Отчасти эти сложности удаётся преодолеть с помощью средств современной вычислительной техники и специализированного программного обеспечения, активно применяемого в решении многих задач [2–5, 87–88].

Традиционно, особенный интерес представляют шаровые упаковки в трёхмерном пространстве. В особенности кубические примитивная, объёмно-центрированная и гранецентрированная упаковки. А также гексагональные: в особенности плотнейшая упаковка и упаковка типа вюртцит. Пространственные структуры данных типов не только широко распространены в природе, но также относительно просты и хорошо изучены. Что делает их удобными объектами для разработки новых математических моделей и методов, которые в дальнейшем могут быть распространены на упаковки более сложных типов.

1.1 Общая характеристика плотных шаровых упаковок

Среди различных способов упаковки сфер особое место занимают плотные шаровые упаковки (ПШУ). Традиционно, они применяются при решении задач кристаллографии, кристаллофизики и физики твёрдого тела, также плотные шаровые упаковки равных сфер находят применение в физике плазмы, теории телекоммуникации и кодирования информации [18–21, 82–85].

1.1.1 Двухмерные упаковки равновеликих шаров

Задачи поиска способов плотной упаковки шаров в трёхмерном пространстве, а также оценки их коэффициента компактности не редко начинают решать в пространствах меньшей размерности. Этот приём позволяет упростить задачу и повысить наглядность решения.

В двумерном пространстве частным случаем задачи упаковки равновеликих шаров является задача упаковки равновеликих не перекрывающихся кругов. Существует три упаковки кругов, представляющих особенный интерес [34, 54]. Упаковка $Z2$ получается при размещении центров кругов в точках с целыми координатами, при этом длина единичного отрезка принимается равной двум радиусам кругов R (рис. 1.1).

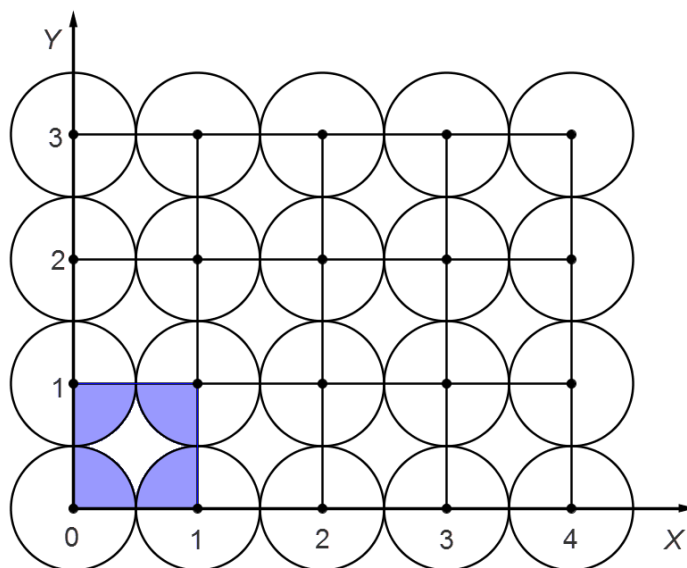


Рисунок 1.1 – Плотная упаковка равных неперекрывающихся кругов $Z2$

Упаковка $D2$ получается при размещении центров кругов в точках с целыми координатами, выбранными в шахматном порядке, при этом длина единичного отрезка принимается равной $R\sqrt{2}$ (рис.1.2).

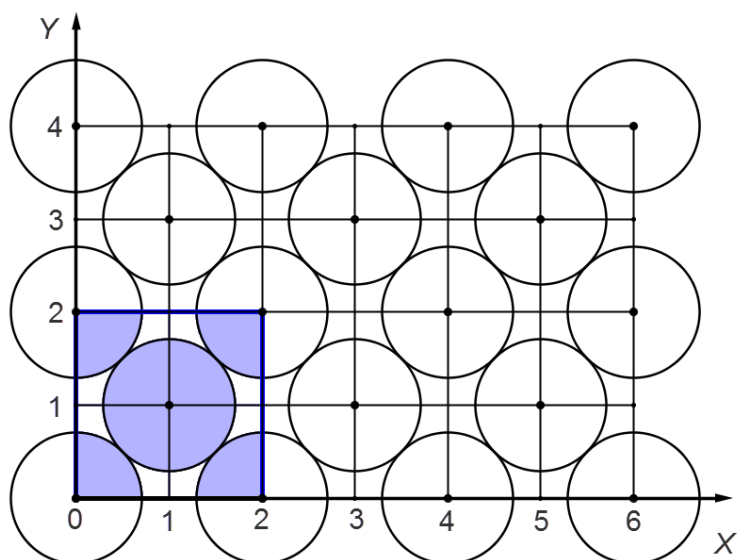


Рисунок 1.2 – Плотная упаковка равных неперекрывающихся кругов $D2$

Упаковки $Z2$ и $D2$ эквивалентны, поскольку переходят друг в друга при повороте осей на 45° и приведении длины единичного отрезка.

Упаковка $L2$ получается при размещении центров кругов начального слоя в точках с целыми координатами, а кругов всех последующих слоёв в промежутках между кругами предыдущего слоя (рис. 1.3) [34, 54].

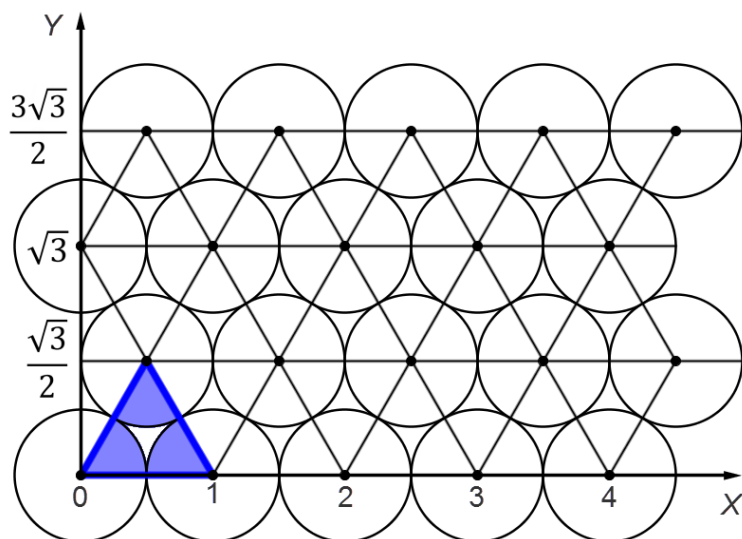


Рисунок 1.3 – Плотная упаковка равных неперекрывающихся кругов $L2$

Для оценки плотности двумерных шаровых упаковок нужно оценить соотношение площади, занятой кругами, к полной площади фрагмента. Очевидно, что в случае упаковок $Z2$ и $D2$ можно выделить элементарные квадратные генераторы – фрагменты, позволяющие путём трансляции восстановить

сколь угодно большой фрагмент структуры (см. рис. 1.1, 1.2). Тогда плотность упаковок $Z2$ и $D2$ будет соответственно равна:

$$\gamma_{Z2} = \frac{\pi R^2}{(2R)^2} = \frac{\pi}{4} \approx 79 \% ;$$

$$\gamma_{D2} = \frac{2\pi R^2}{(2R\sqrt{2})^2} = \frac{\pi}{4} \approx 79 \% .$$

Для упаковки $L2$ в качестве генератора может быть выделен правильный треугольник (см. рис. 1.3), а плотность $L2$ составит:

$$\gamma_{L2} = \frac{\pi R^2 4}{2\sqrt{3}(2R)^2} = \frac{\pi}{2\sqrt{3}} \approx 91 \% .$$

Очевидно, что упаковка $L2$ является единственной возможной плотнейшей упаковкой неперекрывающихся равновеликих шаров в двумерном пространстве.

1.1.2. Многомерные упаковки равновеликих шаров

Традиционно задачи поиска способов плотной упаковки шаров находят своё применение при описании реальных физических систем и потому рассматриваются в пространствах размерности $N \in [1; 3]$. Плотные шаровые упаковки в пространствах более высоких размерностей применяются при разработке способов оптимального помехоустойчивого кодирования информации и квантования аналоговых сигналов [34, 54].

На данный момент способы плотнейшей упаковки равновеликих непересекающихся сфер известны только для пространств: одномерного, двумерного, трёхмерного, восьмимерного и 24-мерного [34, 54, 41].

Доказательство того, что кубическая гранецентрированная решётка $D3$ является плотнейшей, было получено в 2003 году – спустя четыреста лет после выдвижения соответствующей гипотезы Иоганном Кеплером [81, 37–39, 89]. Аналогичные доказательства для упаковок $E8$ и $E24$ были получены лишь в 2016 с помощью компьютерных программ-ассистентов вывода и доказательства [33, 41].

Решётчатые упаковки шаров в пространствах с размерностью больше трёх трудно адекватно визуализировать. Поэтому для их генерации применяют следующий приём: решётчатая упаковка шаров в N -мерном пространстве строится путём наложения друг на друга слоёв решётчатой упаковки размерности $N - 1$ [54].

Например, семейство упаковок D_n можно получить, располагая центры шаров поочерёдно в шахматном порядке. При этом координаты центров шаров будут выражены целыми числами с чётной суммой [54].

С увеличением количества размерностей в рассматриваемом пространстве увеличивается количество способов расположения шаров, увеличиваются не занятые области между ними и видов форм этих областей. Так в упаковке D_8 промежутки между сферами настолько велики, что в них можно разместить шары ещё одно такой же упаковки без пересечений. В результате такого совмещения двух упаковок D_8 получается упаковка E_8 – плотнейшая упаковка в пространстве соответствующей размерности. В упаковке L_2 существует только один тип углублений между шарами, а в упаковке E_{24} существует уже 23 типа различных промежутков [54].

Одним из возможных базисов решётки E_8 является матрица:

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 \end{bmatrix}.$$

Решётка E_8 состоит из всех целых линейных комбинаций столбцов приведённой выше матрицы.

Коэффициент компактности E_8 составляет:

$$\gamma_{E_8} = \frac{\pi^4}{2^{44}} \approx 25 \%,$$

а контактное число равно 240. Срезы упаковки $E8$ в пространствах с размерностями шесть и семь дают упаковки $E6$ и $E7$, считающиеся плотнейшими в соответствующих пространствах [41, 54].

Продолжая построение упаковок путём наложения друг на друга слоистых упаковок предыдущих размерностей, можно построить решётку Лича – $E24$. В качестве её базиса построения может использоваться матрица:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Построение решётки Лича, основано на показанных выше 24-разрядных двоичных последовательностях. Множество всевозможных сумм по модулю два этих последовательностей состоит из 2^{12} двоичных последовательностей, называемых кодовыми словами. Центры всех шаров в упаковке Лича находятся в точках вида $2C + 4X$ или $I + 2C + 4Y$, где C – кодовое слово, I – точка $(1, 1, \dots, 1)$ в 24-мерном пространстве, а X и Y пробегает все точки 24-мерного пространства с целочисленными координатами. Сумма координат каждой точки X должна быть чётной, а точки Y – нечётной. Радиус каждого шара равен $2\sqrt{2}$. Центры сфер, расположенных ближе всего к началу координат, находятся в точках вида $(\pm 4, \pm 4, 0, 0, \dots, 0)$, $(\pm 2, \pm 2, \pm 2, \pm 2, \pm 2, \pm 2, \pm 2, \pm 2, 0, 0, \dots, 0)$ и $(\pm 3, \pm 1, \pm 1, \dots, \pm 1)$ [54].

Контактное число решётки $E24$ равно 1960560, а коэффициент компактности составляет [41, 54]:

$$\gamma_{E24} = \frac{\pi^{12}}{12!} \approx 0,2 \%.$$

Одним из особых свойств упаковки $E24$ является то, что она воплощает настолько плотный способ упаковки шаров, что её влияние ощущается в пространствах меньших размерностей. В частности, её срезы дают плотнейшие упаковки во всех пространствах с размерностями меньшими 24, за исключением размерностей 10, 11 и 13.

Поиск способов плотной упаковки шаров в пространствах с размерностями больше трёх, оценки их коэффициента компактности, а также доказательств достижения его максимально возможного значения в пространстве данной размерности представляют собой сложную, не тривиальную математическую задачу. Общее принципиальное решение этой задачи не является очевидным даже с учётом современного уровня развития методов математики, вычислительной техники и программного обеспечения.

1.2 Трёхмерные решетчатые модели шаровых упаковок

Плотные шаровые упаковки подразумевают заполнение пространства равновеликими сферами в соответствии с определёнными закономерностями. Аналогично сферические материальные частицы, образующие кристаллическую структуру, располагаются в пространстве закономерно, периодически повторяясь в строго определённых направлениях, через строго определённые промежутки. Это позволяет использовать пространственную решётку в качестве геометрической схемы, точно описывающей расположение материальных частиц в кристалле [82].

Пространственная решётка строится на трёх основных некопланарных векторах – трансляциях или параметрах решётки a , b , c . Точки пересечения трансляций называются узлами и могут совпадать с центрами масс частиц. Три элементарные трансляции решётки определяют элементарную ячейку [36, 82].

На основе идеи периодического расположения центров масс сферических материальных частиц в кристаллическом веществе О. Бравэ в 1848 г. показал, что все кристаллические структуры можно описать с помощью четырнадцати типов решёток, отличающихся элементарными ячейками и делящиеся на семь групп – кристаллографических сингоний [82, 90].

1.2.1 Кубическая примитивная упаковка

Одной из простейших сингоний является кубическая сингония. Она включает примитивную (ПК), объёмно-центрированную (ОЦК) и гранецентрированную (ГЦК) решётки.

Элементарная ячейка примитивной кубической решётки содержит всего восемь частиц, располагающихся в её вершинах (рис. 1.4).

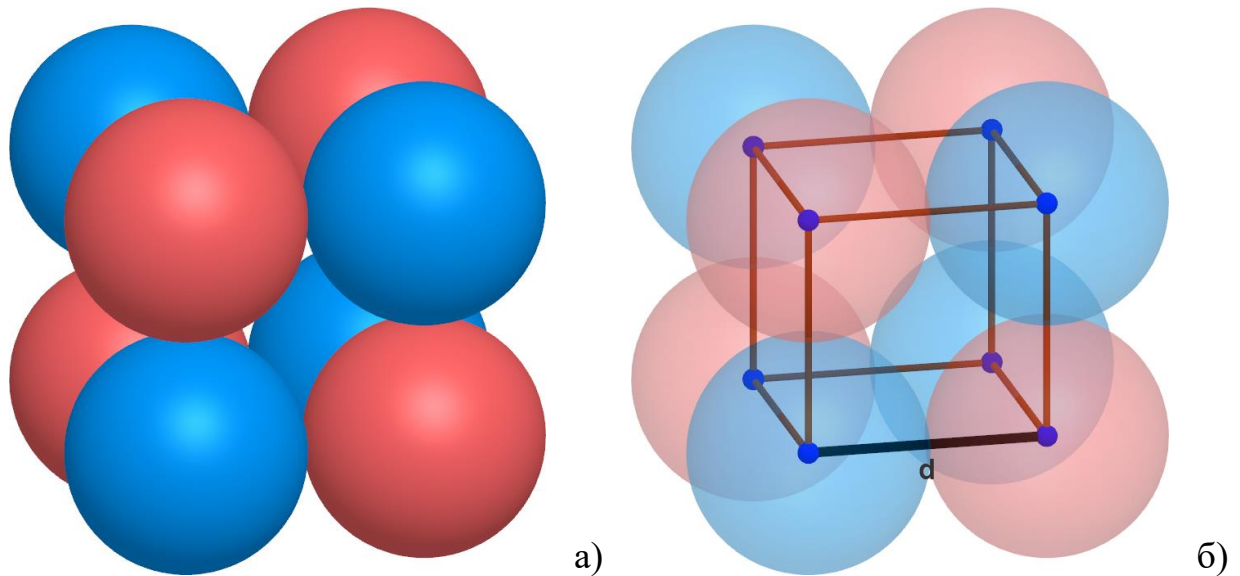


Рисунок 1.4 – Примитивная кубическая решётка:
а) упаковка равновеликих неперекрывающихся сфер;
б) элементарная ячейка

Согласно классическому подходу, коэффициент компактности рассчитывается как отношение объёма пространства, занятого сферами V_s , к общему объёму пространства V . При этом в качестве рассматриваемого фрагмента пространства используется элементарная ячейка. Таким образом, общая формула расчёта коэффициента компактности для шаровых упаковок в трёхмерном пространстве, описываемых кубическими решётками, будет иметь вид:

$$\gamma = \frac{V_s}{V} = \frac{N \cdot \frac{4}{3} \pi R^3}{a^3}, \quad (1.1)$$

где N – количество целых шаров, принадлежащих пространству элементарной ячейки, a – длина ребра ячейки (параметр решётки), выраженная через R [82].

В случае примитивной кубической решётки, реализующей упаковку равновеликих сфер, очевидно, что только одна восьмая часть каждой из восьми

сфер принадлежит пространству элементарной ячейки. Учитывая, что длина ребра ячейки a совпадает с расстоянием между частицами d и равна двум радиусам сфер R (рис. 1.4 б), коэффициент компактности ПК составит [90–93]:

$$\gamma_{\text{ПК}} = \frac{4\pi R^3}{3(2R)^3} = \frac{\pi}{6} \approx 52\% . \quad (1.2)$$

То есть примерно половина объёма пространства, занятого примитивной кубической решёткой, на самом деле остаётся пустой.

1.2.2 Кубическая объёмно-центрированная упаковка

Элементарная ячейка следующей по сложности решётки данной сингонии – объёмно-центрированной кубической решётки содержит восемь частиц, располагающихся в её вершинах, и одну частицу, расположенную в центре ячейки (рис. 1.5).

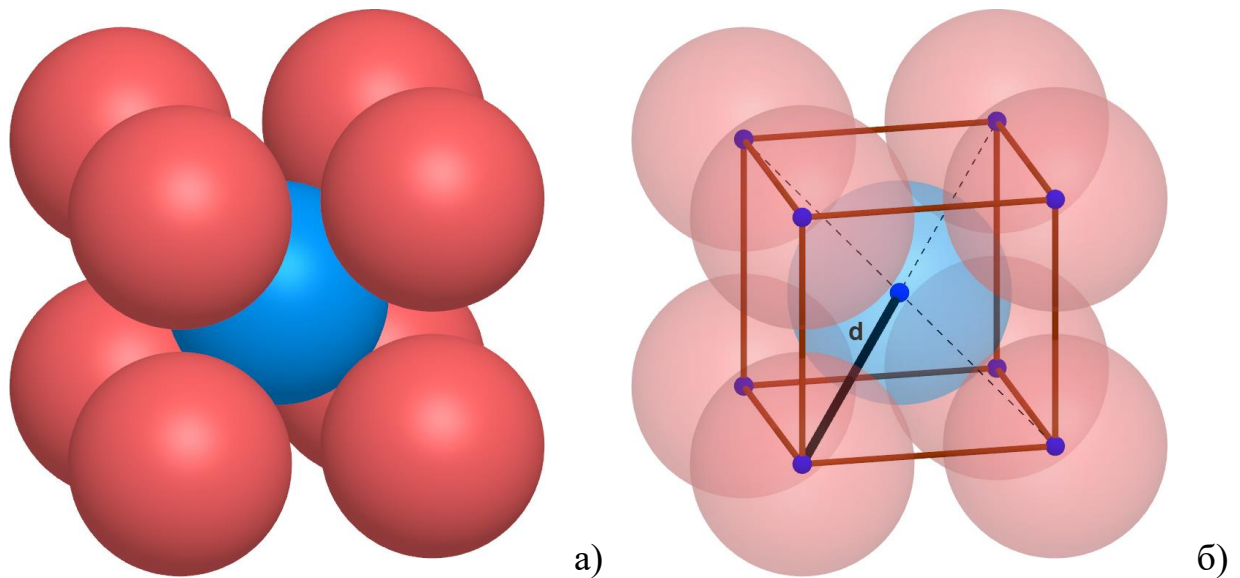


Рисунок 1.5 – Объёмно-центрированная кубическая решётка:
 а) упаковка равновеликих неперекрывающихся сфер;
 б) элементарная ячейка

В случае объёмно-центрированной кубической решётки, реализующей упаковку равновеликих сфер, так же как у примитивной кубической, только одна восьмая часть каждой из сфер, расположенных в вершинах куба, принадлежит пространству элементарной ячейки.

Длина ребра ячейки a может быть связана с R из двух прямоугольных треугольников, образованных диагональю куба c , её проекцией в плоскость основания c' , и рёбрами ячейки:

$$c = 2d = 4R;$$

$$c^2 = c'^2 + a^2;$$

$$c'^2 = 2a^2;$$

$$c = a\sqrt{3};$$

$$a = \frac{4R}{\sqrt{3}}.$$

Таким образом, коэффициент компактности объёмно-центрированной кубической решётки составит [82, 86, 90–94]:

$$\gamma_{\text{оцк}} = \frac{2 \cdot 4\pi R^3 \cdot (\sqrt{3})^3}{3 \cdot (4R)^3} = \frac{\pi\sqrt{3}}{8} \approx 68\%. \quad (1.3)$$

Значение коэффициента компактности плотнейших упаковок в трёхмерном Евклидовом пространстве составляет 74%. То есть объёмно-центрированная кубическая решётка имеет плотность заполнения пространства близкую к максимально возможной.

1.2.3 Кубическая гранецентрированная упаковка

Элементарная ячейка гранецентрированной кубической решётки содержит четыре частицы, расположенные в вершинах куба, и шесть частиц, расположенных в центрах граней (рис. 1.6).

В случае данного типа решётки только одна восьмая часть каждой из сфер, расположенных в вершинах, и только одна вторая – сфер, расположенных в центрах граней, принадлежит пространству элементарной ячейки.

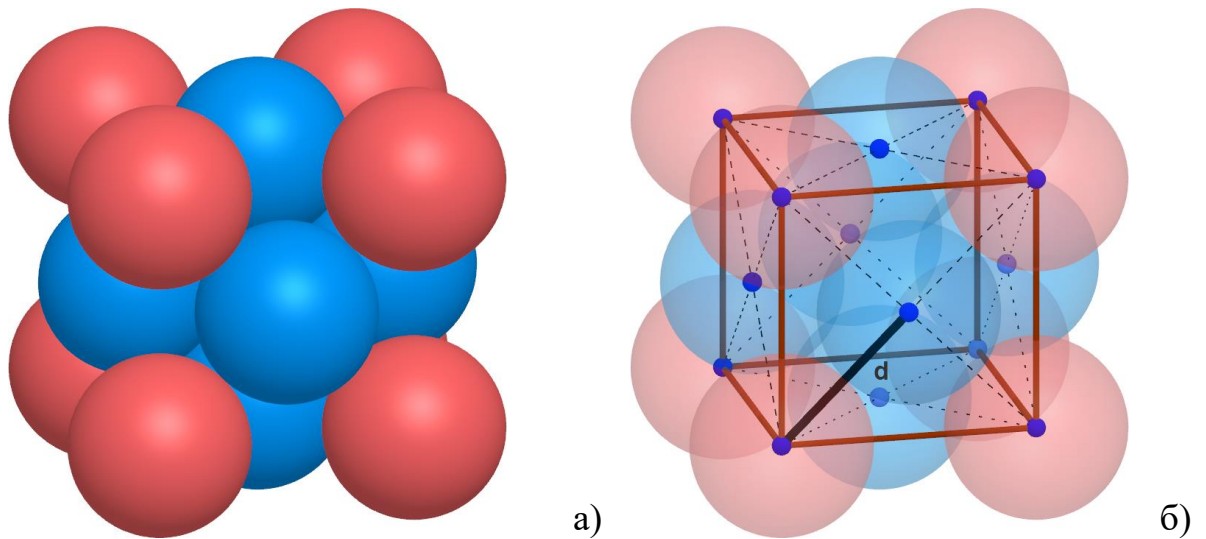


Рисунок 1.6 – Гранцентрированная кубическая решётка:
 а) упаковка равновеликих неперекрывающихся сфер;
 б) элементарная ячейка

Длину ребра ячейки a можно выразить через радиус сфер R из прямоугольного треугольника, образованного диагональю грани c и рёбрами ячейки:

$$c = 2d = 4R;$$

$$c^2 = 2a^2;$$

$$c = a\sqrt{2};$$

$$a = \frac{4R}{\sqrt{2}}.$$

Таким образом, коэффициент компактности гранцентрированной кубической решётки составит [82, 86, 90–94]:

$$\gamma_{\text{ГЦК}} = \frac{4 \cdot 4\pi R^3 \cdot (\sqrt{2})^3}{3 \cdot (4R)^3} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} \approx 74\%. \quad (1.4)$$

Полученное значение коэффициента компактности соответствует принятой оценке максимальной плотности упаковки непересекающихся равновеликих шаров в трёхмерном пространстве [54].

Важно отметить, что существуют правила и рекомендации выбора фрагмента решётки в качестве элементарной ячейки. Обязательным требованием является возможность бесконечно строить решётку путём трансляции выбранного фрагмента. Ряд других условий носит рекомендательный характер. Например, требование минимально возможных размеров элементарной

ячейки. Что позволяет выбирать другие элементарные ячейки для тех же решёток, если это целесообразно для решения задачи [82].

Для ГЦК можно выбрать элементарную ячейку отличную от классической (рис. 1.6). Достаточно сместить куб, ограничивающий ячейку, вдоль одного из рёбер на половину его длины (рис. 1.7).

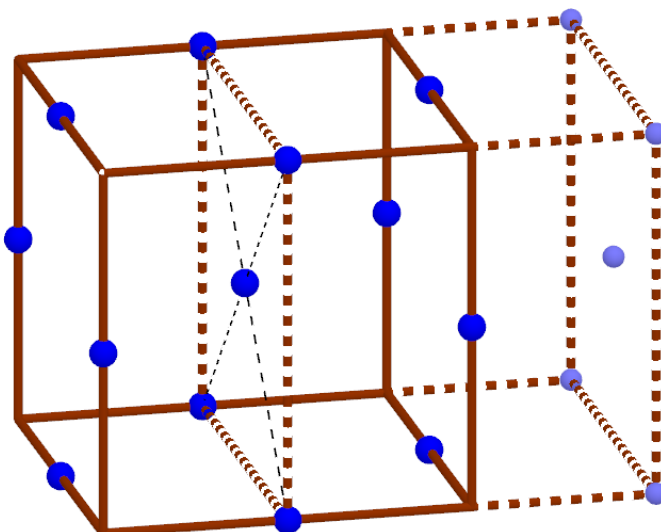


Рисунок 1.7 – Эквивалентный вариант элементарной ячейки ГЦК

Внутреннему пространству элементарной ячейки принадлежит целиком одна сфера, расположенная в центре куба, и по одной четвёртой каждой из сфер, расположенных в серединах рёбер. То есть всего четыре полных сферы – столько же, сколько у рассмотренной ранее классической элементарной ячейки ГЦК. Соответственно, альтернативная элементарная ячейка ГЦК даёт то же значение коэффициента компактности, что и классическая.

Стоит отметить, что эквивалентная элементарная ячейка ГЦК (рис. 1.8 а) более соответствует слоистому характеру плотной шаровой упаковки [90, 95]. Сферы, расположенные в серединах рёбер куба, образуют правильные шестиугольники.

Более того, шестигранная призма, основаниями которой являются правильные шестиугольные сечения двух кубов с общей вершиной (рис. 1.8 б), обладает свойствами элементарной ячейки. То есть позволяет восстанавливать сколь-угодно большой фрагмент решётки путём простой трансляции призмы.

Таким образом, для гранецентрированной кубической решётки возможно выделить альтернативную элементарную ячейку (рис. 1.8 в, г), имеющую форму правильной гексагональной призмы [34, 82, 96, 97].

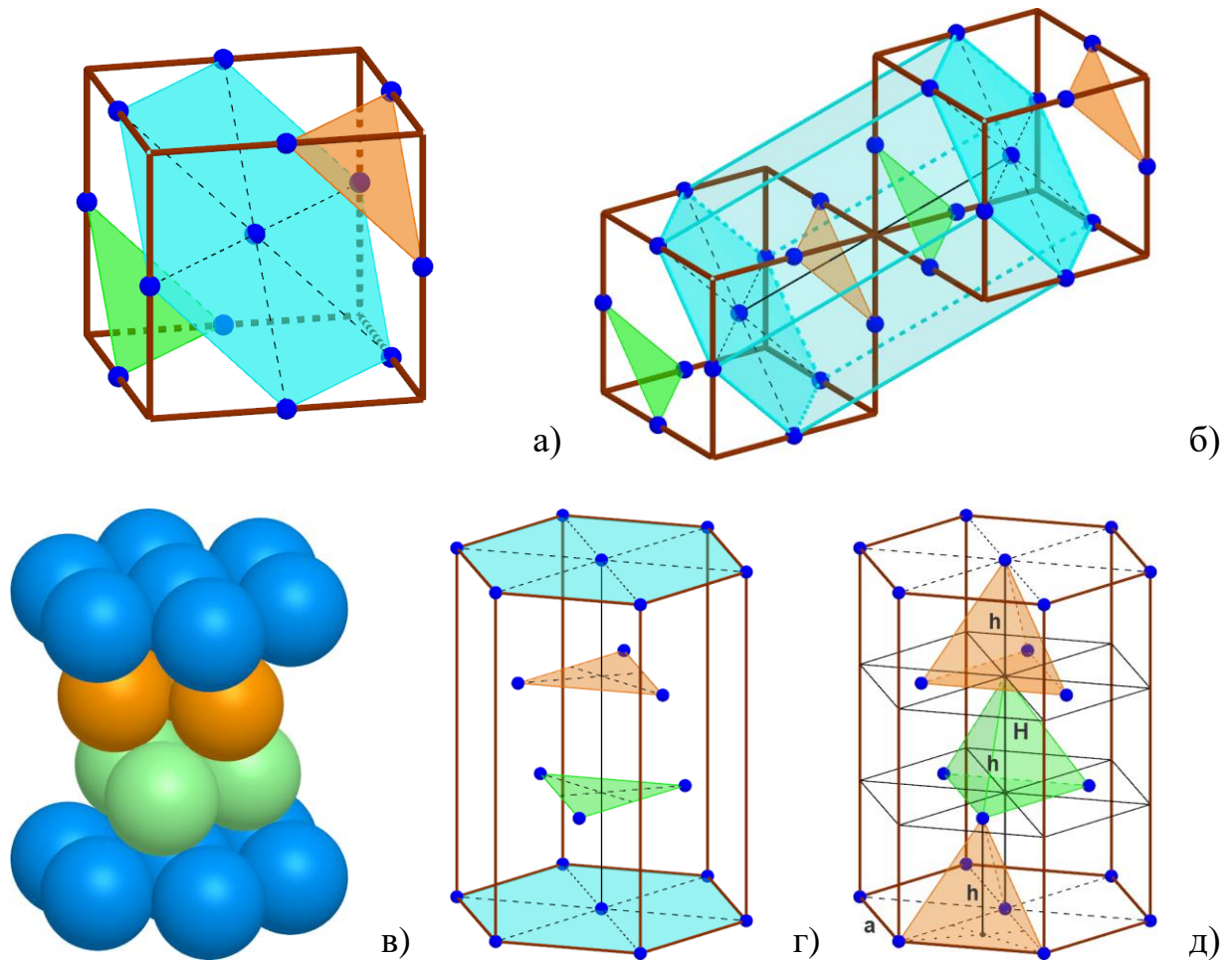


Рисунок 1.8 – Альтернативная элементарная ячейка ГЦК:

- а) базовая кубическая элементарная ячейка;
- б) схема формирования альтернативной ячейки;
- в) упаковка равновеликих неперекрывающихся сфер;
- г) альтернативная гексагональная элементарная ячейка;
- д) связь высоты ячейки с длиной ребра её основания

Учитывая, что основанием альтернативной гексагональной элементарной ячейки ГЦК является правильный шестиугольник, то длина ребра основания a равна $2R$. Также, очевидно, что высота призмы может быть выражена через высоты правильных тетраэдров, образуемых соседними частицами структуры (рис. 8 д). Тогда объём призмы V_{hex} может быть найден через её площадь S_{hex} и высоту H следующим образом:

$$S_{hex} = \frac{3\sqrt{3}}{2} \cdot a^2 = \frac{3\sqrt{3}}{2} \cdot (2R)^2 = 6R^2\sqrt{3};$$

$$H = 3h = 3 \cdot \frac{\sqrt{6}}{3} a = 2R\sqrt{6};$$

$$V_{hex} = S_{hex} \cdot H = 6R^2\sqrt{3} \cdot 2R\sqrt{6} = 36R^3\sqrt{2}.$$

Тогда, принимая во внимание, что целиком внутреннему пространству ячейки принадлежат шесть частиц, расположенных между основаниями, половина каждой из двух частиц, располагающихся в центрах оснований, и одна шестая каждой из двенадцати частиц, расположенных в вершинах ячейки, коэффициент компактности гранецентрированной кубической решётки по альтернативной элементарной ячейке составит:

$$\gamma_{ГЦК, альт.} = \frac{9 \cdot 4\pi R^3}{3 \cdot 36R^3\sqrt{2}} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} \approx 74\%.$$

Таким образом, гранецентрированная кубическая решётка описывает трёхслойную шаровую упаковку – один из известных способов плотнейшей упаковки равновеликих непересекающихся шаров в трёхмерном пространстве. Также ГЦК может описываться не только кубической, но и гексагональной элементарной ячейкой. Что также является сходством гранецентрированной кубической и гексагональной плотноупакованной решёток.

1.2.4 Гексагональная плотнейшая упаковка

Другим известным способом плотнейшей шаровой упаковки в трёхмерном пространстве является гексагональная плотная упаковка, в основе которой также лежит шестиугольник.

Гексагональная плотнейшая упаковка (ГПУ) является двухслойной упаковкой равновеликих неперекрывающихся шаров. Элементарная ячейка ГПУ (рис. 1.9) представляет собой правильную шестигранную призму [82].

В случае гексагональной плотноупакованной решётки только одна шестая часть каждой из сфер, расположенных в вершинах призмы, одна вторая часть каждой из сфер, расположенных в центрах оснований принадлежит пространству элементарной ячейки. Учитывая, что основанием ячейки является правильный шестиугольник, то длина ребра основания равна $2R$.

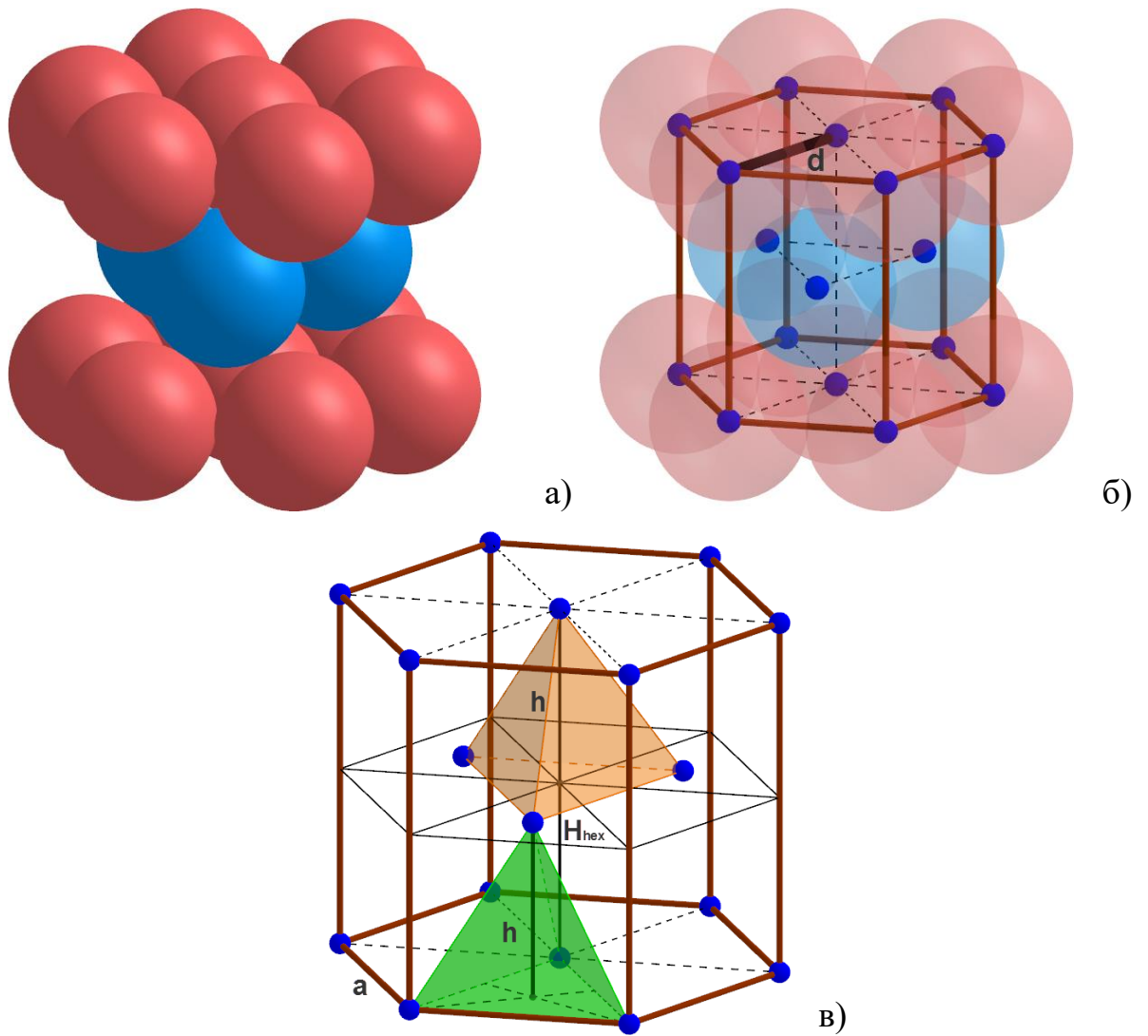


Рисунок 1.9 – Гексагональная плотноупакованная решётка:
 а) упаковка равновеликих неперекрывающихся сфер;
 б) элементарная ячейка;
 в) связь высоты ячейки с длиной ребра её основания

Также, очевидно, что высота призмы может быть выражена через высоты правильных тетраэдров, образуемых соседними частицами структуры (рис. 1.9 г). Тогда объём призмы V_{hex} может быть найден через её площадь S_{hex} и высоту H_{hex} следующим образом:

$$S_{hex} = \frac{3\sqrt{3}}{2} \cdot a^2 = \frac{3\sqrt{3}}{2} \cdot (2R)^2 = 6R^2\sqrt{3};$$

$$H_{hex} = 2h = 2 \cdot \frac{\sqrt{6}}{3} a = \frac{4R\sqrt{6}}{3} = \frac{8R}{\sqrt{6}};$$

$$V_{hex} = \frac{6R^2\sqrt{3} \cdot 8R}{\sqrt{6}} = \frac{48R^3}{\sqrt{2}}.$$

Таким образом коэффициент компактности гексагональной плотноупакованной решётки составит [82, 86, 90]:

$$\gamma_{\text{ГПУ}} = \frac{6 \cdot 4\pi R^3 \cdot \sqrt{2}}{3 \cdot 48 \cdot R^3} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} \approx 74\% . \quad (1.5)$$

Таким образом, значения коэффициентов компактности ГПУ и ГЦК одинаковы. Но сами структуры имеют топологические различия. В частности, все частицы кубической гранецентрированной решётки расположены одинаково, относительно окружающих частиц. При этом расположение частиц из соседних слоёв относительно окружающих в гексагональной плотно упакованной решётке различается [95, 98–99].

1.2.5 Гексагональная упаковка типа вюртцит

Одной из гексагональных пространственных решёток является решётка структурного типа вюртцит (рис. 1.10). Она представляет собой разреженный вариант плотнейшей гексагональной упаковки [50, 82, 99].

В случае решётки структурного типа вюртцит, только одна шестая часть каждой из сфер, расположенных в вершинах призмы, одна вторая часть каждой из сфер, расположенных в центрах оснований, принадлежит пространству элементарной ячейки. Учитывая, что основанием ячейки является правильный шестиугольник, то длина ребра основания равна $2R$.

Также, очевидно, что высота призмы может быть выражена через высоты правильных тетраэдров, образуемых соседними частицами структуры (рис. 1.10 в). Тогда объём призмы V_{hex} может быть найден через её площадь S_{hex} и высоту H_{hex} следующим образом:

$$S_{\text{hex}} = \frac{3\sqrt{3}}{2} \cdot a^2 = \frac{3\sqrt{3}}{2} \cdot \left(\frac{8R}{\sqrt{6}}\right)^2 = 16R^2\sqrt{3} ;$$

$$H_{\text{hex}} = 2h = 2 \cdot \frac{\sqrt{6}}{3} a = \frac{2\sqrt{6}}{3} \cdot \frac{8R}{\sqrt{6}} = \frac{16R}{3} ;$$

$$V_{\text{hex}} = \frac{16R^2\sqrt{3} \cdot 16R}{3} = \frac{256R^3\sqrt{3}}{3} .$$

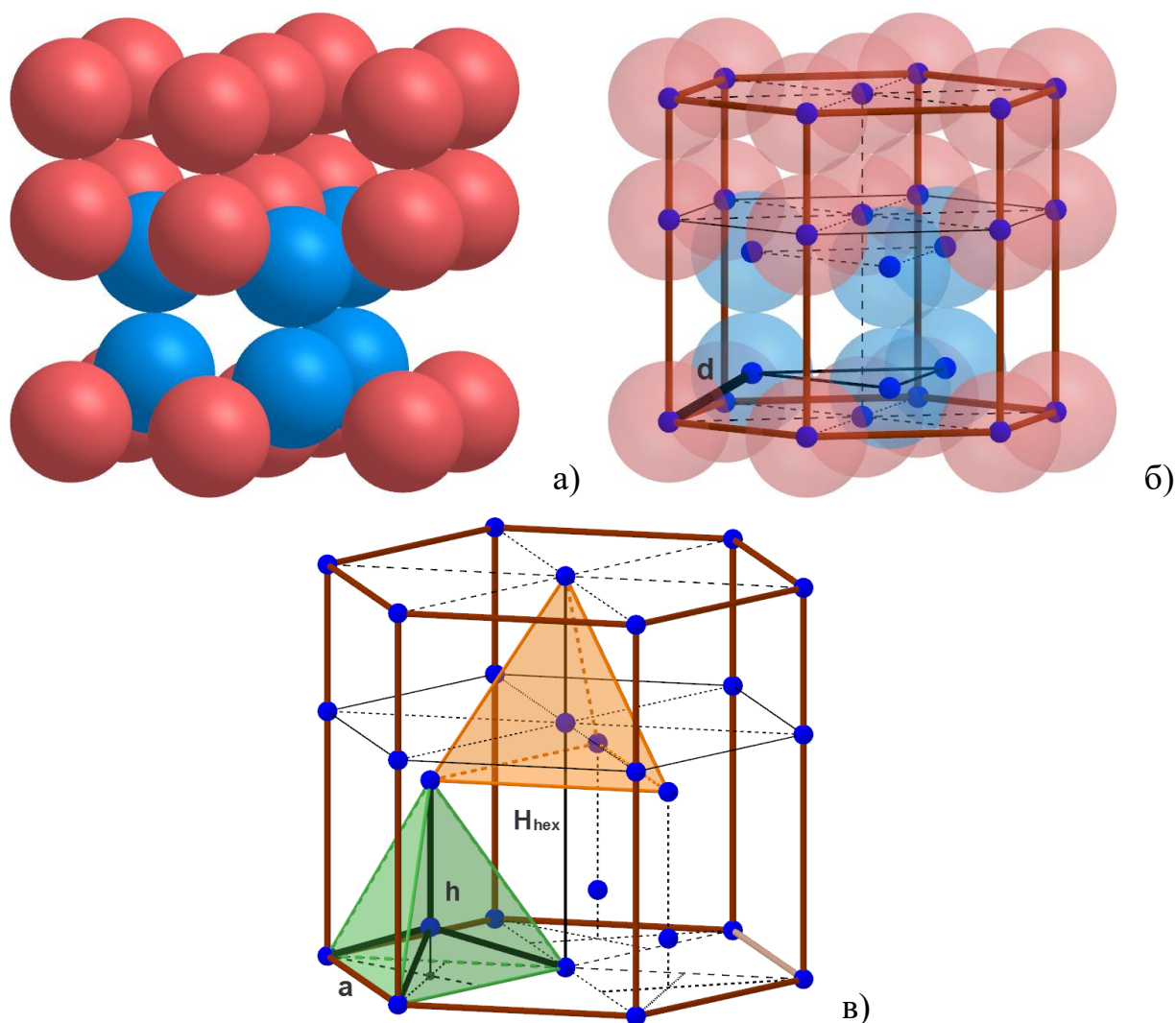


Рисунок 1.10 – Гексагональная решётка структурного типа вюртцит:
 а) упаковка равновеликих неперекрывающихся сфер; б) элементарная ячейка;
 в) связь высоты ячейки с длиной ребра её основания

Таким образом коэффициент плотности пространственной компактности решётки структурного типа вюртцит составит [82, 86, 90]:

$$\gamma_{\text{вюрц.}} = \frac{12 \cdot 4\pi R^3 \cdot 3}{3 \cdot 256 \cdot R^3 \cdot \sqrt{3}} = \frac{\pi\sqrt{3}}{16} \approx 34\% . \quad (1.6)$$

То есть почти две трети объёма пространства, занятого решёткой структурного типа вюртцит, на самом деле остаются пустыми.

1.3 Макроскопический расчет межъядерного расстояния

В контексте задач кристаллографии, минералогии, геологии и физики твёрдого тела для определения некоторых свойств кристаллов используется параметр структурной плотности. Он позволяет определять условия образова-

ния природных материалов и стабильность данных структур [44]. Также параметр структурной плотности может использоваться при определении структуры кристаллического вещества благодаря тому, что он позволяет определять расстояние между частицами [83].

1.3.1 Кристаллографическая формула длины связи

На данный момент для определения структуры вещества используются методы рентгеноструктурного анализа [83, 100–102]. Основная идея этой группы методов состоит в исследовании дифракционной картины от облучения исследуемого образца рентгеновскими лучами (рис. 1.11).

Анализ полученного изображения позволяет определить симметрию кристаллической структуры. Каждое пятно представляет собой след рентгеновского дифракционного отражения. Диффузные радиальные пятна в центре вызваны рассеянием рентгеновских лучей на тепловых колебаниях кристаллической решётки. Расположение дифракционных пятен на снимках зависит от симметрии кристалла и его ориентации относительно падающего луча.

Сильной стороной методов рентгеноструктурного анализа является то, что для проведения исследования достаточно очень небольшого количества вещества. Но для определения структуры помимо симметрии необходимо знать и расстояние между частицами. Для решения данной задачи существует два подхода, разработанные У.Л. Бреггом [43].

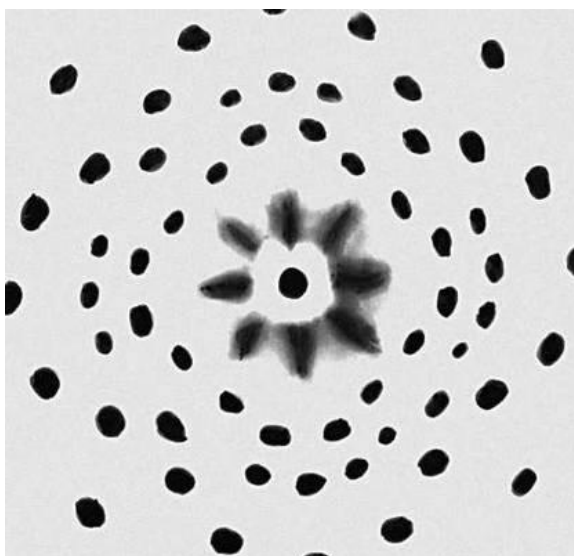


Рисунок 1.11 – Лауэграмма кристалла $NaCl$ [102]

Первый подход состоит в рассмотрении геометрических и макроскопических характеристик кристалла. А именно объёма элементарной ячейки V и плотности ρ . При этом считается, что кристалл составлен из соприкасающихся сфер, а расстояние между частицами в решётке d принимается равным сумме радиусов R_1 и R_2 двух соприкасающихся сфер, соответствующих атомам разных элементов:

$$\begin{aligned} V_0 &= 2d^3; \\ \rho &= \frac{M}{N_A V_0} = \frac{M}{2N_A d^3}; \\ d &= \sqrt[3]{\frac{M}{2N_A \rho}}, \end{aligned} \quad (1.7)$$

где V_0 – элементарный объём Брэгга, M – молярная масса, N_A – число Авогадро, d – расстояние между частицами в решётке [103].

Очевидно, что в зависимости от типа решётки, каждая структурная единица кристаллического вещества занимает некоторый «собственный» объём и некоторый «свободный» объём – часть общего объёма кристалла, не занятого частицами. Исходя из этого, У. Л. Брэгг предложил использовать в расчёте элементарный объём – объём пространства, приходящегося на одну пару связанных частиц (рис. 1.12). Данный объём определяется как объём двух равных кубов, один из которых эквивалентен объёму двух связанных частиц, а другой – свободному объёму, приходящемуся на эту же пару частиц.

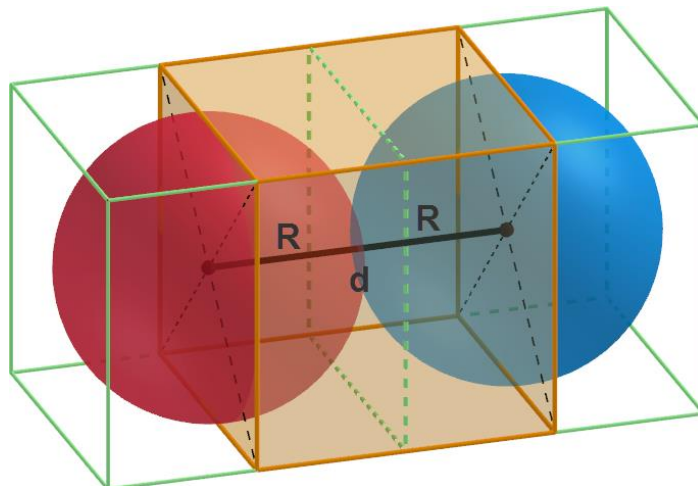


Рисунок 1.12 – Элементарный объём Брэгга

Стоит отметить, что «собственный» объём практически равен суммарному объёму сфер, соответствующих частицам:

$$V_{\Sigma, sph} = 2V_{sph} = 2 \cdot \frac{4}{3} \pi R^3 = \frac{\pi}{3} \cdot 8R^3 ;$$

$$V_{cb} = d^3 = (2R)^3 = 8R^3 ;$$

$$\frac{V_{\Sigma, sph}}{V_{cb}} = \frac{\frac{\pi}{3} \cdot 8R^3}{8R^3} = \frac{\pi}{3} \approx 1 .$$

Таким образом, применительно к кристаллу $NaCl$ ($\rho = 2,16$ г/см³, $M = 23,0 + 35,6 = 58,6$ г/моль), расстояние между атомами, согласно первому подходу, составит [103]:

$$d = \frac{58,6}{2 \cdot 6,02214076 \cdot 10^{23} \cdot 2,16} \approx 2,82 \text{ \AA} .$$

Вторым подходом к определению расстояния d является подход, основанный исключительно на анализе рентгенограммы и параметров излучения. Идея данного подхода состоит в том, что пучок рентгеновских лучей с длиной волны λ , отражающихся от серии параллельных атомных плоскостей, отстоящих друг от друга на одинаковых расстояниях d , будет усиливаться, если выполняется геометрическое соотношение – закон Вульфа-Брегга (рис. 1.13):

$$n\lambda = 2d \sin \theta ,$$

где n – порядок дифракционного максимума, λ – длина волны, θ – угол скольжения (брэгговский угол). Значения n и θ измеряются во время эксперимента.

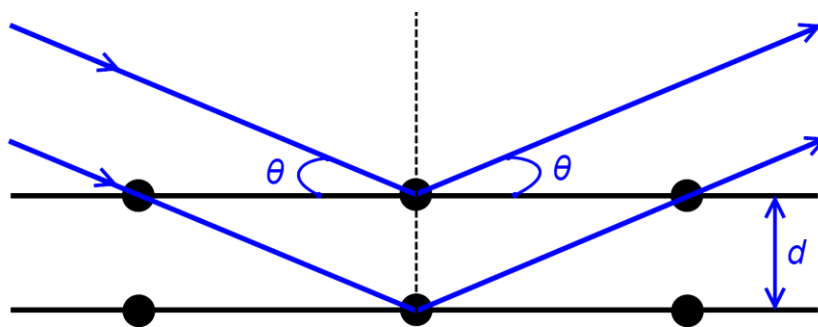


Рисунок 1.13 – Схема брэгговской дифракции рентгеновских лучей [83]

Таким образом, на данный момент именно второй подход к определению расстояния между частицами в кристалле более распространён. Но различные

варианты подхода, основанного на использовании геометрических и макроскопических параметров, также находят своё применение.

В. В. Зуев, в работе [42] приводит кристаллохимическую формула плотности, из которой также может быть выражено межъядерное расстояние:

$$\rho = k \frac{\sum A}{nd^3}, \quad (1.8)$$

где k – коэффициент пропорциональности, одновременно характеризующий плотность упаковки атомов в зависимости от их координационного числа (КЧ) – количества ближайших соседних атомов, расположенных на одинаковом расстоянии от текущего, $\sum A$ – суммарная атомная масса кристаллообразующих элементов, выраженная в г/моль, подсчитываемая по химической формуле соединения, n – число атомов в формуле, по которым определяются плотности упаковки и межатомные расстояния d (Å) [42].

Как отмечают авторы статьи [42], формула (1.7) применима к кристаллическим соединениям любой сложности, состава и структуры. Пользуясь этой формулой, расчёт плотности гетероатомных кристаллов можно выполнять тремя способами: по анионной упаковке с соответствующими величинами межатомных расстояний $d(X-X)$, по катионной упаковке с расстояниями $d(M-M)$, по смешанной катион-анионной упаковке с расстояниями $d(M-X)$.

В статье [42] приводятся соответствующие расчёты плотности веществ. При этом значения координационных чисел и межъядерных расстояний брались из справочной литературы, а значение параметра k определялись по графику (рис. 1.14).

Там же указывается, что значение $k = 1,66 \gamma'$, где γ' – относительная плотность упаковки атомов, а коэффициент 1,66 служит для выражения значения плотности в г/см³ [42].

В работе [42] делается вывод, что предложенная формула даёт достаточно точные результаты: средняя точность оценки плотности не превышает $\pm 0,1$ г/см³. Там же отмечается, что все три указанных подхода при расчёте

плотности дают одинаковый результат для одного и того же вещества. На основании чего делается вывод о том, что кристаллические структуры минералов правомочно рассматривать и как плотнейшие упаковки анионов, и как плотнейшие или близкие к ним упаковки катионов.

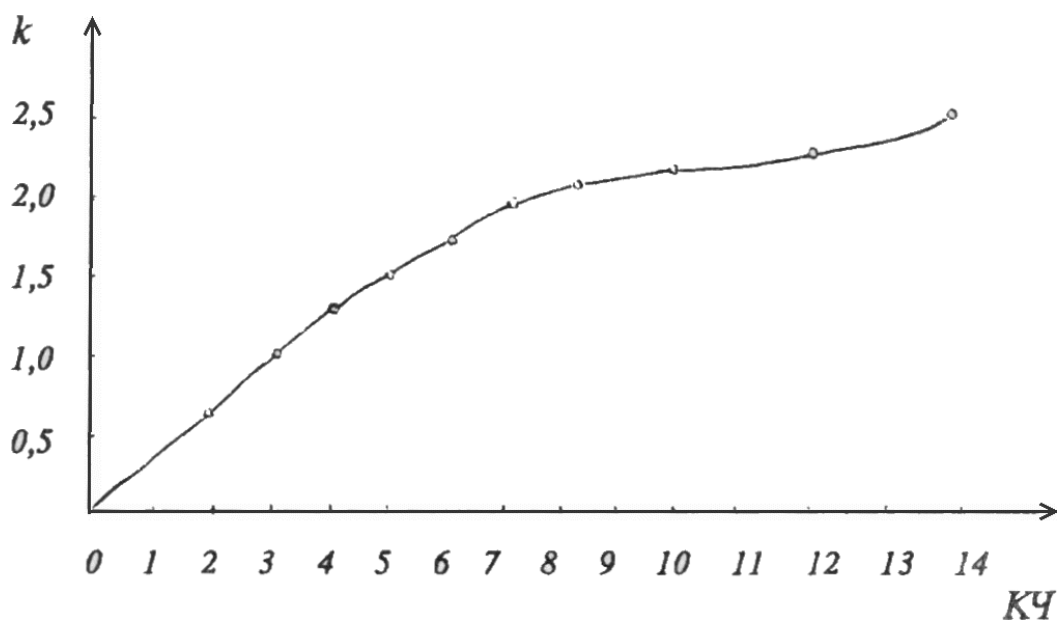


Рисунок 1.14 Зависимость параметра k , характеризующего плотность упаковки атомов, от их координационных чисел [42]

Таким образом, плотность кристаллов определяется помимо важнейшего параметра – атомной массы, ближним порядком катион-анионных, анион-анионных и катион-катионных окружений с соответствующими параметрами КЧ, γ , d , что и отражено в формуле (1.8). Структура кристалла, описывающая пространственное распределение его сильных и слабых связей, также влияет на плотность, что в данном подходе фиксируется в учёте неравноценности соответствующего атом-атомного окружения [42].

В монографиях «Кристаллоэнергетика как основа оценки свойств твердотельных материалов» и «Остовно-электронная кристаллохимия и свойства минералов» В. В. Зуева приводится анализ существующих способов расчёта структурной плотности кристаллических веществ и определения на её основе значений межъядерного расстояния. Одним из них является способ расчёта числа структурных единиц в единице объёма η и абсолютной структурной

рыхлости или объёма, приходящегося в среднем на каждую структурную единицу минерала Ω , по следующей формуле [44, 103]:

$$\eta = \frac{1}{\Omega} = \frac{nN'}{V}, \quad (1.9)$$

где n – число структурных единиц в формуле минерала, N' – число формульных единиц в элементарной ячейке, V – объём элементарной ячейки.

Несмотря на очевидную ясность их физического смысла, параметры η и Ω признаются недостаточными для характеристики структурной плотности минералов. А для реальных практических расчётов предлагается использовать другую характеристику структурной рыхлости:

$$\omega = \frac{M}{\rho n'},$$

где n' – число атомов в формуле соединения [44].

Например, для каменной соли структурной единицей является молекула $NaCl$, поэтому количество структурных единиц в формуле минерала $n = 1$. Число атомов в формуле соединения $n' = 2$. Кристаллы каменной соли имеют примитивную кубическую решётку: в её узлах в шахматном порядке располагаются атомы Na и Cl (см. рис. 1.4). Соответственно, в элементарной ячейке количество целых частиц $N = 1$, а количество формульных единиц $N' = 0,5$.

Как отмечают авторы [44], представляется очевидным, что по своему физическому смыслу параметр η должен быть одинаковым для решёток различных веществ, относящихся к одному и тому же типу. Но в действительности, это правило не выполняется (см. табл. 1.1).

Таблица 1.2 – Значения параметра η для кристаллов типа $NaCl$

Кристалл	η	Кристалл	η	Кристалл	η
LiF	0,122	NaF	0,081	AgI	0,036
MgO	0,107	MnS	0,056	PbTe	0,030
FeO	0,101	NaCl	0,045	KI	0,023
MnO	1,091	PbS	0,038	Rb	0,020

Различия значений параметра η для рассмотренных веществ указывают на необходимость использования другого, более корректного способа оценки

структурной плотности. В качестве такого параметра предлагается использовать относительную структурную плотность γ' кристаллической решётки, входящий в состав альтернативной кристаллохимической формулы плотности кристаллов [44, 103]:

$$\rho = \frac{k'\gamma'M}{n'd^3}, \quad (1.10)$$

где $k' = 1,66$ – константа, служащая для выражения плотности в г/см^3 и равная атомной единице массы $1,66 \cdot 10^{-24}$ г, поделенной на коэффициент перевода кубических ангстремов в кубические сантиметры.

В работе [44, 103] отмечается, что можно вывести строгую формулу оценки ρ из кристаллохимических данных путём сопоставления формулы (1.10) с известной рентгеноструктурной формулой плотности:

$$\rho = \frac{k'N'M}{V}. \quad (1.11)$$

В результате комбинирования этих двух формул, возможно получить:

$$\gamma' = \frac{N'n'd^3}{V}. \quad (1.12)$$

Для всех веществ, рассмотренных в табл. 1.1, формула (1.12) даёт одинаковую структурную плотность $\gamma' = 1$, что естественно, так как расчёт выполняется для разных соединений с одной и той же пространственной структурой. При этом формула (1.12) отличается от формулы (1.9) только введением параметра межатомных расстояний d , т. е. просто уточняет её [44].

В работах [44, 103] также указывается, что переход от γ' к γ осуществляется по формуле:

$$\gamma = b\gamma',$$

где $b = 52,4\%$ есть выраженная в процентах степень заполнения пространства равновеликими соприкасающимися сферами в решётке типа $NaCl$.

Таким образом, физический смысл параметра γ' состоит в степени заполнения атомами пространства рассматриваемого структурного типа по отношению к структурному типу $NaCl$. А сам параметр γ' может быть охарактеризован как относительная структурная плотность кристаллической решётки.

Из подходов У.Л. Брегга и В. В. Зуева логически следует формула коэффициента компактности для кубических решёток, которая может быть получена путём комбинации формул (1.7) и (1.12):

$$\gamma = \frac{V_F}{V} = \frac{N}{2} \cdot \frac{(2R)^3}{a^3}, \quad (1.13)$$

где V_F – объём ячейки, занятый частицами и их связями, V – объём элементарной ячейки, N – количество целых частиц в ячейке, a – длина ребра ячейки.

Согласно подходу Брегга, в расчётах нужно учитывать не отдельные частицы, а пары частиц, связанных друг с другом (структурные единицы). Для веществ, состоящих не более чем из двух элементов, считается, что каждая пара атомов образует одну единственную связь. Соответственно, количество фрагментов пространства элементарной ячейки P , занятого частицами вместе с их связями, будет в два раза меньше количества целых частиц в этой ячейке:

$$P = \frac{N}{2} = N'.$$

Объём кубической элементарной ячейки $V = a^3$. Межъядерное расстояние d позволяет определить элементарный объём V_0 , приходящийся на одну связь, и составляет $d = 2R$ для структур из равновеликих сфер, и $d = R_1 + R_2$ для структур из сфер с разными радиусами.

Таким образом, формулы (1.12) и (1.13) связаны между собой:

$$\gamma = \frac{\gamma'}{n'}.$$

А плотность кристаллического вещества с кубической решёткой может быть рассчитана через межъядерное расстояние, коэффициент компактности и молекулярную массу следующим образом:

$$\rho = \frac{kM\gamma}{d^3}, \quad (1.14)$$

где k – константа, служащая для перевода атомных единиц массы в килограммы, и численно равная $1,66053906660 \cdot 10^{-27}$.

Тогда из формулы (1.14) можно выразить межъядерное расстояние:

$$d = \sqrt[3]{\frac{kM\gamma}{\rho}}. \quad (1.15)$$

Таким образом, существуют разные модели кристаллической структуры: классическая модель шаровых упаковок и модель Брэгга – модель кубических упаковок. Соответственно существуют и разные методы оценки коэффициента компактности кристаллических структур, а также формулы, связывающие значение коэффициента компактности со значениями других параметров веществ, в частности с его плотностью, межъядерным расстоянием и молекулярной массой. Всё это позволяет произвести оценку эффективности данных моделей.

1.3.2 Сравнительная оценка эффективности моделей

Оценку эффективности моделей плотности упаковки можно произвести на основе формулы (1.15), используя классические формулы (1.2), (1.3), (1.4), (1.5), соответствующие модели шаровой укладки (ШУМ), и формулу (1.13), соответствующую модели кубической укладки (КУМ), путём определения величины межъядерного расстояния и её сравнения с литературными данными.

**Справочные данные об атомной массе взяты из источников [104–107], о плотности – из справочников [108, 109], о межъядерном расстоянии – из источников [43, 108–110]. Результаты соответствующих расчётов для примитивной (структурный тип $NaCl$, КЧ = 6), объёмно-центрированной (структурный тип $CsCl$, КЧ = 8), гранецентрированной (структурный тип Cu , КЧ = 12) кубических и гексагональной плотноупакованной (структурный тип Mg , КЧ = 12) решёток, а также решётки вюртцита (структурный тип $\alpha-ZnS$, КЧ = 4) приведены в табл. 1.2–1.6 соответственно. В графе «Расчёт» приводятся значения межъядерного расстояния d , соответствующее определённому экспериментально параметру решётки $a_{экс}$ с учётом типа решётки. В графах «ШУМ» и «КУМ» приводятся значения межъядерного расстояния, рассчитанные на основе соответствующих моделей упаковок частиц.

Таблица 1.2 – Кристаллы типа $NaCl$

Кристалл	M (а.е.м.)	ρ (кг/м ³) [108]	$a_{экв.}$ (нм)	Расчётное значение d (нм)		
				Контроль	ШУМ	КУМ
AgBr	187,772 [104]	6470	0,577450 [108]	0,288725	0,293309	0,288834
AgCl	143,318 [104]	5560	0,556000 [43]	0,278000	0,281941	0,277640
AgF	126,867 [104]	5852	0,492000 [110]	0,246000	0,266132	0,262072
CaO	56,077 [104]	3340	0,481080 [109]	0,240540	0,244397	0,240669
CaS	72,138 [104]	2590	0,568900 [108]	0,284450	0,289315	0,284902
CoO	74,932 [105]	6440	0,426000 [108]	0,213000	0,216277	0,212978
FeO	71,844 [104]	6000	0,430000 [43]	0,215000	0,218355	0,215024
KBr	119,002 [104]	2740	0,660000 [110]	0,330000	0,335494	0,330376
KCl	74,548 [104]	1988	0,629310 [108]	0,314655	0,319465	0,314591
KF	58,097 [104]	2480	0,534700 [110]	0,267350	0,273096	0,268930
KI	166,003 [104]	3120	0,706555 [110]	0,353278	0,358979	0,353503
LiBr	86,844 [104]	3464	0,550130 [110]	0,275065	0,279342	0,275081
LiCl	42,390 [104]	2070	0,512954 [110]	0,256477	0,261124	0,257141
LiF	25,938 [104]	2640	0,401730 [110]	0,200865	0,204423	0,201304
LiI	133,845 [104]	4060	0,600000 [110]	0,300000	0,306037	0,301369
MgO	40,304 [104]	3600	0,421170 [108]	0,210585	0,213516	0,210259
MnO	70,937 [105]	5370	0,444480 [108]	0,222240	0,225622	0,222180
MnS	86,998 [105]	4000	0,522300 [108]	0,261150	0,303503	0,298873
NaBr	102,894 [104]	3200	0,597324 [110]	0,298662	0,286088	0,281723
NaCl	58,440 [104]	2170	0,564020 [108]	0,282010	0,235927	0,232327
NaF	41,988 [104]	2780	0,463420 [108]	0,231710	0,328692	0,323678
NaI	149,894 [104]	3670	0,647280 [108]	0,323640	0,213003	0,209753
NiO	74,692 [104]	6720	0,417700 [108]	0,208850	0,301376	0,296778
PbS	239,271 [104]	7600	0,593600 [108]	0,296800	0,313186	0,308408
PbSe	286,183 [104]	8100	0,612550 [108]	0,306275	0,329142	0,324121
PbTe	334,814 [104]	8164	0,646060 [108]	0,323030	0,350124	0,344783
RbBr	165,372 [104]	3350	0,685400 [110]	0,342700	0,336467	0,331335
RbCl	120,918 [104]	2760	0,658100 [110]	0,329050	0,305041	0,300387
RbF	104,466 [104]	3200	0,564000 [110]	0,282000	0,373284	0,367589
RbI	212,372 [104]	3550	0,734200 [110]	0,367100	0,223857	0,220442
TiO	63,866 [104]	4950	0,417660 [110]	0,208830	0,266419	0,262355

Таблица 1.3 – Кристаллы типа $CsCl$

Кристалл	M (а.е.м.)	ρ (кг/м ³) [108]	$a_{экв.}$ (нм)	Расчётное значение d (нм)		
				Контроль	ШУМ	КУМ
Ba	274,656 [104]	3620	0,502300 [109]	0,435005	0,440876	0,434150
Cr	103,992 [104]	7150	0,288470 [109]	0,249822	0,254208	0,250330
Cs	265,811 [104]	1873	0,614100 [109]	0,531826	0,543211	0,534924
CsBr	212,810 [104]	4430	0,428120 [110]	0,370763	0,378575	0,372800
CsCl	168,356 [104]	3988	0,412300 [110]	0,357062	0,362616	0,357085
CsI	259,810 [104]	4510	0,456670 [110]	0,395488	0,402207	0,396071
Eu	303,928 [104]	5240	0,458270 [109]	0,396873	0,403122	0,396972
K	78,197 [104]	862	0,532100 [109]	0,460812	0,467933	0,460794
Mo	191,902 [104]	10200	0,316530 [107]	0,274123	0,276981	0,272756
Na	45,980 [104]	970	0,420960 [109]	0,364562	0,376896	0,371146
Nb	185,813 [105]	8570	0,330070 [109]	0,285849	0,290394	0,285964
Rb	170,936 [104]	1530	0,570300 [109]	0,493894	0,501576	0,493925

Таблица 1.3 – Кристаллы типа $CsCl$ (окончание)

Кристалл	M (а.е.м.)	ρ (кг/м ³) [113]	$a_{экс.}$ (нм)	Расчётное значение d (нм)		
				Контроль	ШУМ	КУМ
Ta	361,896 [104]	16400	0,330580 [108]	0,286291	0,292103	0,287647
V	101,883 [104]	6000	0,302380 [109]	0,261869	0,267674	0,263591
W	367,682 [104]	19300	0,316530 [108]	0,274123	0,278139	0,273896
α -Fe	111,690 [104]	7870	0,286640 [108]	0,248238	0,252137	0,248291
β -Li	13,880 [104]	534	0,350930 [109]	0,303914	0,308489	0,303783

Таблица 1.4 – Кристаллы типа Cu

Кристалл	M (а.е.м.)	ρ (кг/м ³) [108]	$a_{экс.}$ (нм)	Расчётное значение d (нм)		
				Контроль	ШУМ	КУМ
Ag	215,736 [104]	10500	0,40862 [108]	0,288938	0,293426	0,288950
Au	393,933 [105]	19300	0,40786 [108]	0,288401	0,292781	0,288314
Cu	127,093 [104]	8960	0,3615 [108]	0,255619	0,259333	0,255377
Ir	384,434 [105]	22562	0,38391 [109]	0,271465	0,275678	0,271473
Ni	117,387 [104]	8900	0,35241 [109]	0,249192	0,253122	0,249261
Pb	414,422 [104]	11300	0,49505 [108]	0,350053	0,355939	0,350509
Pd	212,842 [104]	12000	0,38901 [109]	0,275072	0,279391	0,275129
Pt	390,170 [104]	21500	0,39231 [108]	0,277405	0,281531	0,277236
Rh	205,811 [105]	12400	0,28032 [109]	0,198216	0,273277	0,269108
Th	464,075 [104]	11700	0,50851 [109]	0,359571	0,365361	0,359787
Yb	346,090 [107]	6900	0,54848 [109]	0,387834	0,395094	0,389067
α -Al	53,963 [105]	2700	0,4049 [108]	0,286308	0,290736	0,286301
α -Ca	80,157 [105]	1540	0,55884 [109]	0,395160	0,400001	0,393899
α -Ce	280,232 [105]	6770	0,5161 [109]	0,364938	0,370593	0,364940
α -Sr	175,242 [105]	2640	0,6084 [109]	0,430204	0,433776	0,427159

Таблица 1.5 – Кристаллы типа Mg

Кристалл	M (а.е.м.)	ρ (кг/м ³) [108]	$a_{экс.}$ (нм)	Расчётное значение d (нм)		
				Контроль	ШУМ	КУМ
Cd	224,829 [104]	8690	0,29788 [109]	0,297880	0,316858	0,312025
Mg	48,610 [104]	1740	0,32093 [109]	0,320930	0,325072	0,320113
Re	372,414 [104]	20800	0,27608 [109]	0,276080	0,280269	0,275994
Ru	202,144 [104]	12100	0,27053 [109]	0,270530	0,273871	0,269693
Tl	408,760 [104]	11850	0,34563 [109]	0,345630	0,348742	0,343422
Zn	130,764 [104]	7134	0,2665 [108]	0,266500	0,282470	0,278161
ε -Co	117,866 [105]	8860	0,25071 [109]	0,250710	0,253848	0,249975

Таблица 1.6 – Кристаллы типа α - ZnS

Кристалл	M (а.е.м.)	ρ (кг/м ³) [108]	$a_{экс.}$ (нм)	Расчётное значение d (нм)		
				Контроль	ШУМ	КУМ
α -ZnS	97,43 [108]	4087	0,3814 [108]	0,233559	0,237890	0,234261
ZnO	81,37 [110]	5675	0,3250 [109]	0,199021	0,200807	0,197744
CdS	144,48 [110]	4820	0,4135 [109]	0,253216	0,256764	0,252847
α -SiC	40,097 [110]	3160	0,3081 [109]	0,188672	0,192792	0,189851
GaN	83,73 [108]	6070	0,3190 [108]	0,195347	0,198234	0,195210
AlN	40,989 [109]	3050	0,3110 [109]	0,190448	0,196518	0,193520
BeO	25,011 [109]	3019	0,2698 [109]	0,165218	0,167251	0,164700

Таблица 1.6 – Кристаллы типа α -ZnS (окончание)

Кристалл	M (а.е.м.)	ρ (кг/м ³) [113]	$a_{\text{экс.}}$ (нм)	Расчётное значение d (нм)		
				Контроль	ШУМ	КУМ
InN	128,83 [108]	6786	0,3545 [109]	0,217086	0,220503	0,217139
MgTe	151,9 [109]	3850	0,4530 [109]	0,277405	0,281392	0,277100
CdSe	191,37 [108]	5660	0,4299 [108]	0,263259	0,267280	0,263202

Анализ полученных результатов позволяет сделать вывод о том, что расчёт значения коэффициента компактности, выполненный по формуле (1.13), даёт более точное значение по сравнению с классическими формулами (1.2), (1.3), (1.4), (1.5). Следовательно, модель кубической укладки Брегга является более точной, по сравнению с классической моделью шаровой упаковки, по крайней мере, в контексте связи макро- и микроскопических параметров кристаллических веществ.

1.4 Методы математического описания пространственных решёток

При решении более сложных задач, таких как определение значений структурных и энергетических параметров веществ и соединений различной природы, широко применяются методы численных расчётов. Такие вычисления учитывают большое количество частиц, располагающихся в узлах пространственной решётки. В ряде случаев только численный расчёт по большому объёму исходных данных может дать результат с требуемой точностью. Примером может служить расчёт значения постоянной Маделунга – одной из ключевых структурных и энергетических характеристик твёрдых тел [90, 95, 111–115].

Очевидно, что в подобных расчётах необходимо использовать современную вычислительную технику и эффективные способы описания пространственных решёток. На данный момент существуют несколько подходов к формированию математических моделей регулярных пространственных структур. В качестве наиболее общих из них можно назвать метод координатного матричного описания и метод компактного матричного описания.

1.4.1 Традиционный метод координатного описания

Координатные матричные модели предполагают рассмотрение частиц пространственной структуры в виде точек пространства с известными координатами и дополнительными характеристиками (например, масса, заряд). Модели такого типа просты для понимания и построения. Однако их использование в качестве исходных данных для численных методов расчётов различных структурных и энергетических параметров решёток сопряжено с некоторыми трудностями.

Например, координатные матрицы представляют собой списки с координатами всех частиц в заданном фрагменте структуры. При этом для получения точных данных исследуются относительно крупные фрагменты решёток, содержащие многие сотни тысяч частиц. В результате чего приходится либо формировать координатные матрицы требуемого размера перед основными этапами исследований, а во время исследований – обрабатывать соответствующие массивы данных. Либо рассчитывать координаты частиц в рассматриваемом фрагменте структуры во время исследования. Эти операции требуют повышенного использования вычислительных мощностей и объёмов памяти. Что, в свою очередь, приводит к необходимости использовать более дорогостоящее высокопроизводительное компьютерное оборудование.

При этом также используются вещественные значения координат и иных характеристик. Однако средствами вычислительной техники операции с целыми числами выполняются быстрее и точнее, по сравнению с вещественными. Учитывая большое количество обрабатываемых данных и операций с ними, погрешность расчётов и их продолжительность может расти из-за используемых средств вычислительной техники [114, 115].

Таким образом, координатное матричное описание имеет следующие недостатки: 1) большой объём описания даже для сравнительно небольших фрагментов простых решёток; 2) относительно высокие затраты вычислительных ресурсов для хранения и обработки описаний данного типа.

Например, фрагмент пространственной решётки $NaCl$, представляющий собой куб из четырёх элементарных ячеек, содержит 27 частиц (рис. 1.15).

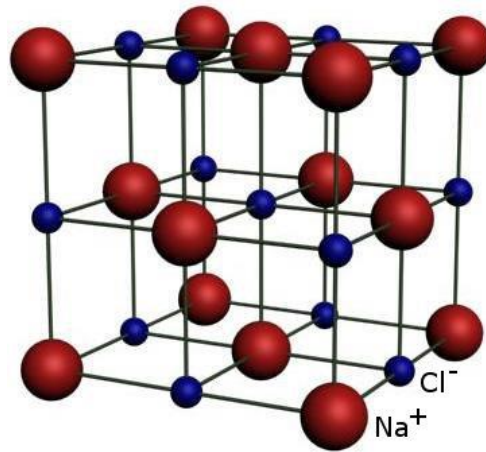


Рисунок 1.15 – Фрагмент пространственной решётки $NaCl$ [115]

Его традиционное описание с помощью матрицы координат, не содержащее информации о зарядах частиц, будет иметь размер 27×3 и иметь следующий вид [115]:

$$\begin{bmatrix}
 0,5 & 0 & 0 & -1 \\
 1 & 0,5 & 0 & -1 \\
 1 & 0 & 0,5 & -1 \\
 1 & 0 & 0 & +1 \\
 0 & 0,5 & 0 & -1 \\
 0,5 & 1 & 0 & -1 \\
 0 & 0 & 0,5 & -1 \\
 0 & 0 & 0 & +1 \\
 0,5 & 0,5 & 0,5 & -1 \\
 0,5 & 0,5 & 0 & +1 \\
 1 & 1 & 0,5 & -1 \\
 1 & 1 & 0 & +1 \\
 0,5 & 0 & 1 & -1 \\
 0,5 & 0 & 0,5 & +1 \\
 1 & 0,5 & 1 & -1 \\
 1 & 0,5 & 0,5 & +1 \\
 1 & 0 & 1 & +1 \\
 0 & 1 & 0,5 & -1 \\
 0 & 1 & 0 & +1 \\
 0 & 0,5 & 1 & -1 \\
 0 & 0,5 & 0,5 & +1 \\
 0,5 & 1 & 1 & -1 \\
 0,5 & 1 & 0,5 & +1 \\
 0 & 0 & 1 & +1 \\
 0,5 & 0,5 & 1 & +1 \\
 1 & 1 & 1 & +1 \\
 0 & 1 & 1 & +1
 \end{bmatrix}$$

Необходимо отметить, что данная матрица описывает только расположение частиц в пространстве для очень небольшого фрагмента решётки одной из простейших пространственных структур. Как правило для выполнения практических расчётов представленная матрица должна содержать информацию о гораздо большем количестве элементов решётки. При этом в данном примере легко уйти от дробных координат. Но в случае более сложных структур сделать этого уже не удастся.

Перечисленные трудности очевидны уже при решении относительно простых задач, таких как расчёт коэффициента компактности и величины межъядерного расстояния. Но особенно сильно они сказываются при выполнении более сложных расчётов.

1.4.2 Компактный векторно-матричный метод

В качестве альтернативы методу координатного матричного описания был предложен метод компактного матричного описания. Данный способ базируется на свойствах симметрии куба и позволяет описать всю пространственную решётку в виде небольшого набора треугольных матриц.

Согласно оригинальному методу построения компактного матричного описания выбранной структуры вся пространственная решётка рассматривается как потенциально бесконечная последовательность одинаково ориентированных в пространстве вложенных друг в друга кубических координационных слоёв. Координационный слой – это вспомогательная геометрическая структура, имеющая форму куба, с правильно расположенными и периодически повторяющимися узлами. Количество узлов зависит от номера слоя. Для первого координационного слоя узлы располагаются на вершинах, центрах граней и центрах ребер [24, 26]. Каждый следующий координационный слой увеличивается в размерах во все стороны, на половину длины ребра первого координационного слоя, а узлы транслируются на его поверхности (рис. 1.16).

При этом все координационные слои имеют единственный общий центр. Каждая из частиц моделируемой решётки в точности попадает в узел на поверхности одного из кубов [24, 26].

На основании свойств симметрии куба можно рассматривать не все узлы координационного слоя, а только те, что принадлежат одной его грани без потери значимой информации. То есть перейти от трёхмерной структуры куба к двумерной структуре квадрата и уменьшить количество обрабатываемых значений в шесть раз [115].

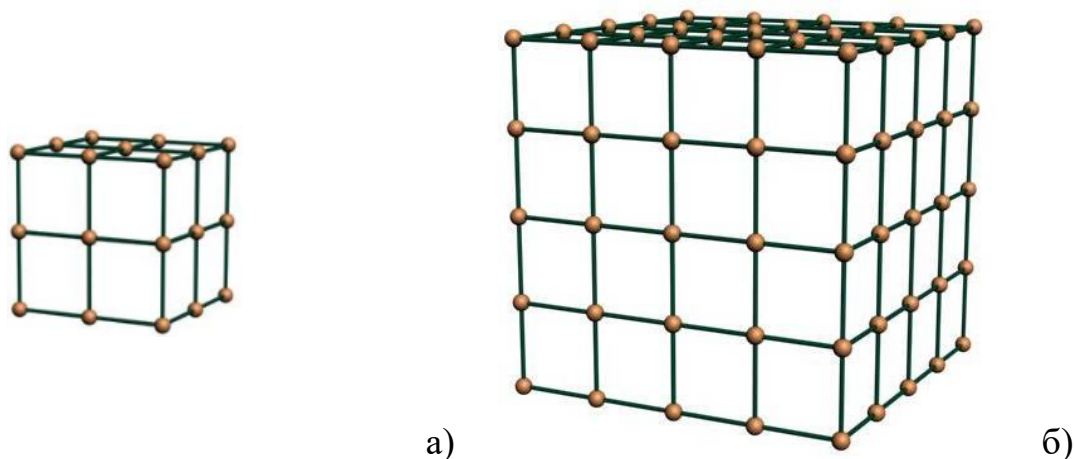


Рисунок 1.16 – Схемы координационных слоёв: а) первый слой; б) второй слой [115]

Квадрат так же обладает симметрией, которая позволяет рассматривать только его часть без потери значимой информации, что, в итоге, сокращает объём исходных данных в сорок восемь раз [115]. Описанный подход к уменьшению количества рассматриваемых узлов в общем виде может быть проиллюстрирован схемой, показанной на рис. 1.17.

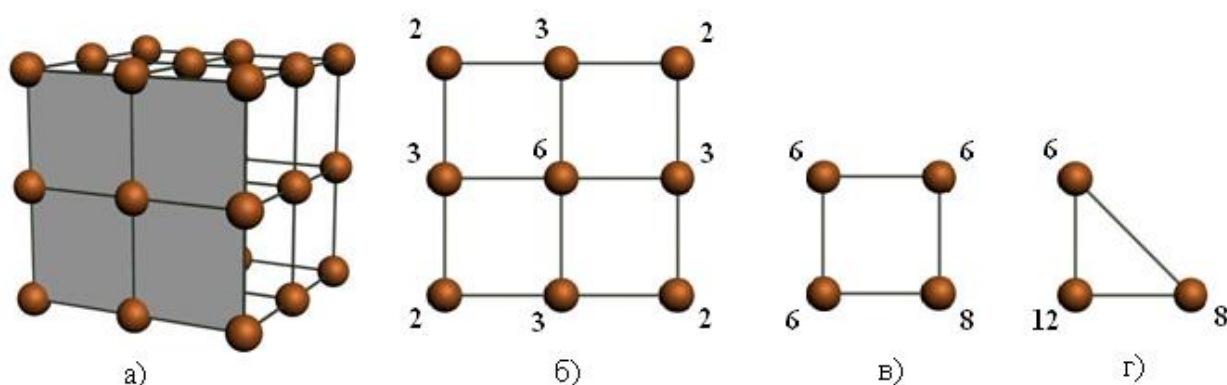


Рисунок 1.17 – Схема «сжатия» – сокращения количества рассматриваемых узлов:
 а) исходный координационный куб; б) куб, свёрнутый до одной грани;
 в) грань свёрнутая до своей 1/4 части; г) грань свёрнутая до 1/8 своей части [115]

Как уже отмечалось, уменьшение объёма описания возможно за счёт использования свойств симметрии куба (точечная симметрия группы O_h). Но этот эффект становится возможен также благодаря тому, что расчёты ряда

структурных и энергетических параметров пространственных решёток не требуют наличия информации о точном расположении частиц в пространстве. То есть достаточно знать только расстояние между частицами. Как раз эта информация при рассмотренном подходе сохраняется.

В контексте применения данного метода, для описания любого координационного слоя авторами работ [22–26] предлагается использовать три вида двумерных матриц: универсальную количественную (УКМ), структурную (СМ) и зарядовую (ЗМ). Произведение универсальной количественной и структурной матриц позволяют узнать количество частиц, а также их геометрическое положение в заданном кубическом координационном слое. Зарядовая матрица содержит информацию о заряде частиц, находящихся в соответствующих узлах решётки.

УКМ и СМ имеют идентичную друг другу структуру, но разное содержание и назначение. Универсальная количественная матрица содержит информацию о количестве узлов заданного типа в заданном координационном слое. Например, следующая универсальная количественная матрица описывает первый координационный слой (рис. 1.18):

$$K_1 = \begin{vmatrix} 6 & 0 \\ 12 & 8 \end{vmatrix}.$$

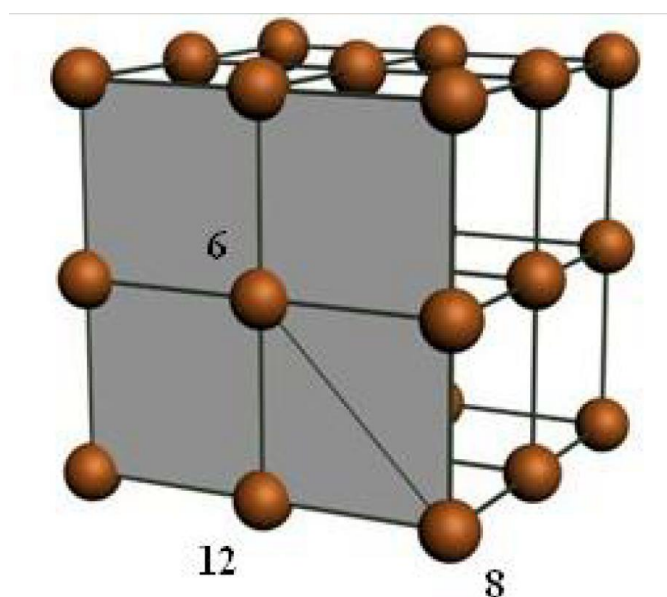


Рисунок 1.18 – Схема компактной модели первого координационного слоя [115]

При этом номера строки и столбца элемента универсальной количественной матрицы однозначно определяют геометрическое положение соответствующих ему симметричных узлов в текущем координационном слое. Благодаря такому способу формирования матриц расстояние между центром исследуемого фрагмента кристалла и конкретным пространственным узлом легко может быть рассчитано по формуле:

$$R_{i,g,l} = \sqrt{(i-1)^2 + (g-1)^2 + l^2}, \quad (1.16)$$

где i и g – соответственно номера строки и столбца текущего элемента матрицы, при нумерации младших строки и столбца с единицы, $R_{i,g,l}$ – расстояние между исходным и рассматриваемым узлом, l – номер координационного слоя, которому принадлежит рассматриваемый узел [26].

Важно отметить, что для построения компактного матричного описания, элементарная ячейка исследуемой структуры рассматривается в новой системе координат. Абсолютная величина её единичного отрезка непосредственно связана с величиной межъядерного расстояния в конкретной пространственной решётке. Поэтому приведённая формула расчёта расстояния между исходным и рассматриваемым узлом даёт результат в условных единицах длины специальной системы координат. Но для получаемого значения легко можно получить его выражение в общепринятых единицах длины. Это хорошо показано в [32], на примере кубических кристаллических решёток целого ряда соединений различной сложности (рис. 1.19).

Структурная матрица однозначно описывает структуру конкретной кристаллической решётки и содержит информацию о расположении частиц в узлах универсальной количественной матрицы. Если универсальная количественная матрица указывает сколько вообще есть мест каждого типа, в которых могут находиться частицы, то структурная матрица указывает, какая часть из этих мест действительно занята частицами. Поэтому элементами структурной матрицы являются числа в диапазоне от нуля до одного.

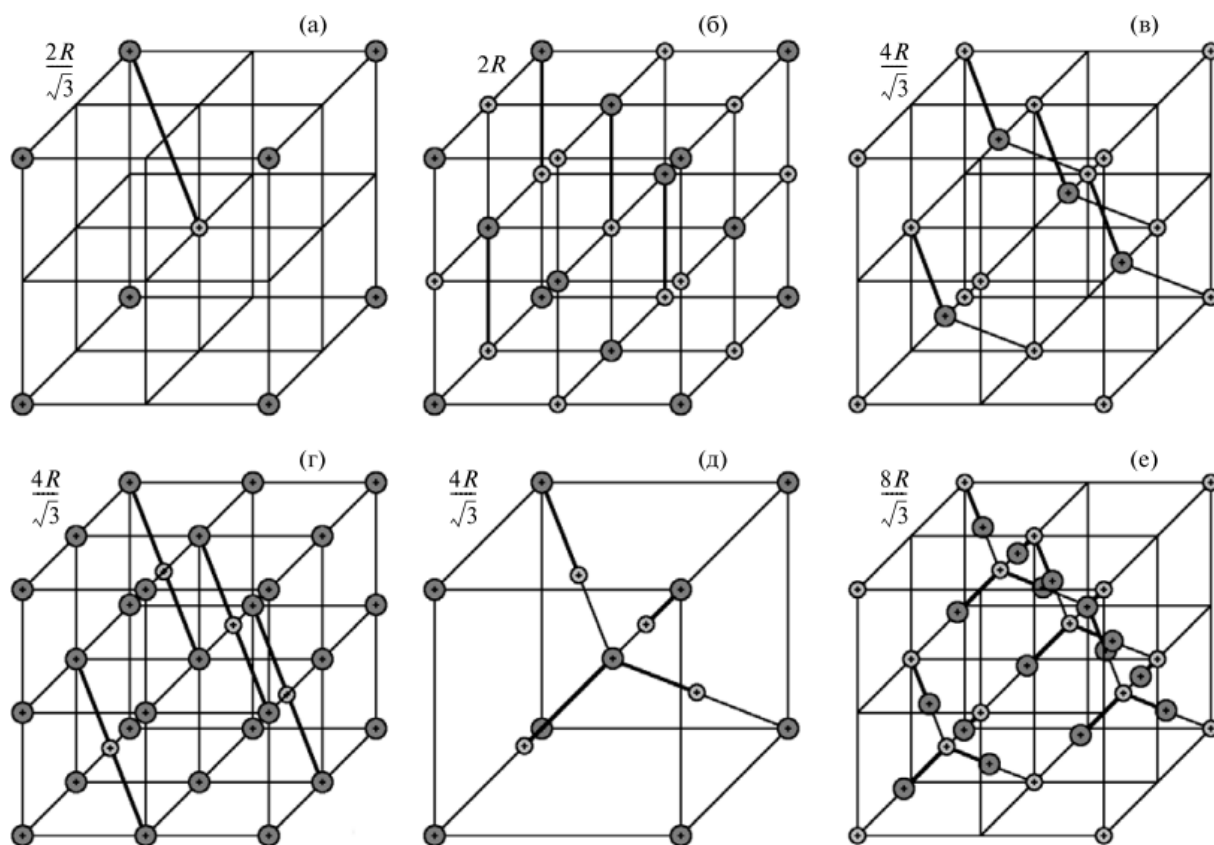


Рисунок 1.19 – Структурные схемы элементарных ячеек решёток кубической сингонии типа A_xB_y : а) хлорид цезия $CsCl$; б) каменная соль $NaCl$; в) сфалерит $\alpha-ZnS$; г) флюорит CaF_2 ; д) куприт Cu_2O ; е) кристобалит $\beta-SiO_2$ [32]

Например, структурные матрицы первого координационного слоя для кристаллической решётки типов $NaCl$ (см. рис. 1.15) и $CsCl$ (рис. 1.20) имеют следующий вид соответственно:

$$M_{NaCl,1} = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{vmatrix}, M_{CsCl,1} = \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}.$$

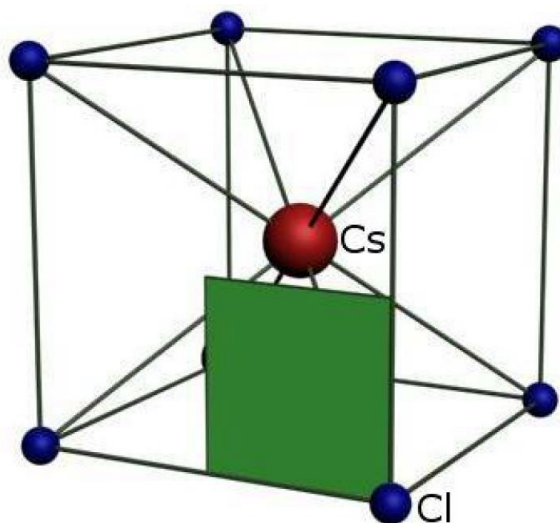


Рисунок 1.20 – Первый координационный слой решётки типа $CsCl$ [115]

Эта матрица означает, что в первом координационном слое нет частиц ни в центрах граней, ни на рёбрах, но все места для частиц в вершинах соответствующего куба заполнены [22–26].

Стоит обратить внимание на то, что структура координационных слоёв быстро начинает повторяться. То есть после некоторого количества уникальных по структуре слоёв (базовых), начинают следовать координационные слои, целиком повторяющие их структуру. Количество уникальных слоёв своё для каждой пространственной решётки. Но эта особенность позволяет описать только базовые координационные слои набором компактных матриц и использовать полученное описание для моделирования сколь-угодно большого фрагмента исследуемой структуры.

Таким образом, достоинством метода компактного матричного описания по сравнению с методом координатного матричного описания является значительное уменьшение объёма исходных данных. А также возможность разработки и применения методов скоростного высокоточного расчёта ряда структурных и энергетических параметров пространственных решёток. Ряд таких методов описаны в работах [22–26].

При этом важно отметить и недостатки оригинальной версии метода компактного матричного описания. Главным таким недостатком, существенно ограничивающим область применения таких моделей, является их фундаментальная привязка к свойствам симметрии куба. Поэтому на данный момент метод компактного матричного описания применяется только к решёткам кубической сингонии. Их элементарные ячейки по определению гарантируют возможность разбить решётку на координационные слои. А также позволяют легко определять количество базовых слоёв для каждой конкретной решётки. Однако не кубические структуры такими свойствами не обладают.

Другими недостатками метода компактного описания является очевидно более сложный процесс формирования матричной модели. А также необходимость разработки специальных способов численных расчётов, принимающих в качестве входных данных компактные матричные модели.

1.5 Постоянная Маделунга

Постоянная Маделунга характеризует силу кулоновского взаимодействия между ионами в решётке и позволяет определить полную энергию фрагмента исследуемой структуры, её стабильность и модуль упругости [114, 116].

В исследованиях по определению различных свойств соединений одним из наиболее перспективных и удобных подходов является энергетический подход. Он позволяет исследовать процессы, происходящие в кристаллах при внешних воздействиях, с помощью расчётов энергий ионных взаимодействий.

При этом достоинствами данного подхода можно назвать: использование простых расчётов; учёт небольшого количества физических характеристик; возможность исследования сложных структур и соединений (например, алюмосиликаты); отсутствие необходимости изготовления экспериментальных образцов. При этом энергетический подход требует выполнения расчёта значений постоянных Маделунга для исследуемых структур [117–120].

Расчёты постоянной Маделунга также применяются в исследованиях сложных органических соединений и полимеров, то есть, находит своё применение в нефтехимии и фармацевтике. Также существуют методы расчёта напряжения литий-ионных аккумуляторов с использованием постоянной Маделунга [117–120].

1.5.1 Традиционные методы расчёта постоянной Маделунга

Значение постоянной Маделунга обозначается A_M . Её значение зависит от числа ионов в формуле химического соединения и геометрией кристалла.

Классический метод расчета постоянной Маделунга, предложенный Эрвином Маделунгом, представляет собой суммирование зарядов с учётом расстояния между ними и выбранным центральным зарядом [121].

Такой расчёт достаточно легко выполняется для цепочки ионов, то есть в одномерном пространстве (рис. 1.21).

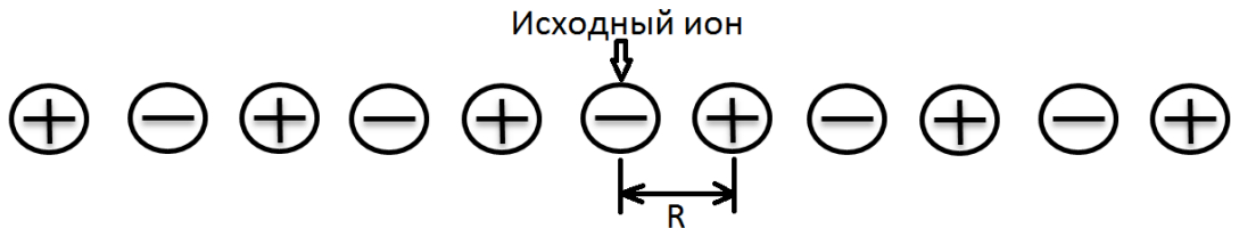


Рисунок 1.21 – Цепочка ионов в одномерном пространстве [9, 114, 116]

Тогда значение постоянной Маделунга можно рассчитать следующим образом:

$$A_M = 2R \cdot \left(R - \frac{1}{2R} + \frac{1}{3R} - \frac{1}{4R} + \dots \right) = 2 \cdot \ln(2).$$

Но задача нахождения суммы подобного знакопеременного ряда в пространствах большей размерности уже гораздо труднее: сумма ряда либо начинает очень медленно сходиться, либо вовсе расходится. Это видно уже на примере простейших решёток кубической сингонии [114, 117–120].

При этом значение данного параметра позволяет определять, например, энергию кулоновского взаимодействия в решётке:

$$E = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} A_M,$$

где e – величина элементарного заряда; ϵ_0 – диэлектрическая проницаемость вакуума [114]. Что является очень важным показателем в исследованиях свойств существующих и разработке новых соединений.

Для эффективного расчёта константы Маделунга соединений, имеющих трёхмерную структуру, были предложены несколько методов. Например, метод Эвьена. Он заключается в выделении электрически нейтральной группы частиц (нейтрального комплекса) [122–126].

Если удаётся выбрать подходящую группу ионов в качестве нейтрального комплекса, то даже для медленно сходящегося знакопеременного ряда можно рассчитать сумму с приемлемой точностью. Однако, как отмечается в [114], выделение нейтральных групп в решётках не кубических сингоний является трудной и не всегда разрешимой задачей.

Другим методом более эффективного расчёта постоянной Маделунга является метод Эвальда. Считается, что он позволяет достичь наилучшей сходимости знакопеременных рядов. Данный метод является частным случаем суммирования Пуассона, в которой энергии взаимодействия в реальном пространстве заменяются на эквивалентное суммирование в пространстве Фурье [142–146].

Как отмечается в [114], недостатком метода Эвальда является его вычислительная сложность и всё ещё недостаточно высокая сходимость рядов. Дополнительная трудность в методе Эвальда связана с выбором оптимального обрезającego фактора, который выделяет для расчета некую область в кристалле [127]. Более того, в работе [128] показано, что данный метод не подходит для простых наноструктур.

Рассмотренные методы сложны для практической реализации и не дают общего подхода для рассмотрения различных регулярных пространственных структур. К тому же, ни один из классических методов расчёта постоянной Маделунга не решает проблему сходимости рядов для решеток, обладающих нескомпенсированным зарядом ячейки [114, 116].

1.5.2 Метод Харрисона-Сычёва для расчёта постоянной Маделунга

Существует ряд сравнительно более новых методов расчёта постоянной Маделунга, предполагающих использование идеи расширяющихся кубов. Одним из них является метод Харрисона [112, 125].

Как отмечается в работах [114, 116], данный метод не имеет проблемы условной сходимости ряда. Суть метода Харрисона состоит в следующем: элементарная ячейка кристалла анализируемого типа расширяется в трех измерениях. При этом ограничивающая сфера радиуса R_1 , исключая электростатическое взаимодействие ионов, оказавшихся снаружи. Очевидно, что суммирование значений ионов, оставшихся внутри сферы Харрисона, приводит к колебаниям результирующего заряда. Величина этих колебаний нарастает с увеличением радиуса сферы. Для их компенсации при расчёте учитывается тон-

кая оболочка ограничивающей сферы с зарядом, равным $-Q/R_I$, где Q – результирующий заряд, полученный при суммировании зарядов всех ионов, находящихся внутри сферы Харрисона [114, 116].

Метод Харрисона получил своё дальнейшее развитие в работах [9, 10, 114, 116]. В частности, был предложен универсальный алгоритм расчёта постоянной Маделунга кристаллических структур кубической сингонии, основанный на методе Харрисона и методе компактного матричного описания.

Суть предложенного алгоритма расчёта состоит в следующем [114, 116]:

1. задаются элементарные матрицы-генераторы нечетных и чётных координационных слоев, отражающие расположение заряженных частиц в решетке конкретного типа;

2. задаётся значение L номера последнего исследуемого слоя;

3. на основе матриц-генераторов с использованием параметра L формируются двумерные векторно-матричные модели Z_L и Z_{L-1} расположения зарядов для последнего и предпоследнего исследуемых слоёв;

4. на основе общей универсальной количественной матрицы с использованием параметра L формируются матрицы K_L и K_{L-1} , характеризующие количество однотипных узлов двух последних исследуемых слоёв;

5. путём поэлементного умножения матриц Z и K формируются глобальные матрицы M соответствующих координационных слоёв;

6. рассчитывается радиус ограничивающей сферы Харрисона по формуле $R_H = L \cdot k$, где k – коэффициент перевода величин, определяемый характером связи между длиной ребра элементарного куба и величиной межъядерного расстояния исследуемой решётки (см. рис. 1.19);

7. выполняется вычисление решеточных сумм A_l для каждого из координационных слоев, при этом для каждого слоя формируются матрица на основе соответствующей глобальной матрицы M путём удаления из неё необходимого количества внутренних строк и столбцов;

8. каждая из полученных решеточных сумм сохраняется в памяти для использования при расчёте итогового значения постоянной Маделунга;

9. посредством суммирования величин зарядов, находящихся внутри сферы Харрисона, включая заряд центрального иона, вычисляется величина компенсирующего заряда Q ;

10. на базе сохраненных данных рассчитывается конечное значение постоянной Маделунга по формуле:

$$A_M = \sum_{l=1}^L A_l - \frac{Q}{R}. \quad (1.17)$$

Стоит обратить внимание на то, что при расчёте решёточных сумм для каждого элемента матрицы M выполняется проверка принадлежности сфере Харрисона:

$$k\sqrt{(i-1)^2 + (j-1)^2 + l^2} \leq R. \quad (1.18)$$

Решёточная сумма рассчитывается по формуле:

$$A_l = \sum_{j=1}^l \sum_{i=1}^l \frac{M_{i,j}}{k\sqrt{(i-1)^2 + (j-1)^2 + l^2}}. \quad (1.19)$$

Авторы данного алгоритма расчёта отмечают, что благодаря использованию в качестве исходных данных компактных матричных описаний, достигается значительное увеличение скорости производимых вычислений [114, 116].

1.6 Выводы по главе

Анализ публикаций в таких областях, как математическая теория групп, кристаллография, кристаллофизика, физика твёрдого тела, физика плазмы, теория телекоммуникации и кодирования информации позволяет сделать вывод о том, что модели пространственных шаровых упаковок широко применяются для решения большого разнообразия научных и технических задач. Однако методы решения некоторых задач, связанных с пространственными шаровыми упаковками, обладают потенциалом для повышения удобства, эффективности и точности расчётов.

Так же, проведённый обзор литературных источников позволяет сформулировать следующие выводы по главе.

Во-первых, разработка новых методов математического описания пространственных структур и методов расчётов их параметров является перспективной задачей. Особенно это справедливо в контексте исследований соединений и материалов сложных по своим составу и структуре. Соответствующие разработки ведутся и находят своё применение в различных областях современных науки и техники.

Во-вторых, развитие методов математического описания и разработка новых методов расчётов параметров пространственных решёток целесообразно выполнять и проверять на более простых решётках и параметрах. Тогда в дальнейшем новые методы можно будет перенести и на более сложные структуры и трудно вычисляемые параметры. Использование относительно простых и хорошо изученных соединений позволит проверить адекватность и эффективность разработанных методов описания и расчётов.

В-третьих, существуют разные подходы к математическому описанию пространственных решёток. В их числе координатный матричный метод и метод компактного матричного описания. Каждый из них имеет свои сильные и слабые стороны. При этом более перспективным с точки зрения повышения эффективности расчётов является компактный матричный метод. Однако, в силу фундаментальных особенностей в его нынешнем виде он применим только к решёткам кубических сингоний.

В-четвёртых, существуют различные методы расчёта одних и тех же параметров пространственных решёток. Например, величины межъядерного расстояния, коэффициента плотности пространственной упаковки и значения постоянной Маделунга. При этом плотность пространственной упаковки и величина межъядерного расстояния определяются достаточно легко и точно даже для сложных соединений и структур. А расчёты постоянной Маделунга до сих пор представляют трудность, по крайней мере для сложных соединений, например ацетатов, цеолитов и других.

В-пятых, гексагональные решётки имеют широкое распространение в природе. При этом они более сложны, чем кубические, известны давно и достаточно хорошо изучены. В том числе решётки структурных типов вюртцит и магний. Они могут быть использованы в качестве первоначальных объектов, для которых могут быть разработаны новые или усовершенствованы существующие методы математического описания и расчётов структурных и энергетических параметров. Выбор этих решёток также позволит провести верификацию новых методов и моделей.

2 МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ РЕШЁТОК ТИПОВ

ВЮРЦИТ И МАГНИЙ

Одними из наиболее широко известных подходов к описанию пространственных структур являются модели укладки шаров и матрицы координат. Модели укладки шаров предполагают рассмотрение частиц пространственной структуры в виде неперекрывающихся сфер некоторого радиуса, занимающих определённые позиции в пространстве.

Координатные матричные описания предполагают рассмотрение частиц пространственной структуры в виде точек пространства, которые могут иметь дополнительные характеристики. Как уже отмечалось, эти модели просты для понимания и построения. Однако их использование в качестве исходных данных для численных методов расчётов различных структурных и энергетических параметров решёток сопряжено с некоторыми трудностями.

Недостатки моделей укладки шаров и координатного матричного описания возможно преодолеть посредством разработки новых способов математического описания пространственных решёток. В частности, модели укладки кубов Брэгга и метод компактного матричного описания.

Так, в предыдущей главе было показано, что аналитические расчёты величины межъядерного расстояния для веществ и соединений различной структуры, выполненные на основе КУМ, дают более точные результаты по сравнению с расчётами на основе ШУМ. А в качестве альтернативы методу координатного матричного описания может выступить метод компактного матричного описания. Данный тип моделей представляет всю пространственную решётку в виде небольшого набора треугольных матриц. При этом общее количество элементов в компактной модели в 48 раз меньше, чем в координатной, описывающий тот же фрагмент решётки. Другим преимуществом данного метода является то, что компактные матрицы могут быть полностью целочисленными, а значит накапливать меньшую погрешность при вычислениях. Более

того, для моделей данного типа могут быть разработаны скоростные высокоточные методы расчётов параметров решёток [22–32, 55–56].

Таким образом, новые математические описания гексагональной плотно упакованной решётки и решётки структурного типа вюртцит должны упростить расчёты структурных и энергетических параметров веществ с соответствующей структурой. Самыми простыми из которых являются коэффициент плотности пространственной упаковки и величина межъядерного расстояния. Что, в свою очередь, позволит проверить адекватность и точность предлагаемых методов описания решёток, а также применить их в последствии к соединениям, обладающим более сложной структурой и представляющим больший интерес для науки и техники.

2.1 Создание кубических Брэгговских моделей

Прежде чем переходить к разработке новых математических описаний гексагональных пространственных решёток, стоит выполнить построение брэгговских аналогов для более простых кубических решёток: примитивной, объёмно-центрированной и гранецентрированной. После чего рассмотреть более сложные гексагональную плотно упакованную решётку и решётку структурного типа вюртцит [57, 80, 129–133].

2.1.1 Брэгговский аналог ПК

Рассмотрим технологию построения брэгговского аналога элементарной ячейки примитивной кубической решётки на примере соединения $NaCl$ (рис. 2.1). Для удобства дальнейшего рассмотрения на первом шаге совершим переход от классической элементарной ячейки ПК (см. рис. 1.4) к её расширенной версии (рис. 2.1 а). Расширенная элементарная ячейка получается путём простой трансляции классической.

На следующем шаге отметим геометрическое расположение связей между частицами (рис. 2.1 б). Согласно подходу Брэгга, каждая связь образуется парой частиц. При этом каждая частица участвует в образовании лишь одной связи. Предположим, что все связи в решётке ориентированы одинаково (например, вертикально).

Тогда каждой сфере будет соответствовать ровно половина связи, направленная вверх или вниз от её центра в зависимости от места расположения сферы в ячейке.

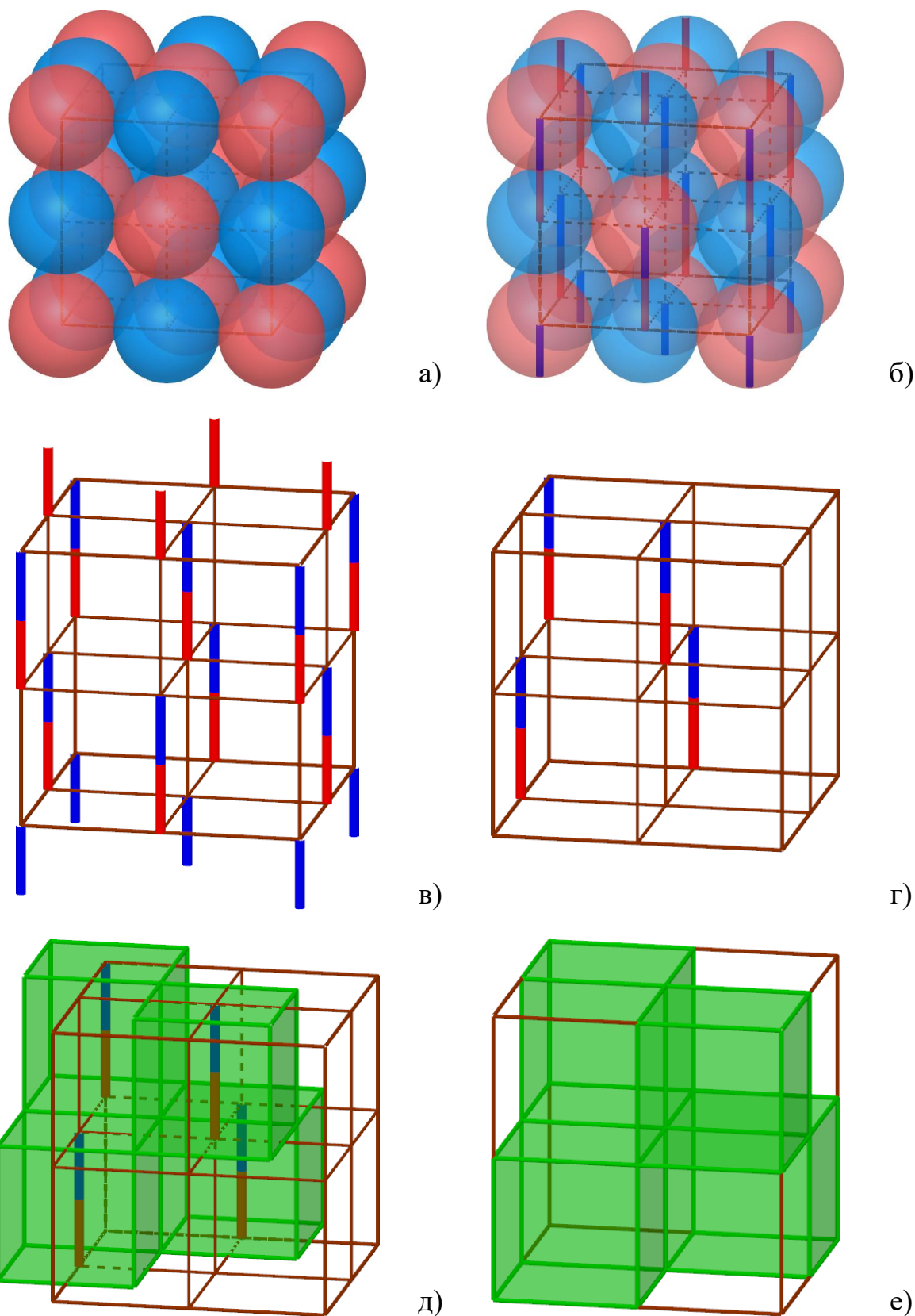


Рисунок 2.1 – Шаги построения модели Брэгга для примитивной кубической решётки (структурный тип $NaCl$)

На третьем шаге уберём сферы и оставим только связи (рис. 2.1 в). Получившийся чертёж позволяет сделать следующие наблюдения: 1) все фрагменты связей, находящиеся внутри расширенной элементарной ячейки, соединились друг с другом, образовав полные связи; 2) существуют фрагменты связей, расположенные за пределами расширенной ячейки; 3) фрагменты связей, выходящие за пределы ячейки идеально соответствуют фрагментам, образовавшим полные связи (рис. 2.2).

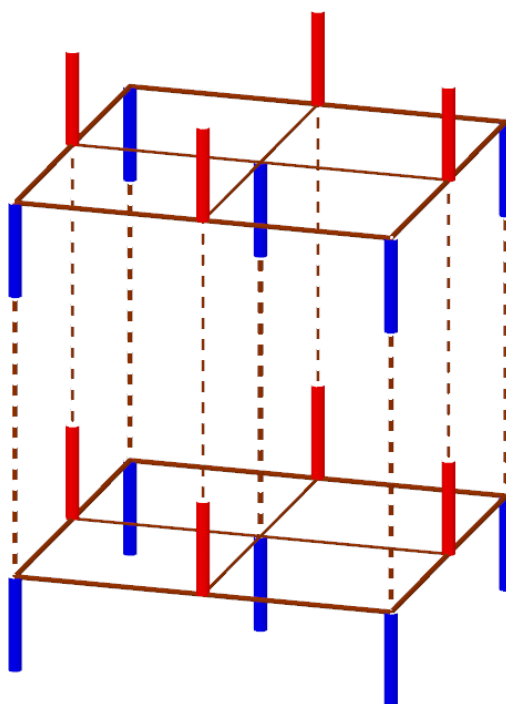


Рисунок 2.2 – Однотипность конфигурации оснований расширенной элементарной ячейки ПК при представлении в виде связей

Следовательно, представление расширенной элементарной ячейки ПК в виде организованных, одинаково ориентированных в пространстве связей позволяет описать примитивную кубическую решётку. При этом данный способ эквивалентен представлению ячейки в виде плотной упаковки шаров.

На следующем шаге уберём все фрагменты связей, расположенные за пределами рассматриваемой ячейки, а также все связи, которые дублируют друг друга и могут быть восстановлены путём трансляции (рис. 2.1 г).

На пятом шаге впишем оставшиеся четыре связи в кубы так, что 1) каждая связь соединяет центры противоположных граней своего куба 2) все кубы

ориентированы в пространстве также, как расширенная элементарная ячейка (рис. 2.1 д). Это и будут кубы Брэгга (см. рис. 1.12).

На последнем, шестом шаге остаётся сместить границы ячейки так, чтобы её вершины совпали с вершинами кубов (рис. 2.1 е). Полученная расширенная кубическая ячейка, содержащая четыре заполненных и четыре пустых куба, и есть модель упаковки кубов Брэгга для решётки типа $NaCl$.

2.1.2 Брэгговский аналог ОЦК

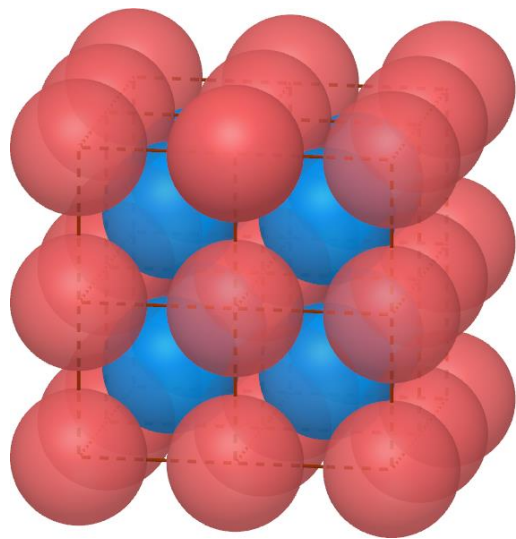
Аналогичным образом рассмотрим технологию построения брэгговского аналога элементарной ячейки объёмно-центрированной кубической решётки на примере соединения $CsCl$ (рис. 2.3). Для удобства рассмотрения на первом шаге перейдём от классической элементарной ячейки ОЦК (см. рис. 1.5) к её расширенной версии (рис. 2.3 а).

На следующем шаге отметим геометрическое расположение связей между частицами (рис. 2.3 б). Предположим, что все связи в решётке ориентированы одинаково, параллельно главной диагонали расширенной ячейки.

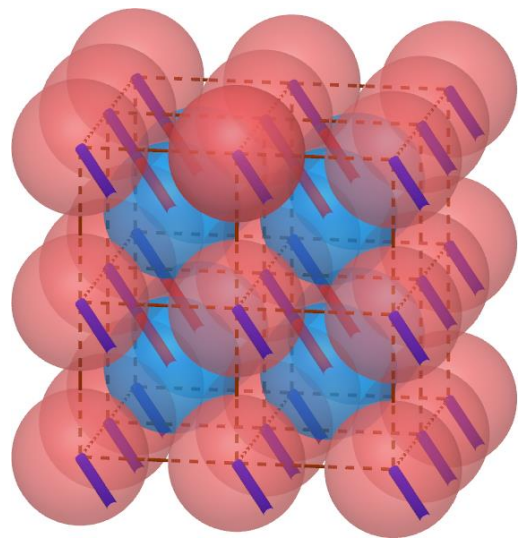
Тогда каждой сфере будет соответствовать ровно половина связи, направленная параллельно главной диагонали ячейки вверх или вниз от её центра в зависимости от места расположения частицы.

На третьем шаге уберём сферы и оставим только связи (рис. 2.3 в). Получившийся чертёж позволяет сделать следующие наблюдения: 1) все фрагменты связей, находящиеся внутри расширенной элементарной ячейки, соединились друг с другом, образовав полные связи; 2) существуют фрагменты связей, расположенные за пределами расширенной ячейки; 3) фрагменты связей, выходящие за пределы ячейки идеально соответствуют фрагментам, образовавшим полные связи.

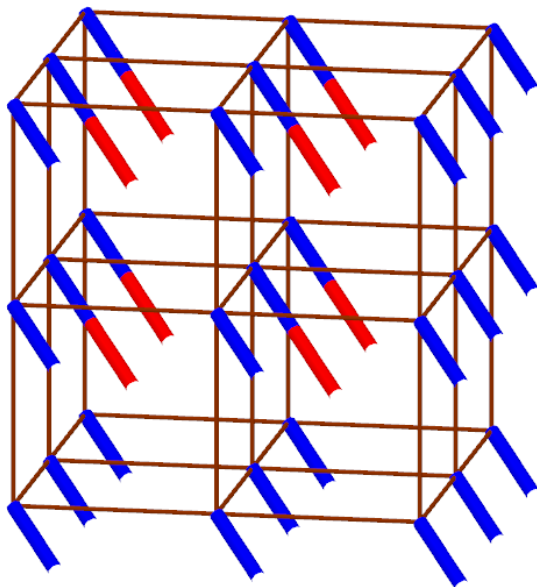
Следовательно, представление расширенной элементарной ячейки ОЦК в виде организованных, одинаково ориентированных в пространстве связей позволяет описать объёмно-центрированную кубическую решётку. При этом данный способ эквивалентен представлению расширенной ячейки в виде плотной упаковки шаров.



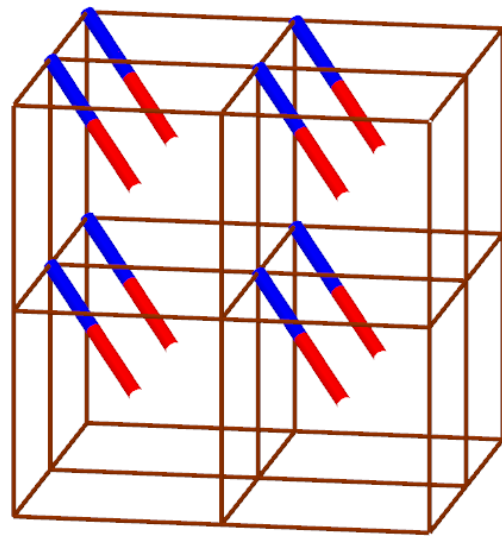
а)



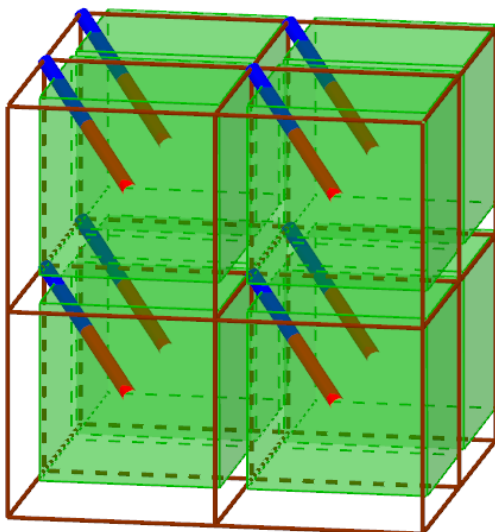
б)



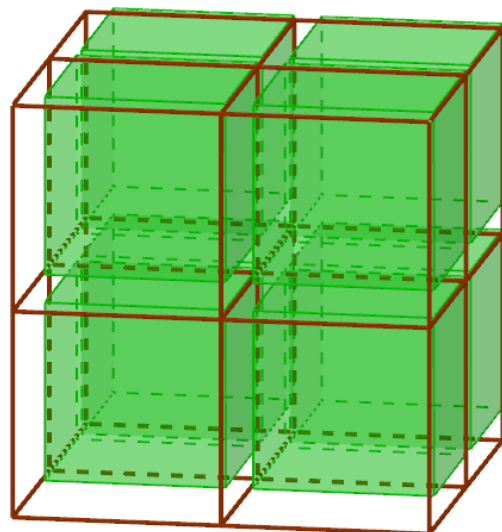
в)



г)



д)



е)

Рисунок 2.3 – Шаги построения модели Брэгга для объёмно-центрированной кубической решётки (структурный тип $CsCl$)

На следующем шаге уберём все фрагменты связей, расположенные за пределами рассматриваемой ячейки, а также все связи, которые дублируют друг друга и могут быть восстановлены трансляцией ячейки (рис. 2.3 г).

На пятом шаге впишем оставшиеся четыре связи в кубы. Для этого возьмём примитивную элементарную ячейку, содержащую только одну связь (рис. 2.4 а). Затем впишем связь в куб так, чтобы она соединяла центры противоположных граней (рис. 2.4 б).

Повернём получившийся куб на -35° вокруг оси Rot_1 , параллельной проекции главной диагонали примитивной ячейки на плоскость основания и проходящей через центр ячейки. В результате получим куб, основания которого параллельны основаниям ячейки (рис. 2.4 б, в).

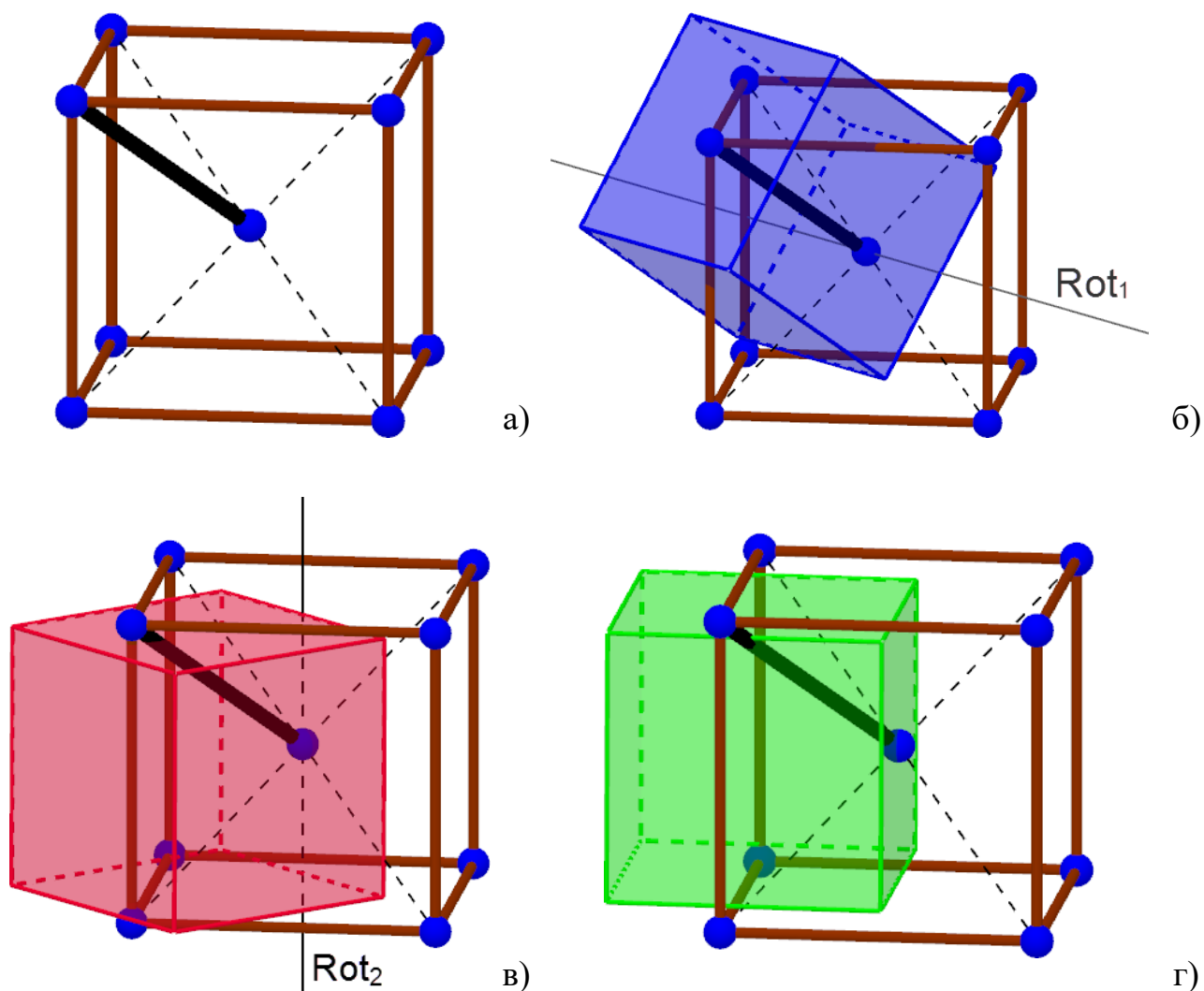


Рисунок 2.4 – Шаги формирования куба Брэгга для объёмно-центрированной кубической решётки

Повернём получившийся куб на 45° вокруг оси Rot_2 , перпендикулярной плоскости основания элементарной ячейки и проходящей через её центр. Получим куб, ориентированный в пространстве также, как примитивная ячейка (рис. 2.4 в, г). Полученный куб и будет являться кубом Брэгга, соответствующим рассматриваемой связи.

Впишем все связи расширенной элементарной ячейки объёмно-центрированной кубической решётки в кубы данного типа (рис. 2.3 д, 2.5 а, б).

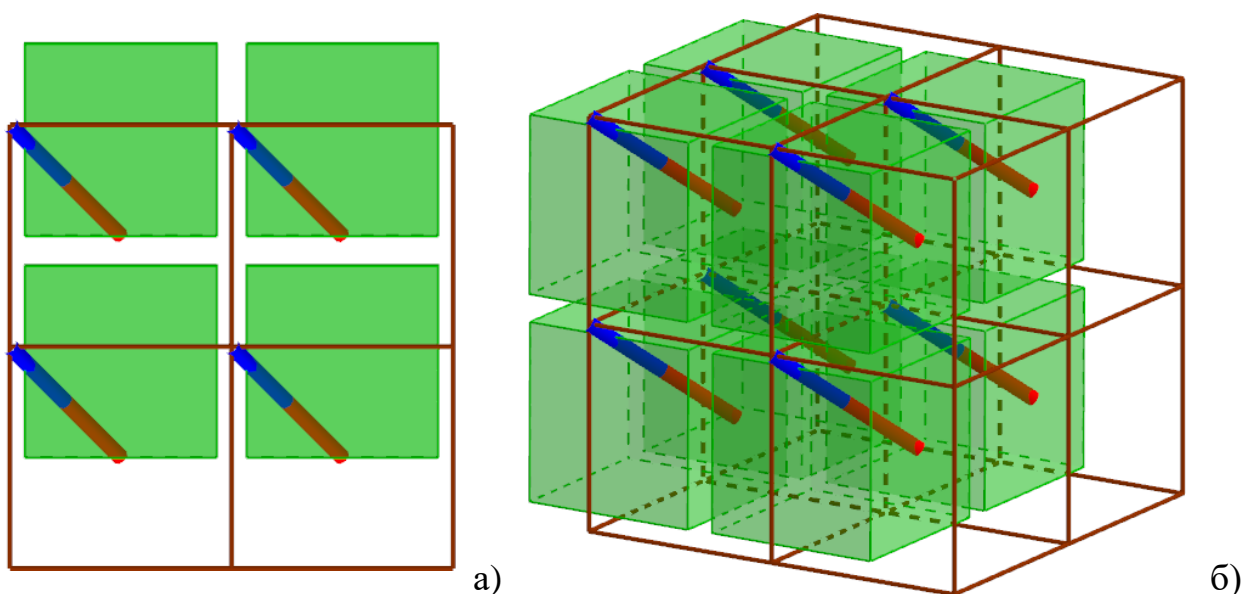


Рисунок 2.5 – Расширенная элементарная ячейка ОЦК. Представление с помощью связей и кубов Брэгга: а) вид сверху; б) вид под углом

На последнем, шестом шаге остаётся перейти от рассмотрения структуры ячейки, представленной связями, к структуре ячейки, представленной кубами (рис. 2.3 е). Полученная расширенная кубическая ячейка, содержащая восемь заполненных куба, и есть модель укладки кубов Брэгга для решётки $CsCl$.

2.1.3 Брэгговский аналог ГЦК

Рассмотрим технологию построения брэгговского аналога элементарной ячейки гранецентрированной кубической решётки на примере соединения Si (рис. 2.6). Для удобства дальнейшего рассмотрения перейдём от классической элементарной ячейки ГЦК (см. рис. 1.6) к её расширенной версии (рис. 2.6 а).

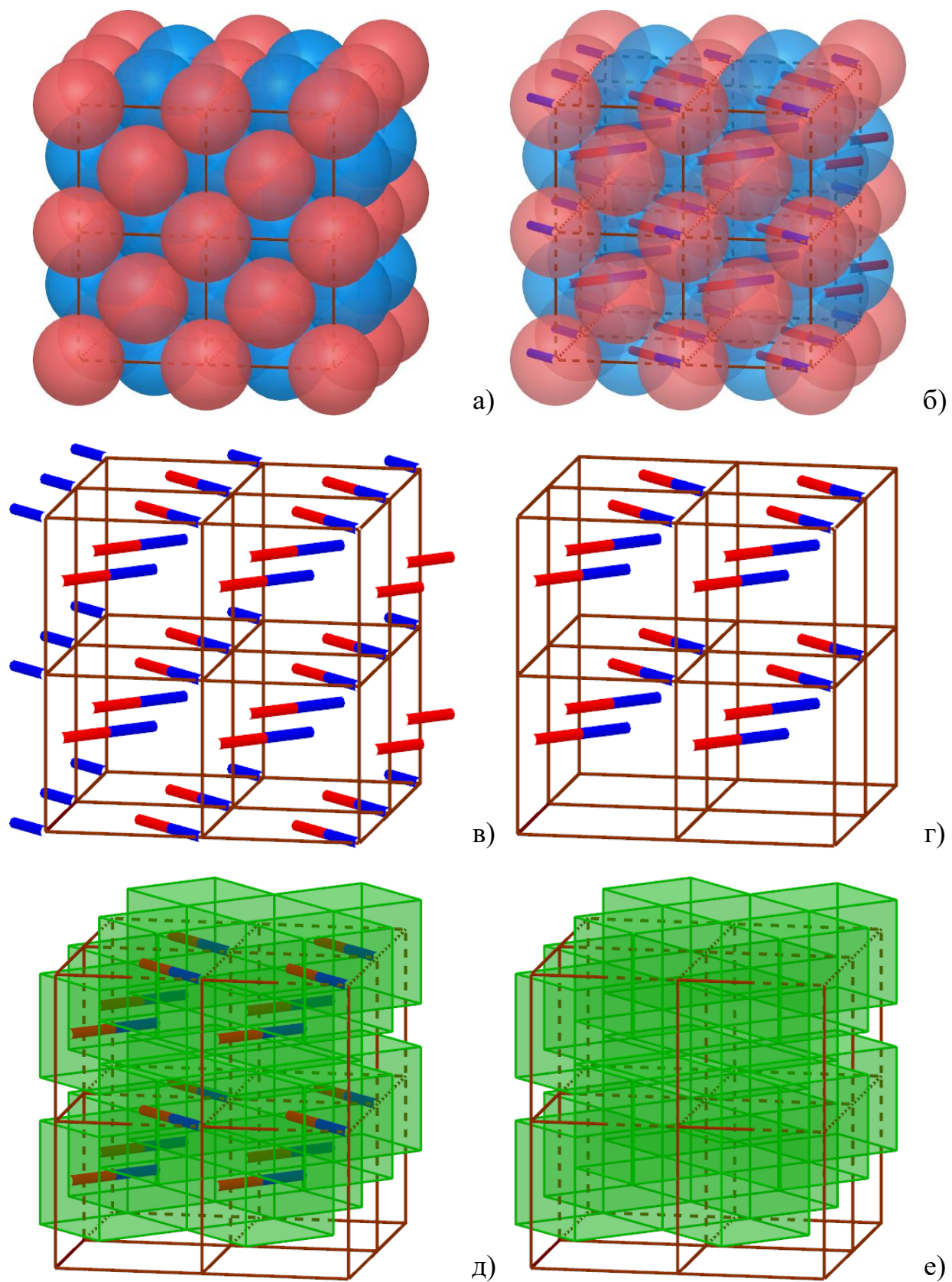


Рисунок 2.6 – Шаги построения модели Брэгга для гранецентрированной кубической решётки (структурный тип Cu)

На следующем шаге отметим геометрическое расположение связей между частицами (рис. 2.6 б). Предположим, что каждая классическая элементарная ячейка ГЦК содержит две связи. Одна из них образована частицами, находящимися в центрах соседних вертикальных граней. Другая – частицами, расположенными в центре и вершине верхнего основания ячейки (рис. 2.7 а). Тогда каждой сфере будет соответствовать ровно половина связи, направленная соответственно расположению частицы в классической элементарной ячейке.

На третьем шаге уберём сферы и оставим только связи (рис. 2.6 в). Получившийся чертёж позволяет сделать следующие наблюдения: 1) все фрагменты связей, находящиеся внутри расширенной элементарной ячейки, соединились друг с другом, образовав полные связи; 2) существуют фрагменты связей, расположенные за пределами расширенной ячейки; 3) фрагменты связей, выходящие за пределы ячейки идеально соответствуют фрагментам, образовавшим полные связи.

Следовательно, представление расширенной элементарной ячейки ГЦК в виде организованных, одинаково ориентированных в пространстве связей позволяет описать гранецентрированную кубическую решётку. При этом данный способ эквивалентен представлению расширенной ячейки в виде плотной упаковки шаров.

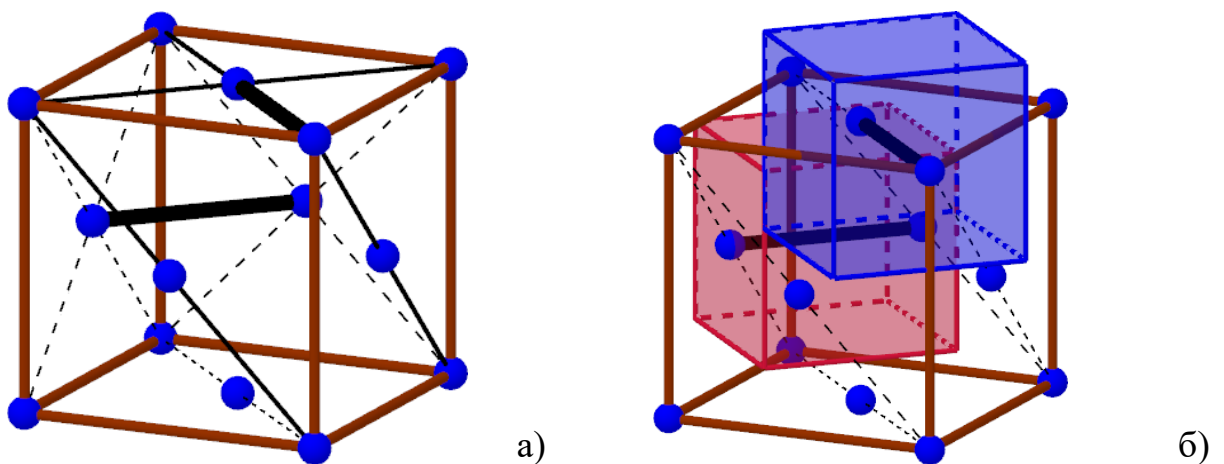


Рисунок 2.7 – Шаги формирования кубов Брэгга для гранецентрированной кубической решётки

На следующем шаге уберём все фрагменты связей, расположенные за пределами рассматриваемой ячейки, а также все связи, которые дублируют друг друга и могут быть восстановлены трансляцией ячейки (рис. 2.6 г).

На пятом шаге впишем оставшиеся связи в кубы. Для этого возьмём примитивную элементарную ячейку, содержащую две связи (рис. 2.7 а). Затем впишем каждую связь в отдельный куб так, чтобы она соединяла центры противоположных граней, а основания новых кубов были параллельны основаниям самой элементарной ячейки (см. рис. 1.7 б). Полученные кубы и будут являться кубами Брэгга, соответствующими рассматриваемым связям.

Впишем все связи расширенной элементарной ячейки ГЦК в кубы данных типов (рис. 2.6 д, 2.8, 2.9). При этом кубы Брэгга расположатся X-образными звеньями по четыре, смещёнными друг относительно друга по вертикали и горизонтали так, что куб одного звена оказывается в промежутке между кубами соседнего звена.

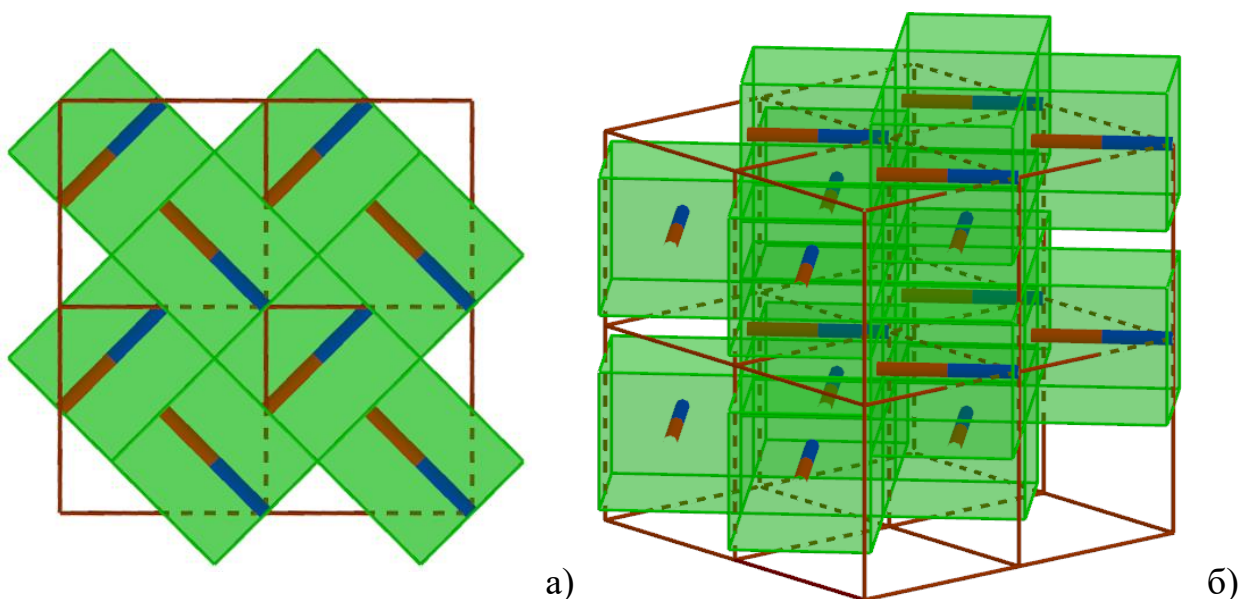


Рисунок 2.8 – Расширенная элементарная ячейка ГЦК. Представление с помощью связей и кубов Брэгга: а) вид сверху; б) вид под углом

На последнем, шестом шаге остаётся перейти от рассмотрения структуры ячейки, представленной связями, к структуре ячейки, представленной кубами (рис. 2.6 е). Полученная расширенная кубическая ячейка, содержащая шестнадцать заполненных кубов, и есть модель укладки кубов Брэгга для решётки типа *Cи*.

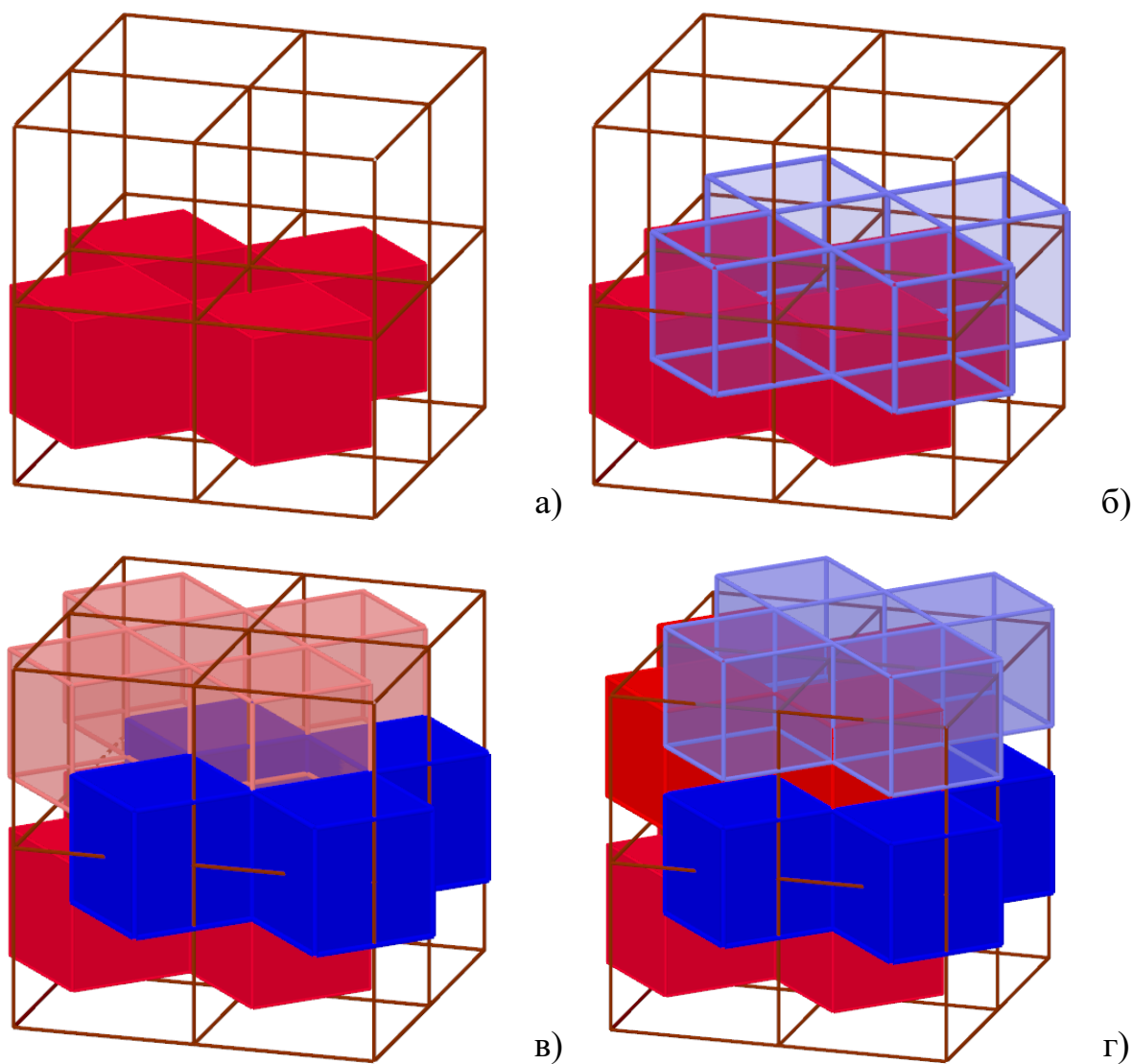


Рисунок 2.9 – Послойное заполнение расширенной элементарной ячейки ГЦК кубами Брэгга

Как отмечалось ранее, гранецентрированная кубическая решётка может быть описана эквивалентной кубической и альтернативной гексагональной элементарными ячейками (см. рис. 1.7, 1.8).

Их тоже можно описать с помощью кубов Брэгга. Для этого рассмотрим расширенную эквивалентную ячейку ГЦК (рис. 2.10 а). Построим вписанную в неё альтернативную гексагональную элементарную ячейку (рис. 2.10 б) и удалим все частицы, не принадлежащие пространству шестиугольной призмы (рис. 2.10 в). Очевидно, что получившаяся призма идеально стыкуется основаниями с такими же призмами. Поэтому, из всех частиц, принадлежащих альтернативной гексагональной ячейке ГЦК, для дальнейшего рассмотрения можно исключить частицы, расположенные в нижнем основании (рис. 2.10 г).

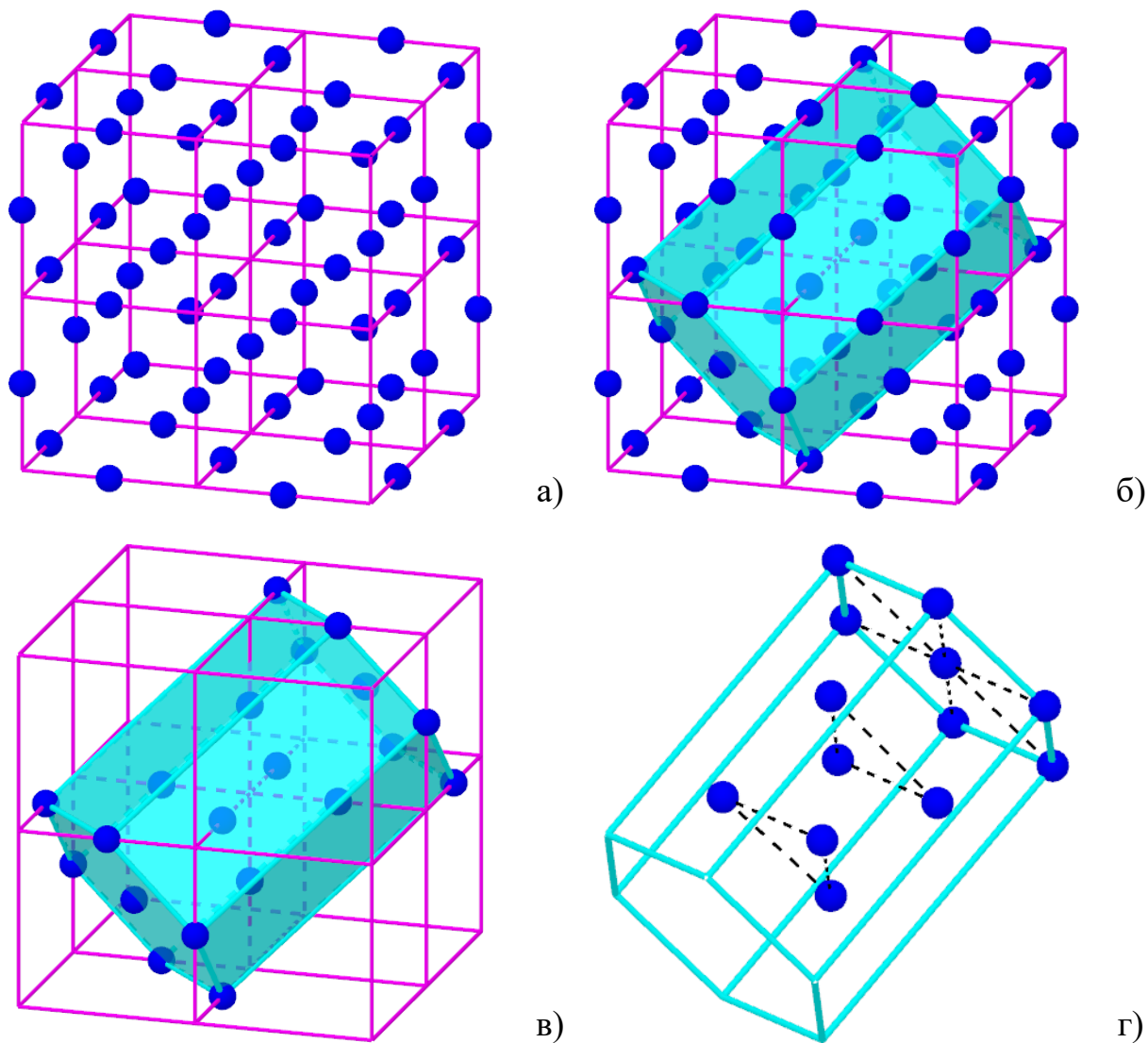


Рисунок 2.10 – Шаги выделения альтернативной гексагональной элементарной ячейки гранецентрированной кубической решётки (структурный тип Cu)

Тогда, чтобы описать гексагональную элементарную ячейку ГЦК с помощью кубов Брэгга, остаётся выделить в ней связи частиц и соответствующие им кубы. Для этого можно использовать модель эквивалентной кубической элементарной ячейки ГЦК (рис. 2.11).

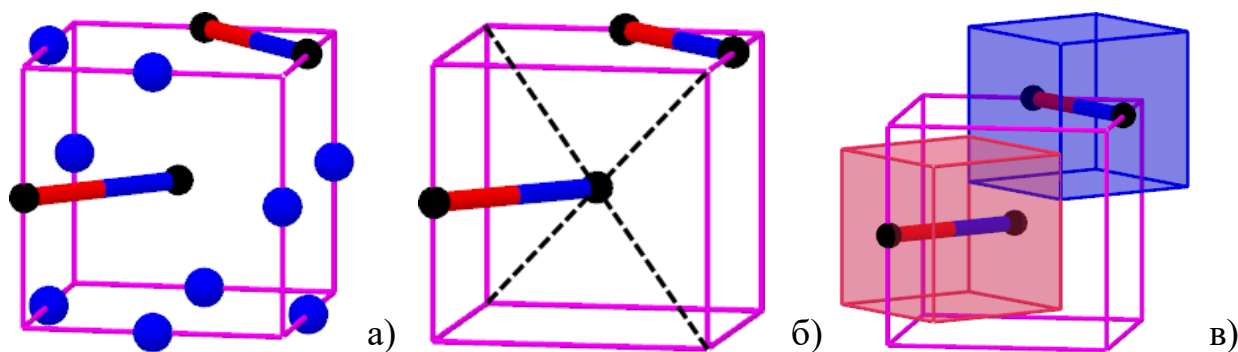


Рисунок 2.11 – Шаги формирования кубов Брэгга для эквивалентной кубической элементарной ячейки ГЦК

Однако такой подход предполагает переход от модели плотной шаровой упаковки, к модели связей между частицами, а затем к модели кубов Брэгга. При этом элементы данных моделей различны и обладают разными свойствами. В частности, модель плотной шаровой упаковки оперирует одинаковыми сферами (различаться может только относительное расположение соседних слоёв), модель связей оперирует парами частиц, различающимися ориентацией связи в пространстве, модель плотной кубической упаковки оперирует неперекрывающимися кубами, имеющими различное положение в пространстве по отношению к соответствующим им связям.

Это означает, что различные эквивалентные друг другу модели могут иметь разные свойства. К примеру, существует более одного способа выделения альтернативной гексагональной ячейки на основе эквивалентной кубической ячейки ГЦК. При этом будет меняться только расположение призмы относительно взятой за основу кубической ячейки, но не её состав, так как все сферы в плотной шаровой упаковке одинаковы. Но модель связей предполагает уже наличие нескольких типов элементов – двух в случае гранецентрированной кубической решётки (см. рис. 2.11). Значит для выделения гексагональной элементарной ячейки в модели связей действуют более жёсткие ограничения. Следовательно, необходимо проверить соответствие альтернативной гексагональной ячейки ГЦК ограничениям модели связей.

Для этого рассмотрим соотношение эквивалентной кубической и альтернативной гексагональной ячеек ГЦК на более крупном кристалле. С учётом свойств симметрии гексагональных сеток и призм был построен фрагмент решётки, образованный семью призмами. В сердцевине цветка разместим выделенную ранее альтернативную гексагональную ячейку. Затем, для удобства восприятия и дальнейшего анализа, скроем границы всех кубических ячеек и связи между частицами, не принадлежащими оставшимся призмам (рис. 2.12).

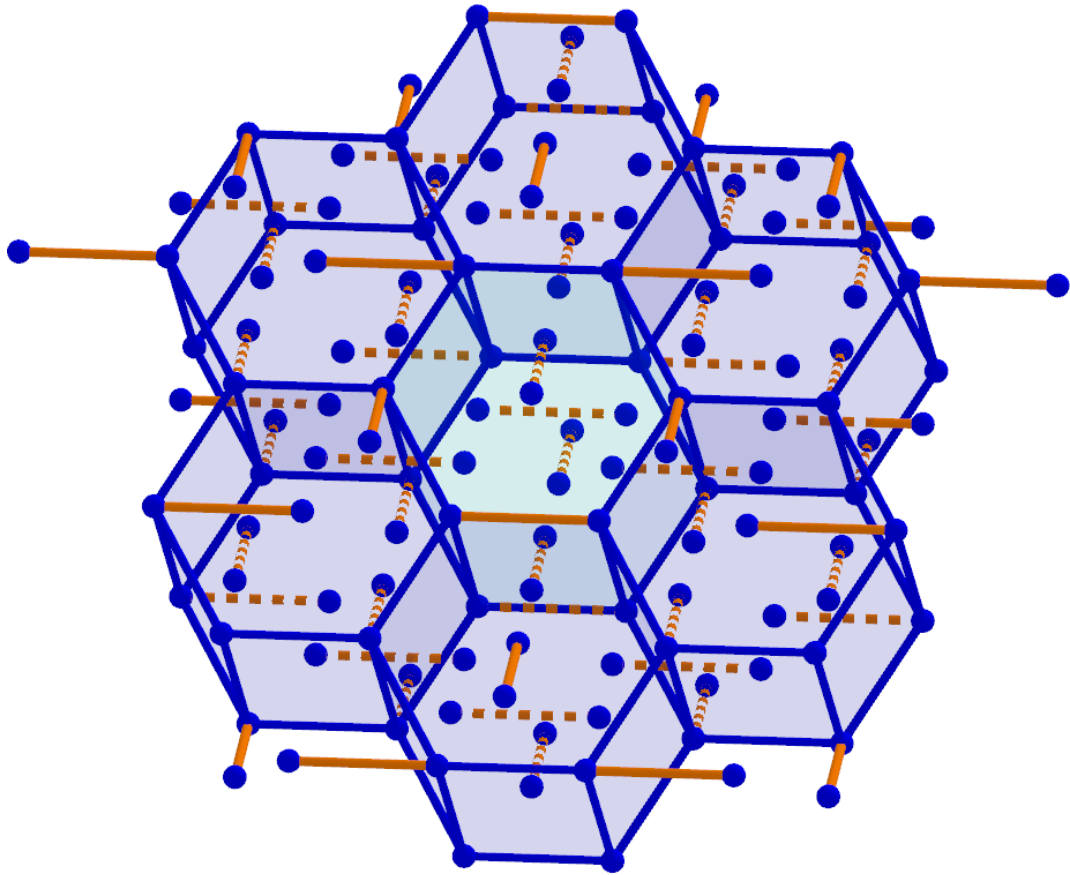


Рисунок 2.12 – Фрагмент гранецентрированной кубической решётки, образованный семью альтернативными гексагональными ячейками

Рассмотрим отдельно частицы и связи между ними, принадлежащие верхним основаниями призм (см. рис. 2.13). Здесь и далее на двумерных чертежах при послойном рассмотрении моделей горизонтальные отрезки соответствуют связям между частицами одного и того же слоя. А вертикальные – связям между частицами соседних слоёв. При этом пунктиром отмечены связи между частицами текущего слоя и слоя соседнего снизу, сплошными линиями – связи между частицами текущего слоя и слоя соседнего сверху.

Анализ одного только верхнего слоя частиц и связей очевидно показывает, что при переходе от модели отдельных частиц к модели связей, в построении пространственной решётки участвуют четыре разных типа гексагональных призм. В призме каждого типа связи расположены уникальным образом. Значит выделенная ранее альтернативная гексагональная элементарная ячейка ГЦК, теряет свои свойства уже при переходе к модели связей и потому не может быть основой для формирования модели Брэгга.

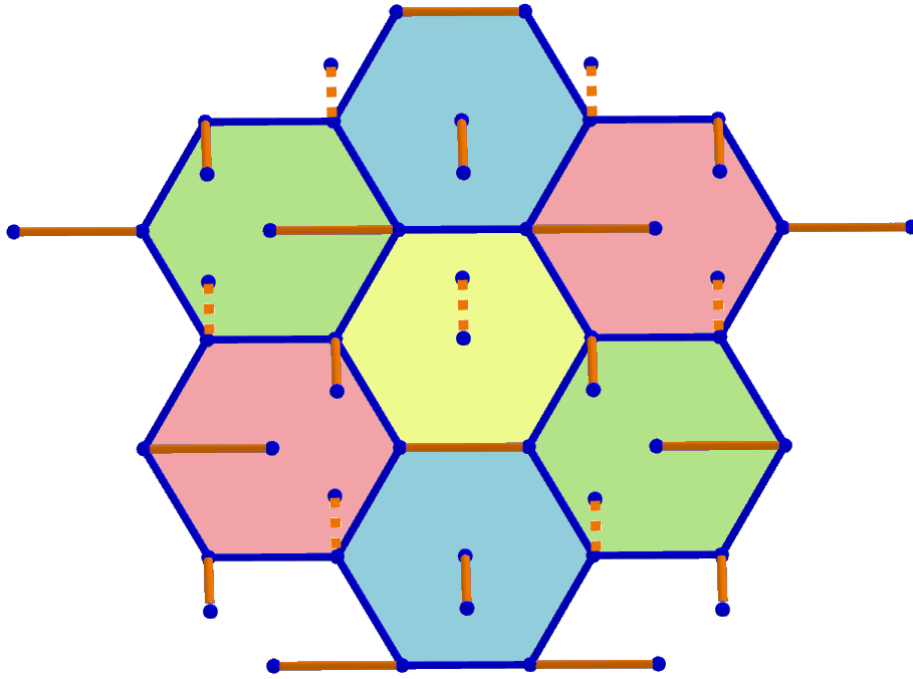


Рисунок 2.13 – Частицы и связи верхнего слоя фрагмента ГЦК и однотипные призмы по способу расположения связей

Однако можно выделить гексагональную ячейку, охватывающую несколько рассматриваемых призм (рис. 2.14). Послойное рассмотрение фрагмента решётки ГЦК, очевидно показывает, что найденная расширенная гексагональная призма обладает свойствами элементарной ячейки (рис. 2.15, 2.16).

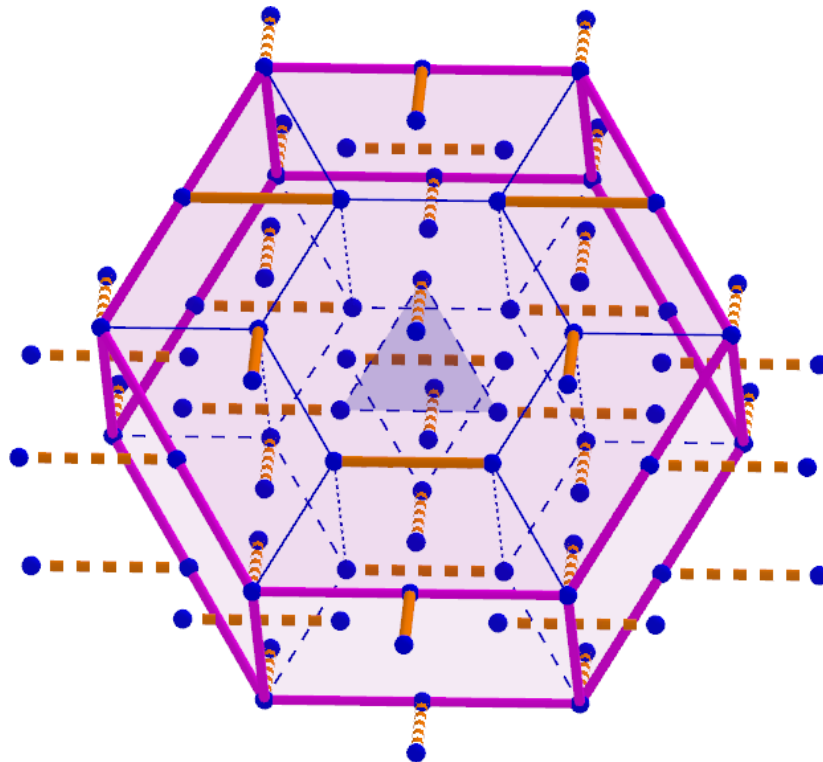
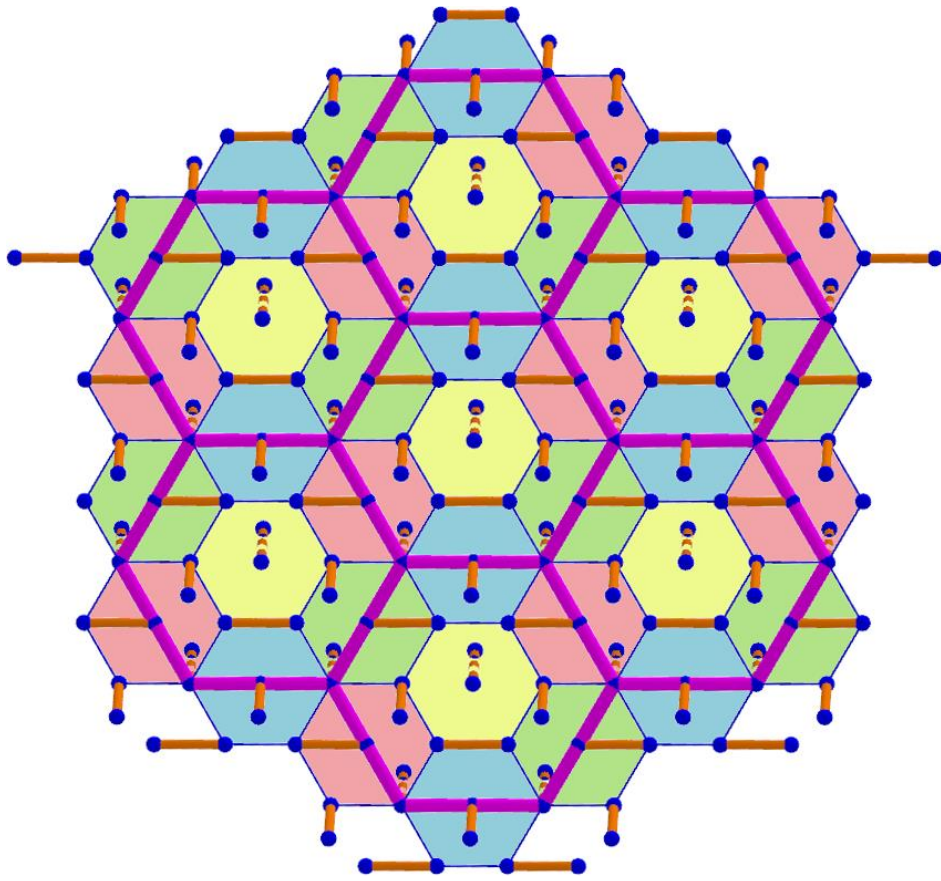
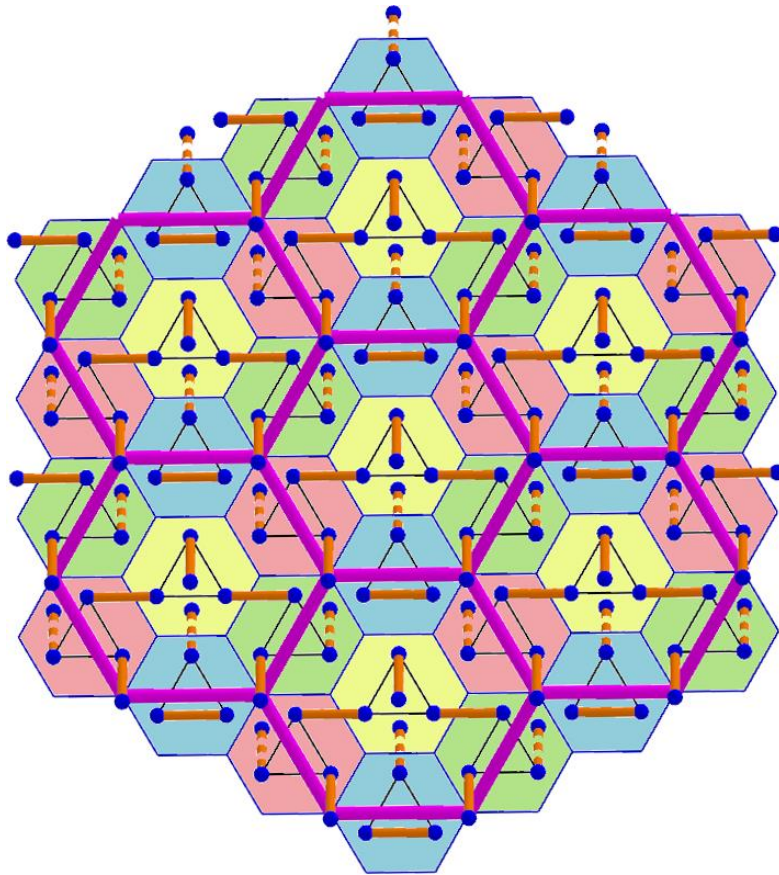


Рисунок 2.14 – Расширенная альтернативная гексагональная ячейка ГЦК



a)



б)

Рисунок 2.15 – Фрагмент решётки ГЦК, образованный семью расширенными альтернативными гексагональными ячейками: а) верхний слой частиц и связей; б) внутренний верхний слой

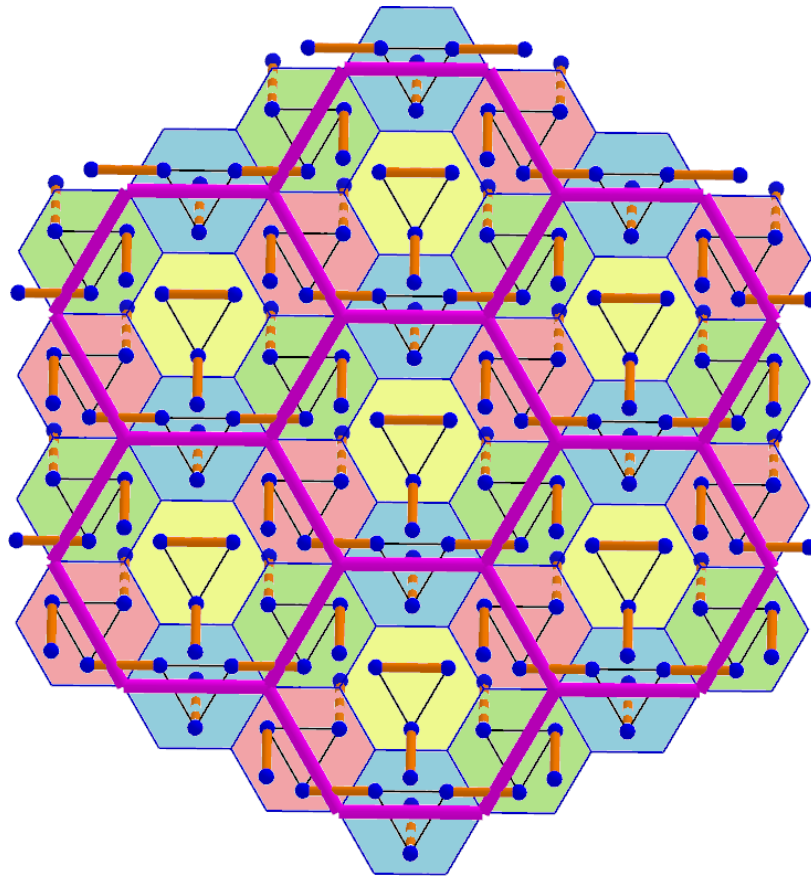


Рисунок 2.16 – Фрагмент решётки ГЦК, образованный семью расширенными альтернативными гексагональными ячейками. Внутренний нижний слой

Поскольку расширенная гексагональная ячейка получена на основе эквивалентной кубической элементарной ячейки ГЦК без внесения изменений в расположение частиц и связей, то расширенная ячейка должна полностью описываться кубами Брэгга. Для подтверждения этого необходимо произвести оптимизацию выделенной расширенной элементарной ячейки, перейти к модели Брэгга и выполнить послойное рассмотрение крупного фрагмента структуры, образуемого семью соприкасающимися расширенными ячейками.

После исключения симметричных связей, восстанавливаемых при трансляции призмы, расширенная гексагональная ячейка ГЦК примет вид, показанный на рис. 2.17 а-в и рис. 2.18 а. Соответствующий набор кубов Брэгга представлен на рис. 2.17 г-е и рис. 2.30 б-в.

Чтобы избежать дублирования на рис. 2.17, связи, образуемые частицами соседних слоёв отображены как элементы только верхнего в паре слоя. Например, связи верхнего слоя, направленные вверх, являются также связями

внутреннего нижнего слоя, направленными вниз. Соответственно, они отображены только как элементы внутреннего нижнего слоя. Синим цветом окрашены частицы верхнего (внешнего) слоя, розовым – нижнего (внутреннего).

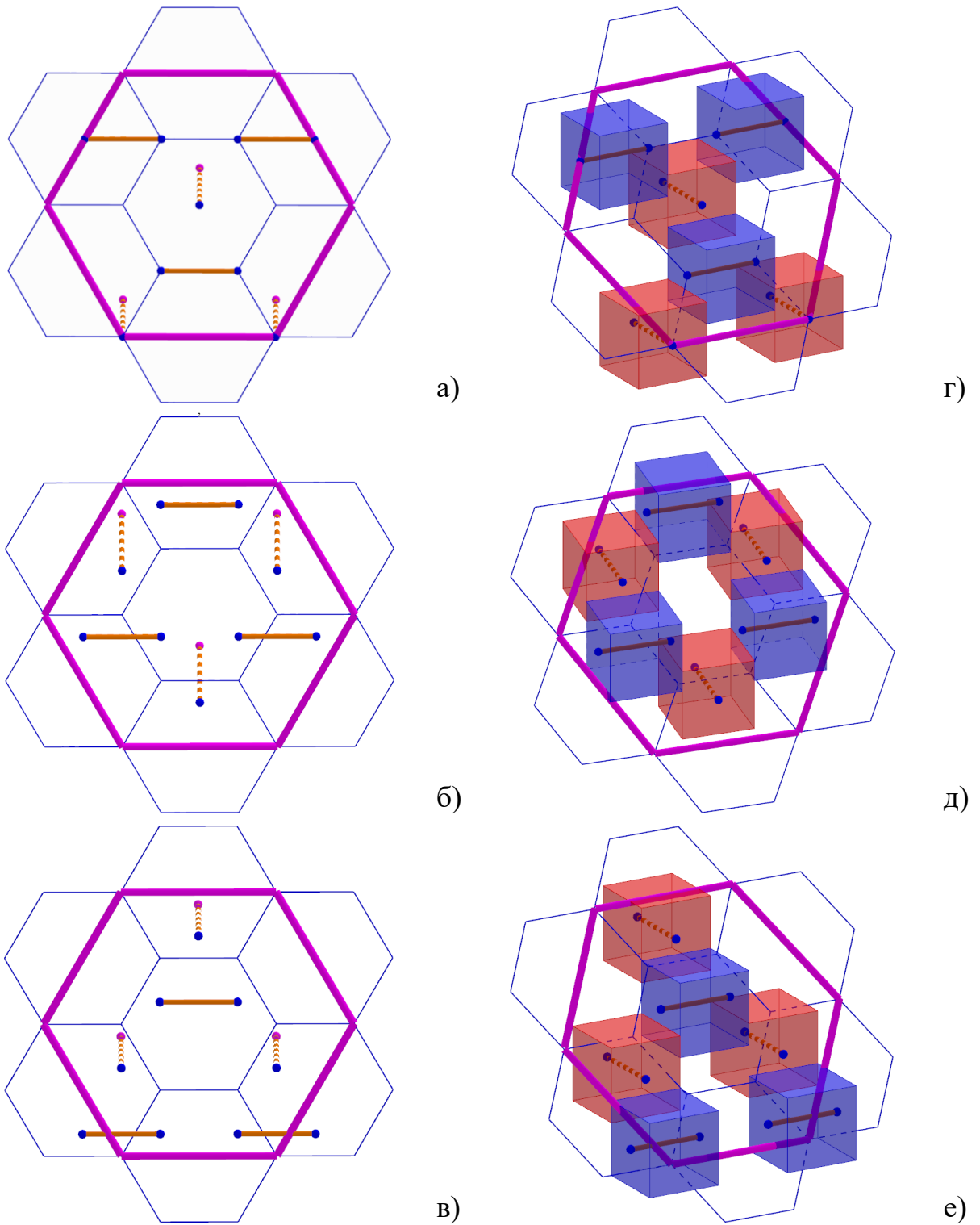


Рисунок 2.17 – Послойное рассмотрение оптимизированной расширенной альтернативной гексагональной элементарной ячейки ГЦК. Частицы и связи: а) внешнего верхнего слоя, б) внутреннего верхнего слоя, в) внутреннего нижнего слоя. Кубы Брэгга: г) внешнего верхнего слоя, д) внутреннего верхнего слоя, е) внутреннего нижнего слоя

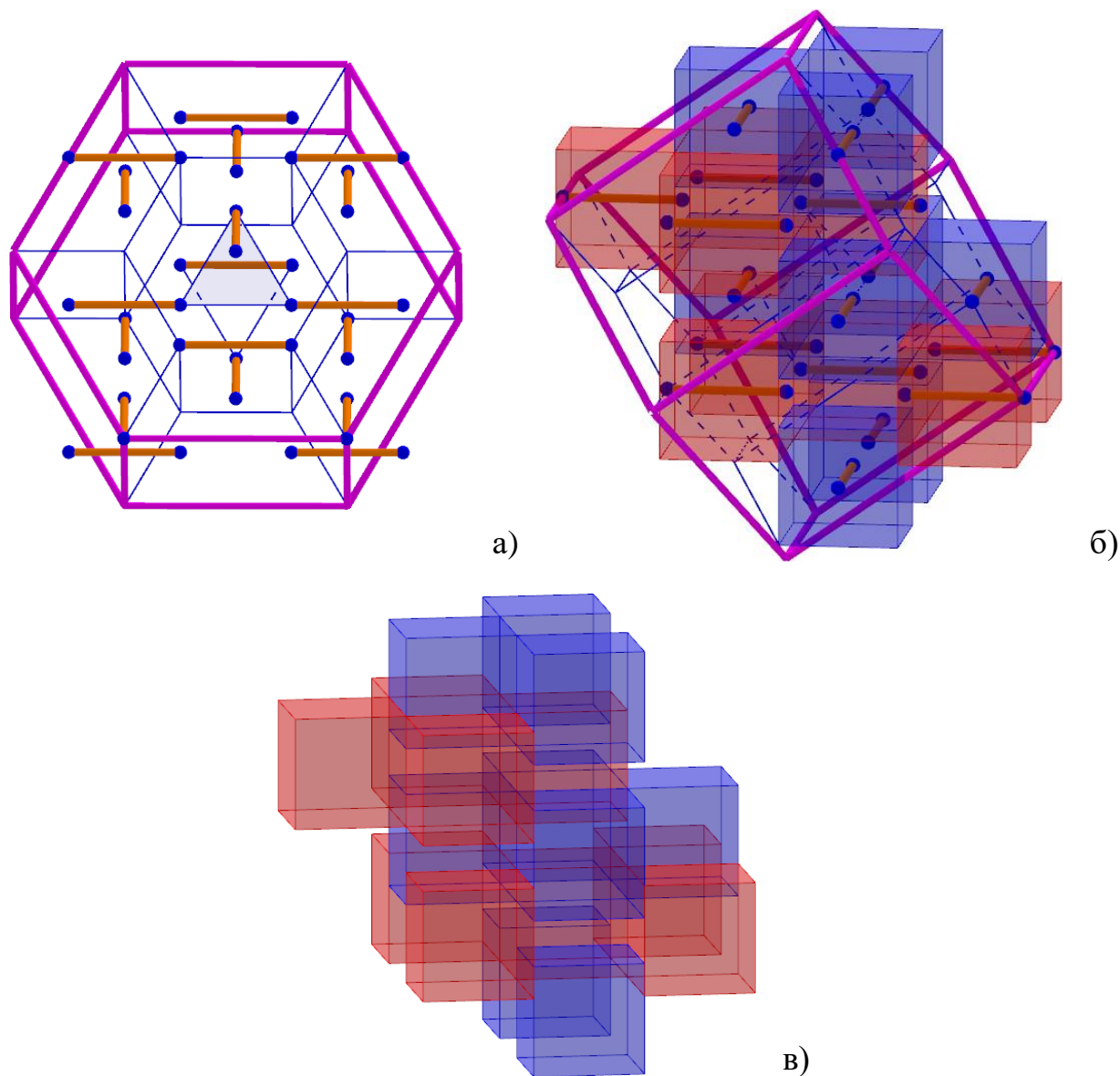
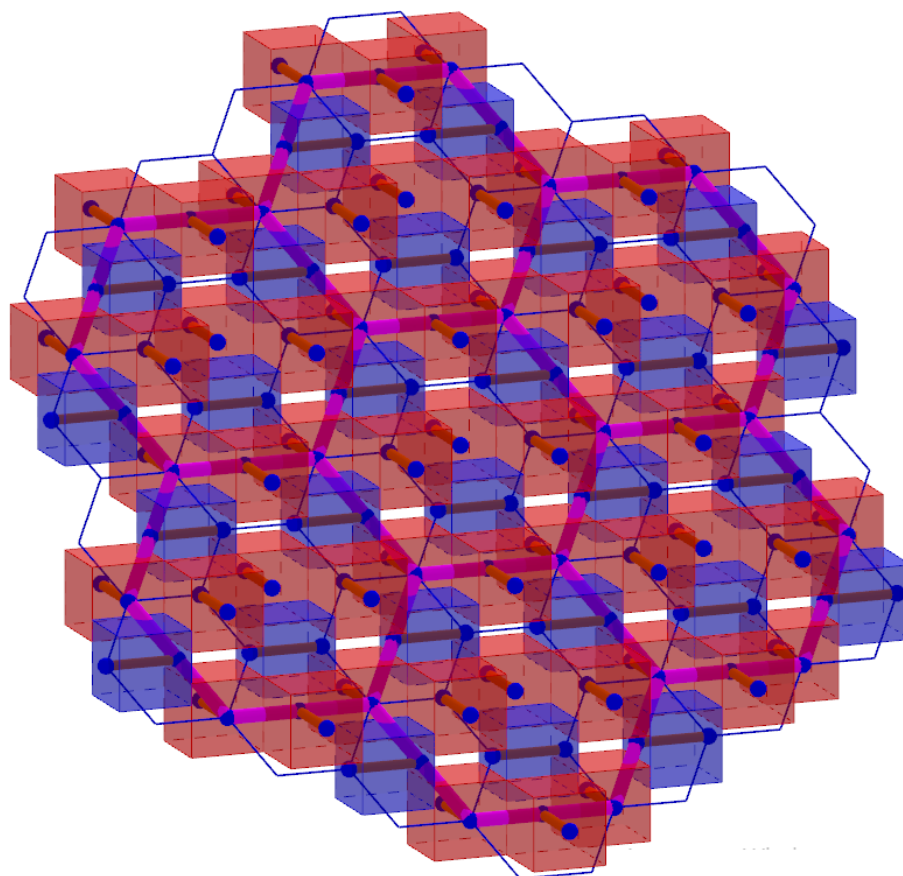
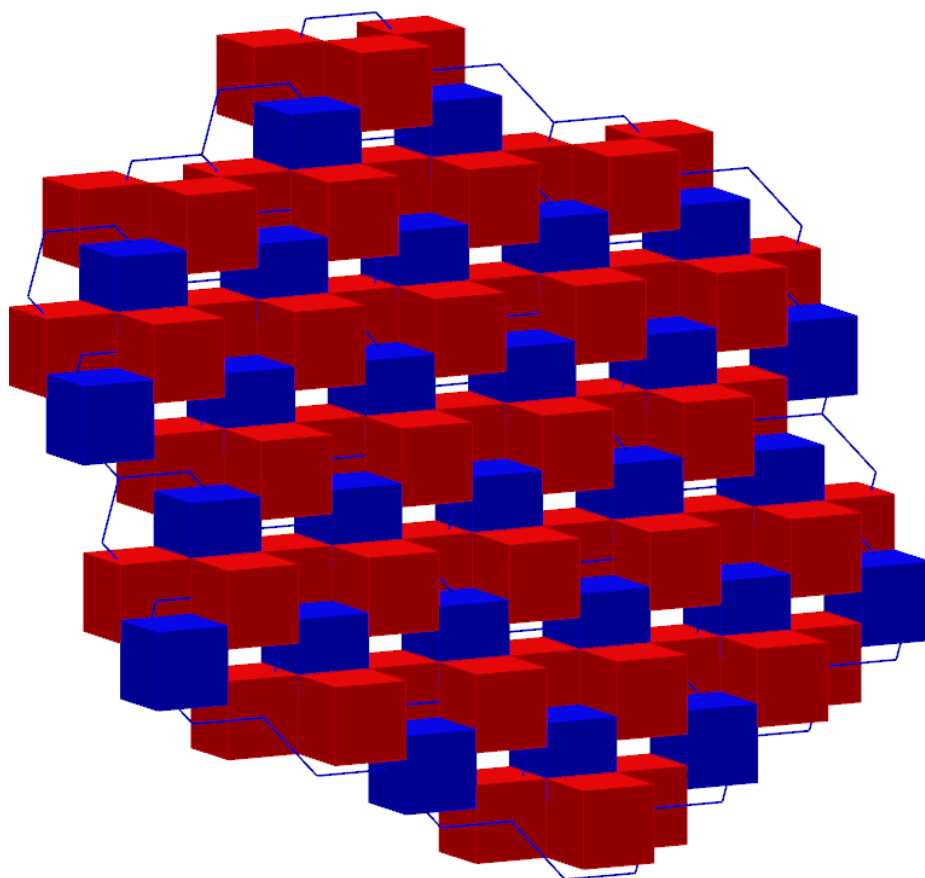


Рисунок 2.18 – Модели оптимизированной расширенной альтернативной гексагональной элементарной ячейки ГЦК: а) модель связей, б) совмещённые модели связей и Брэгга, в) модель Брэгга

Легко заметить, что полученная структура аналогична показанной на рис. 2.8–2.9. То есть кубы Брэгга в полученной конфигурации не перекрываются друг с другом (рис. 2.19–2.21). А значит полученная расширенная альтернативная гексагональная ячейка ГЦК действительно обладает свойствами элементарной ячейки для рассматриваемой решётки в модели связей и в модели Брэгга.

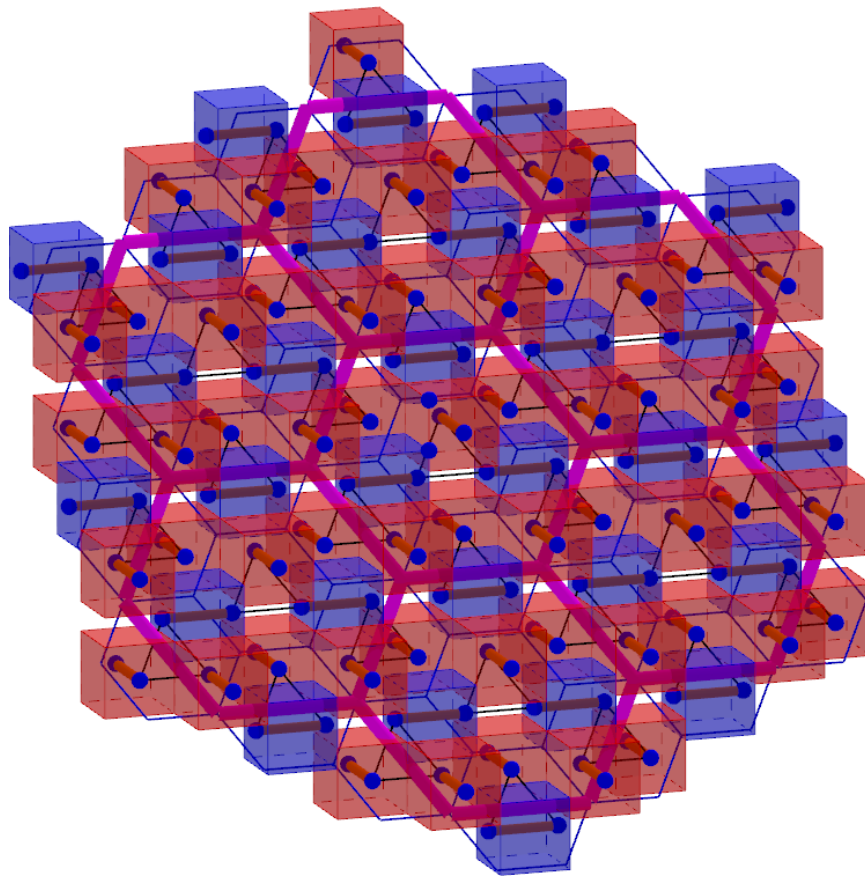


а)

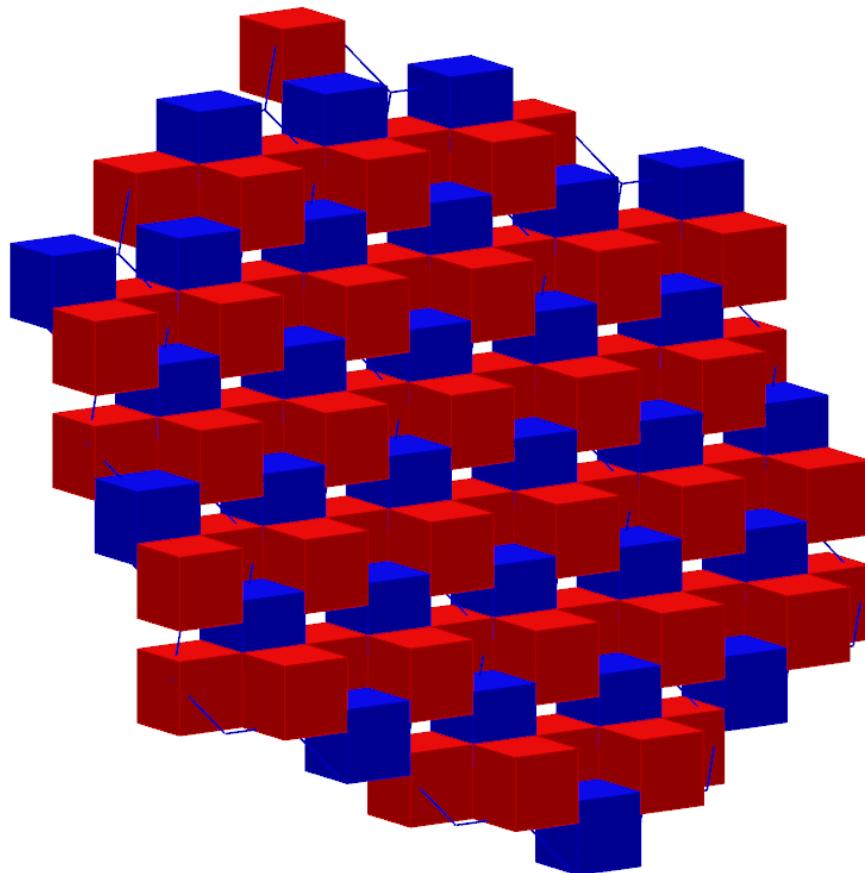


б)

Рисунок 2.19 – Послойное рассмотрение крупного фрагмента решётки ГЦК, образованного расширенной гексагональной ячейкой. Внешний верхний слой:
 а) совмещённые модели связей и кубов, б) модель кубов Брэгга

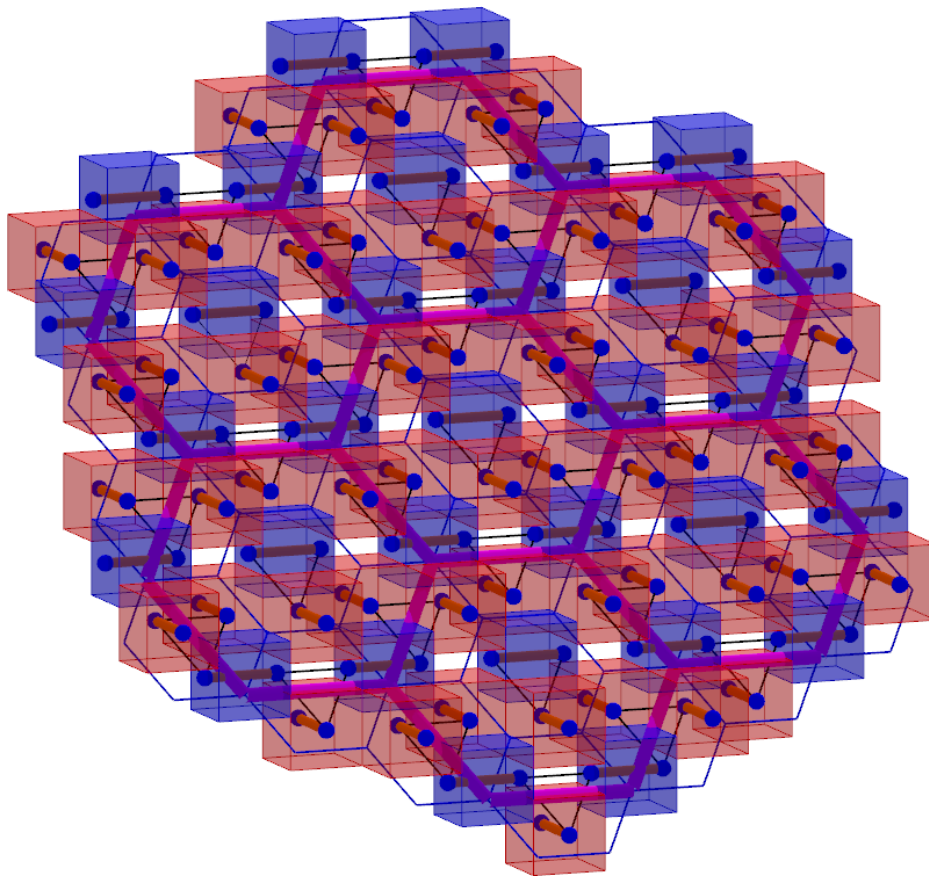


а)

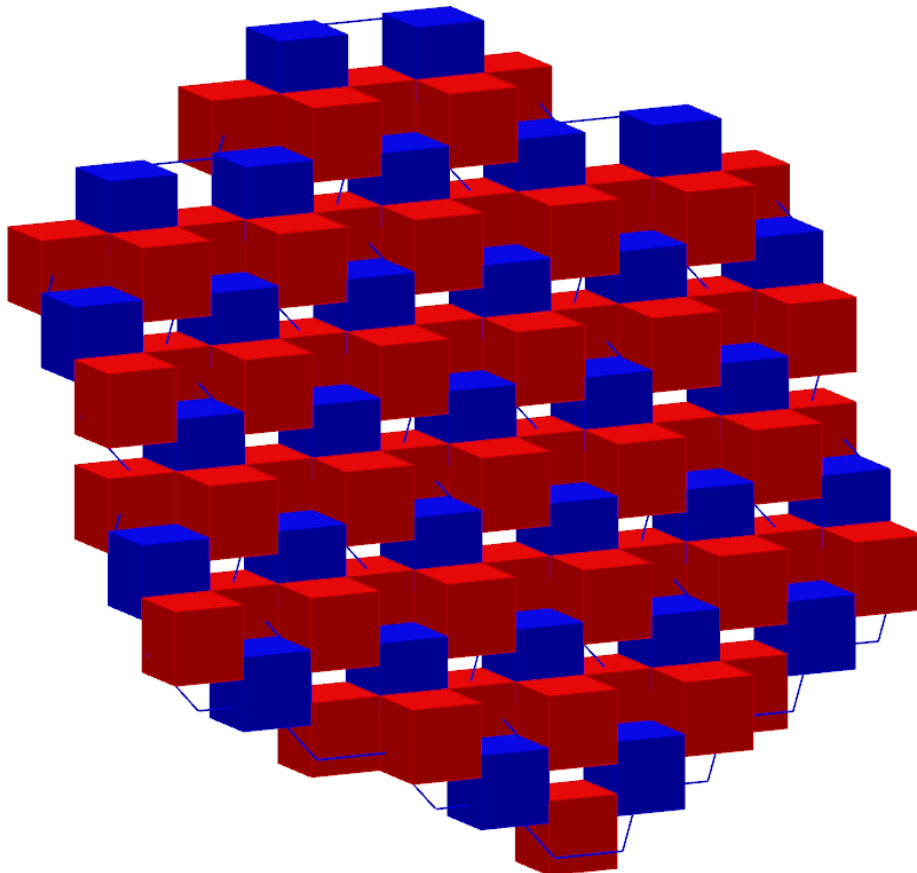


б)

Рисунок 2.20 – Послойное рассмотрение крупного фрагмента решётки ГЦК, образованного расширенной гексагональной ячейкой. Внутренний верхний слой: а) совмещённые модели связей и кубов, б) модель кубов Брэгга



а)



б)

Рисунок 2.21 – Послойное рассмотрение крупного фрагмента решётки ГЦК, образованного расширенной гексагональной ячейкой. Внутренний нижний слой:
 а) совмещённые модели связей и кубов, б) модель кубов Брэгга

2.1.4 Брэгговский аналог решётки типа магний

Учитывая родство гранецентрированной кубической и гексагональной плотноупакованной решёток, можно попытаться сформировать модель кубов Брэгга для ГПУ на основе моделей расширенной альтернативной элементарной ячейки ГЦК. Поскольку ГПУ представляет собой двухслойную плотную упаковку шаров в трёхмерном пространстве, а ГЦК – трёхслойную, то для получения искомых моделей гексагональной плотной упаковки нужно исключить из модели ГЦК один из внутренних слоёв. Также потребуется изменить связи между частицами в ячейке. В результате этих преобразований получается расширенная альтернативная гексагональная ячейка ГПУ (рис. 2.22–2.23).

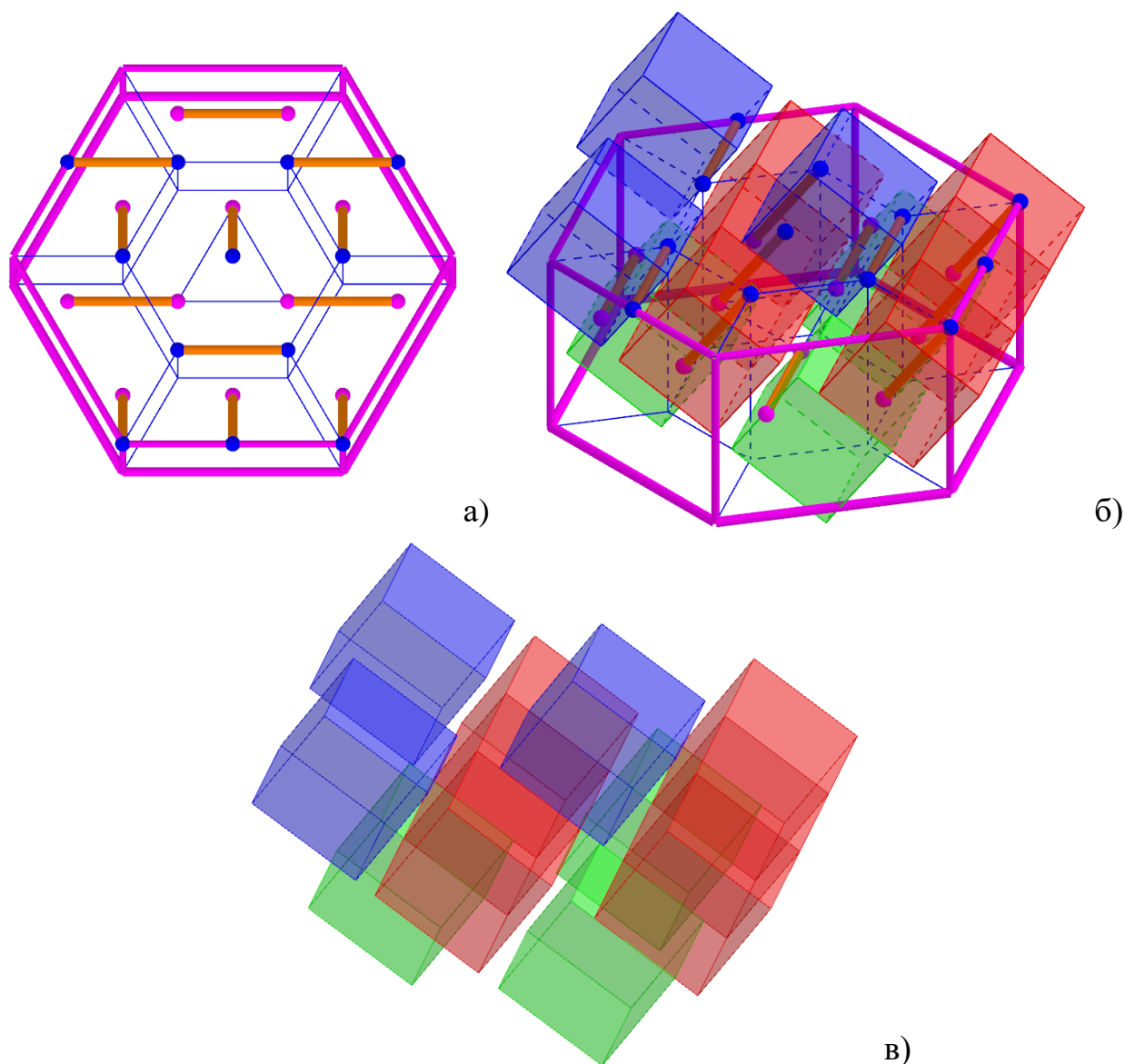


Рисунок 2.22 – Модели расширенной альтернативной гексагональной элементарной ячейки ГПУ: а) модель связей, б) совмещённые модели связей и Брэгга, в) модель Брэгга

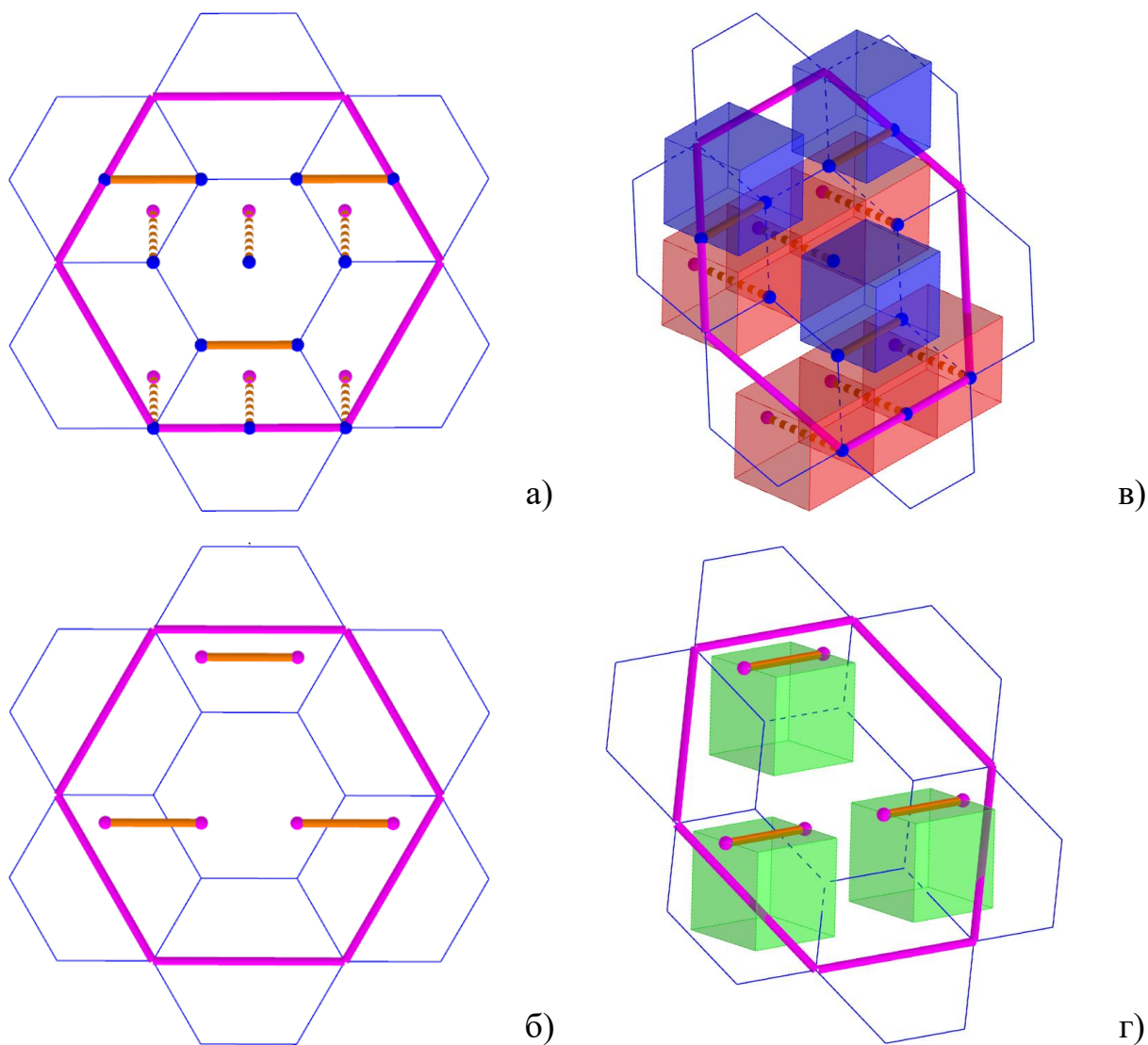
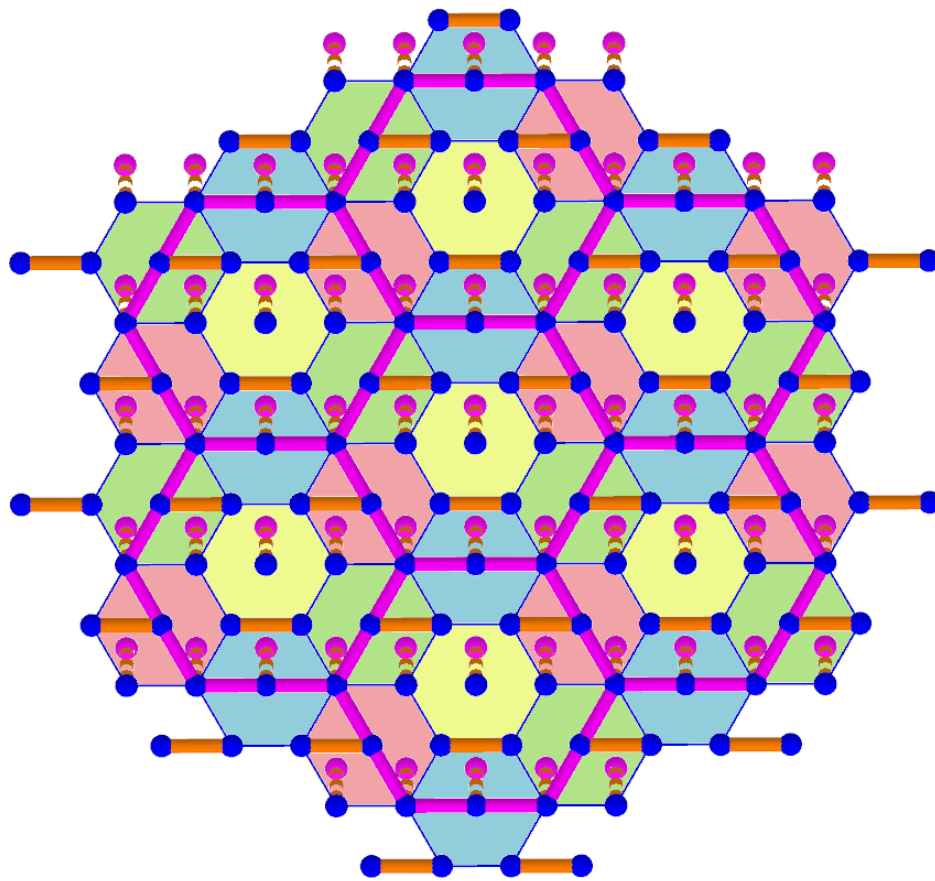


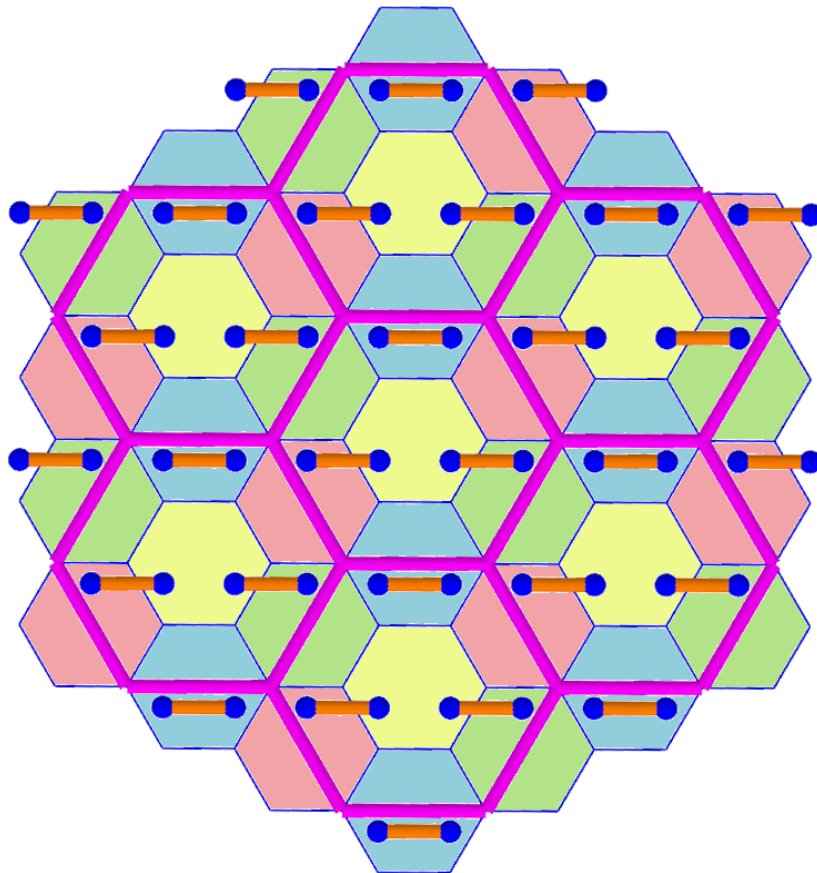
Рисунок 2.23 – Послойное рассмотрение расширенной альтернативной гексагональной элементарной ячейки ГПУ. Частицы и связи: а) верхнего (внешнего) слоя, б) нижнего (внутреннего) слоя. Кубы Брэгга: в) верхнего (внешнего) слоя, г) нижнего (внутреннего) слоя

Послойное рассмотрение фрагмента решётки ГПУ, образованного семью расширенными гексагональными элементарными ячейками, очевидно показывает, что найденная расширенная гексагональная ячейка обладает свойствами элементарной ячейки, по крайней мере для модели связей исследуемой структуры (рис. 2.24).

Легко заметить, что модель кубов Брэгга расширенной ячейки ГПУ отличается от структуры ГЦК (рис. 2.17–2.18, 2.22–2.23). Но кубы Брэгга в полученной конфигурации не перекрываются друг с другом в пределах слоёв. Что подтверждается послойным рассмотрением крупного фрагмента решётки (рис. 2.25, 2.26).

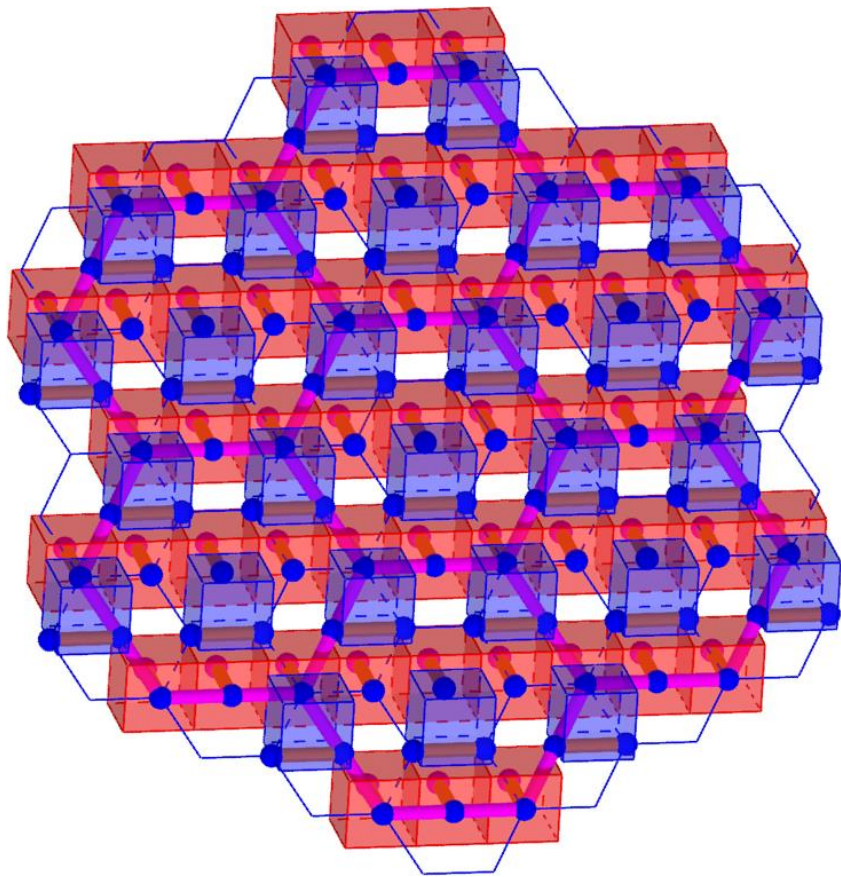


a)

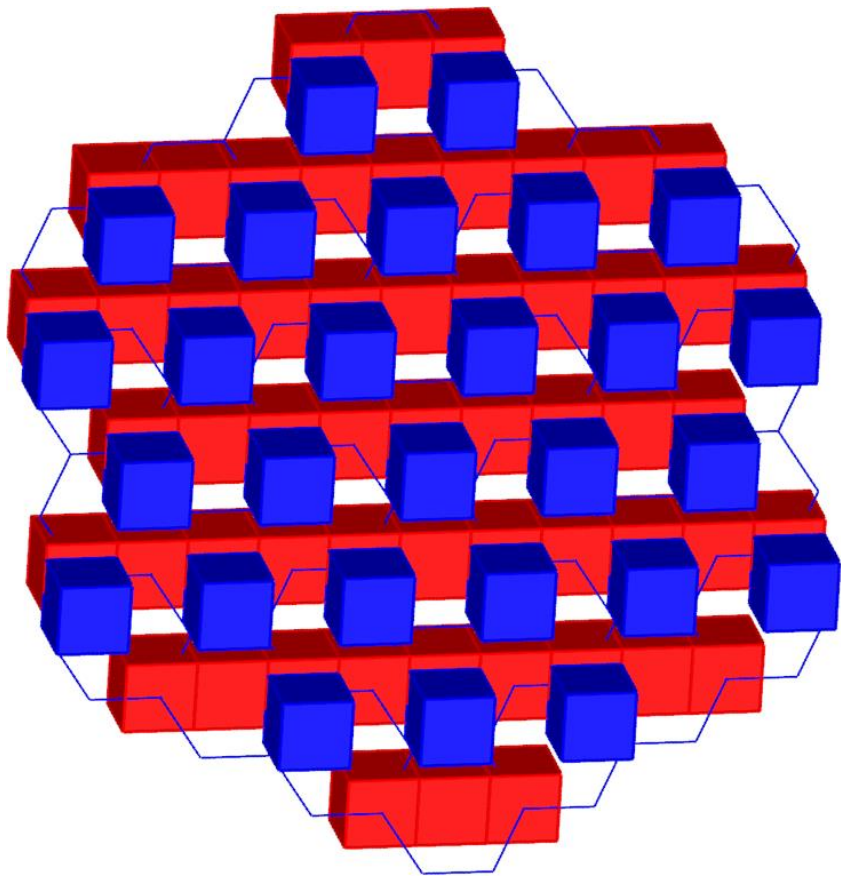


б)

Рисунок 2.24 – Фрагмент решётки ГПУ, образованный семью расширенными альтернативными гексагональными ячейками: а) верхний (внешний) слой частиц и связей; б) нижний (внутренний) слой

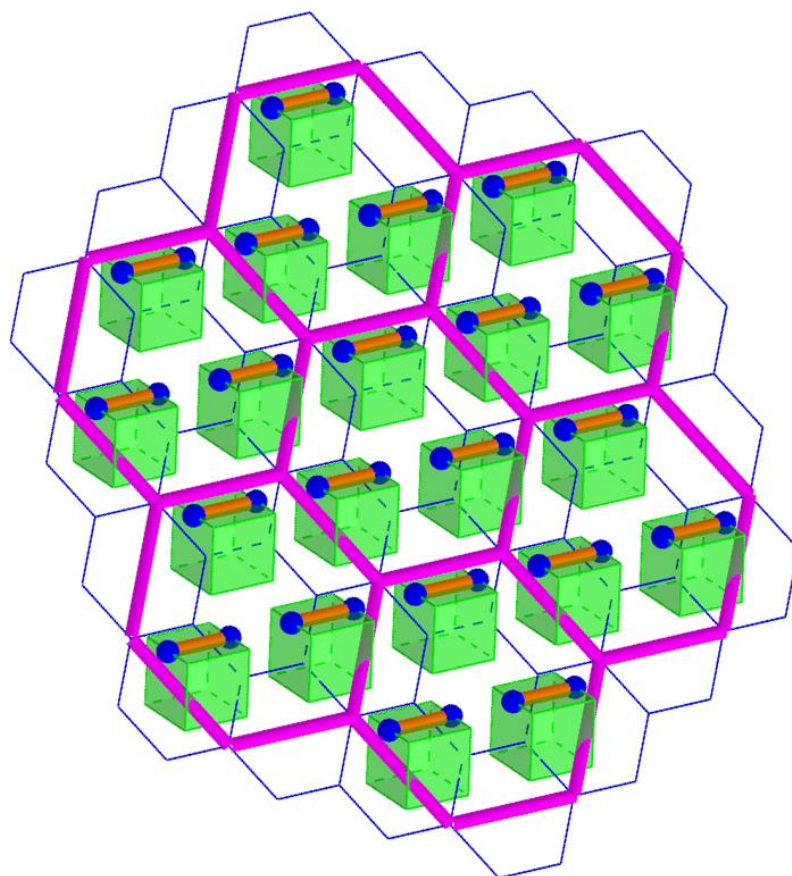


а)

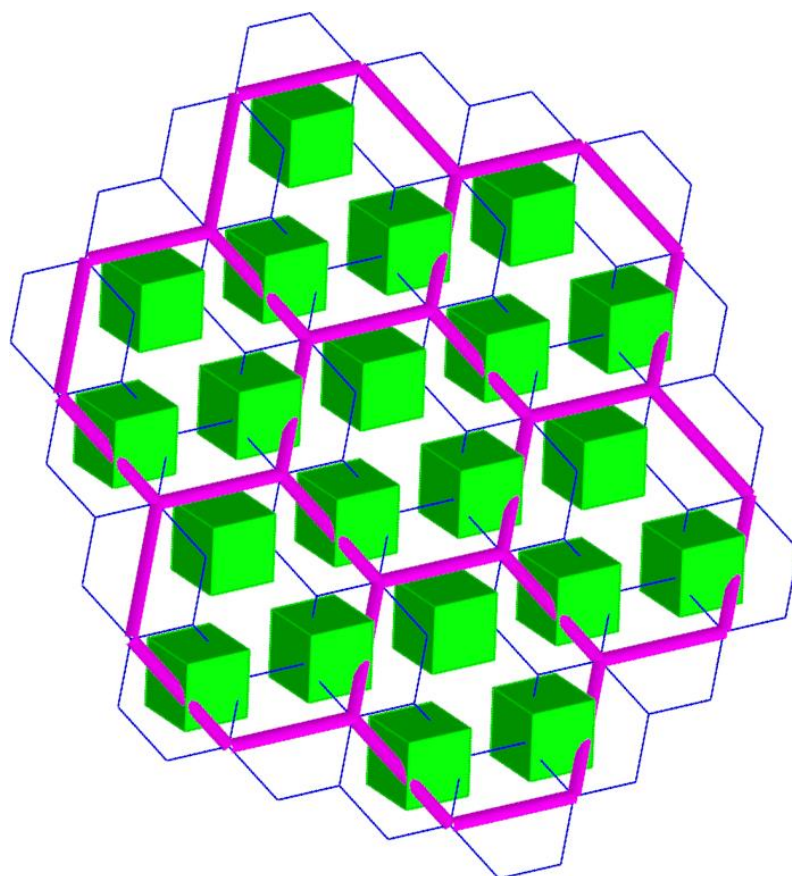


б)

Рисунок 2.25 – Послойное рассмотрение крупного фрагмента решётки ГЦК, образованного расширенной гексагональной ячейкой. Верхний (внешний) слой: а) совмещённые модели связей и кубов, б) модель кубов Брэгга



а)



б)

Рисунок 2.26 – Послойное рассмотрение крупного фрагмента решётки ГЦК, образованного расширенной гексагональной ячейкой. Нижний (внутренний) слой:
 а) совмещённые модели связей и кубов, б) модель кубов Брэгга

Очевидно, что в случае ГПУ кубы Брэгга, окрашенные зелёным и синим сдвинуты относительно связей (см. рис. 2.23 в-г). Однако это не вызывает их перекрывания. Рассматривая рис. 2.22 можно заметить, что расширенная элементарная ячейка ГПУ состоит из трёх продольных рядов кубов: левого, среднего и правого. При этом левый и правый ряды идентичны. Если построить ещё один слой кубов в плоскости нижнего основания призмы, то становится ясно, что в укладке кубов остаётся свободное пространство (рис. 2.27). На данном рисунке непрозрачные кубы — это кубы Брэгга достроенного слоя.

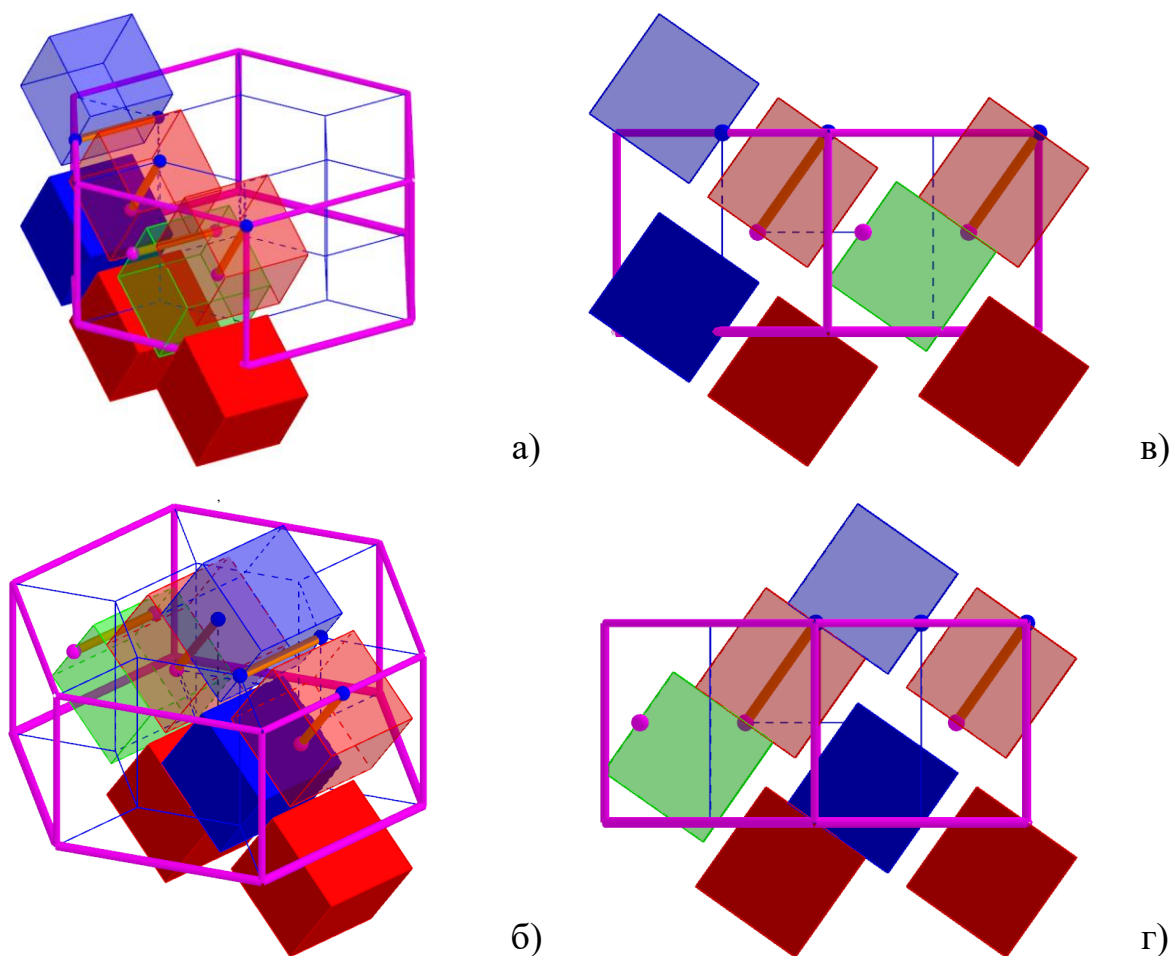


Рисунок 2.27 – Послойное рассмотрение расширенной альтернативной гексагональной элементарной ячейки ГПУ: а) левый продольный ряд, б) средний продольный ряд, в) левый продольный ряд – вид сбоку, г) средний продольный ряд – вид сбоку

Таким образом можно заключить, что кубы Брэгга в данной конфигурации не перекрываются. А значит полученная расширенная альтернативная гексагональная ячейка ГПУ действительно обладает свойствами элементарной ячейки для рассматриваемой решётки и в модели связей, и в модели Брэгга.

2.1.5 Брэгговский аналог решётки типа вюртцит

Применим ту же технологию для построения брэгговского аналога элементарной ячейки гексагональной решётки структурного типа вюртцит на примере минерала гексагональный алмаз (рис. 2.28). Для удобства дальнейшего рассмотрения на первом шаге рассмотрим классическую элементарную ячейку выбранной структуры (рис. 2.28 а).

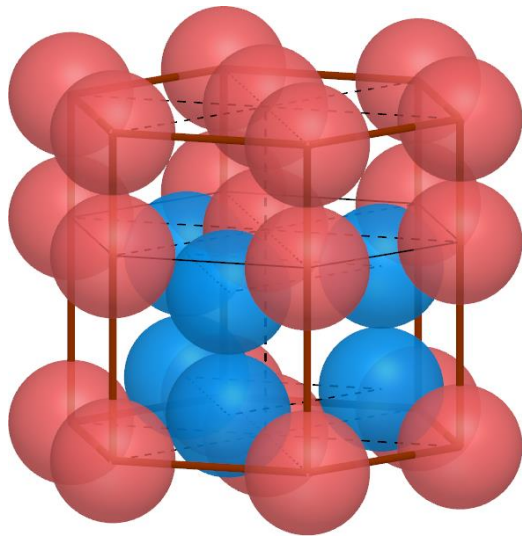
На следующем шаге отметим геометрическое расположение связей между частицами (рис. 2.28 б). При этом оказывается, что для решётки вюртцита существуют два способа ориентации связей в пространстве.

На третьем шаге уберём сферы и оставим только связи (рис. 2.28 в). Получившийся чертёж позволяет сделать следующие наблюдения: 1) все фрагменты связей, находящиеся внутри элементарной ячейки, соединились друг с другом, образовав полные связи; 2) существуют фрагменты связей, расположенные за пределами расширенной ячейки; 3) фрагменты связей, выходящие за пределы ячейки идеально соответствуют фрагментам, образовавшим полные связи.

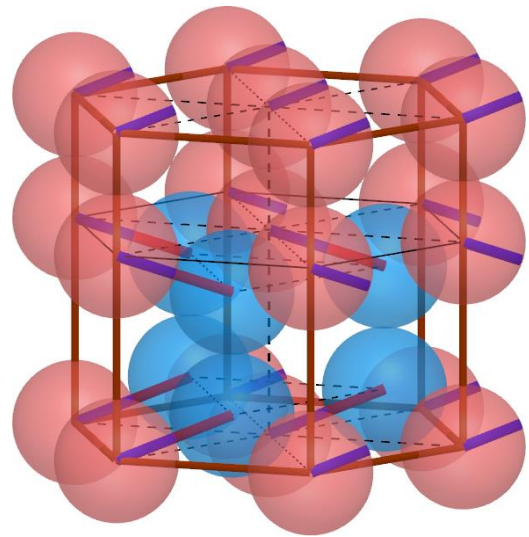
Следовательно, представление элементарной ячейки исследуемой структуры в виде ориентированных в пространстве связей позволяет описать решётку вюртцита. При этом данный способ эквивалентен представлению ячейки в виде плотной упаковки шаров.

На следующем шаге уберём все фрагменты связей, расположенные за пределами рассматриваемой ячейки, а также все связи, которые дублируют друг друга и могут быть восстановлены трансляцией ячейки (рис. 2.28 г). На пятом шаге впишем оставшиеся четыре связи в кубы так, что каждая связь соединяет центры противоположных граней своего куба (рис. 2.28 д).

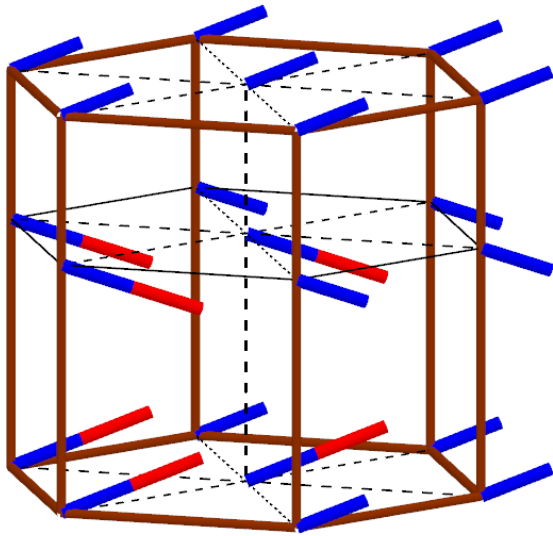
На последнем, шестом шаге остаётся перейти от рассмотрения структуры ячейки, представленной связями, к структуре ячейки, представленной кубами (рис. 2.28 е). Полученная ячейка, содержащая шесть заполненных кубов, и есть модель укладки Брэгга для решётки структурного типа вюртцит.



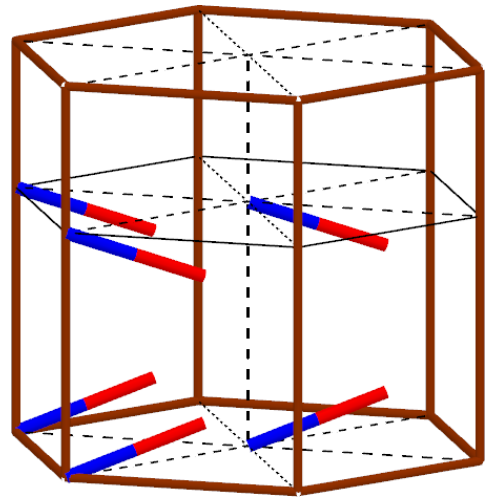
a)



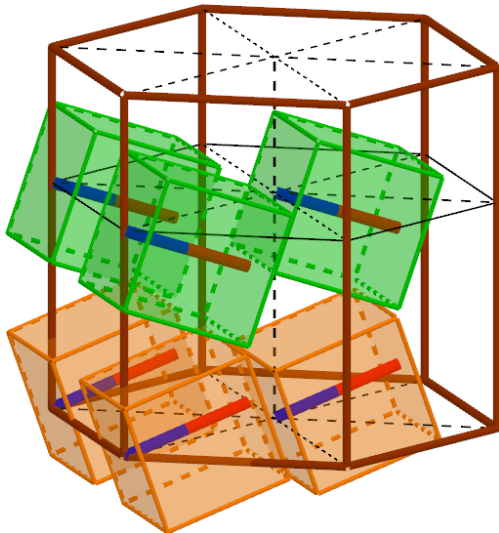
б)



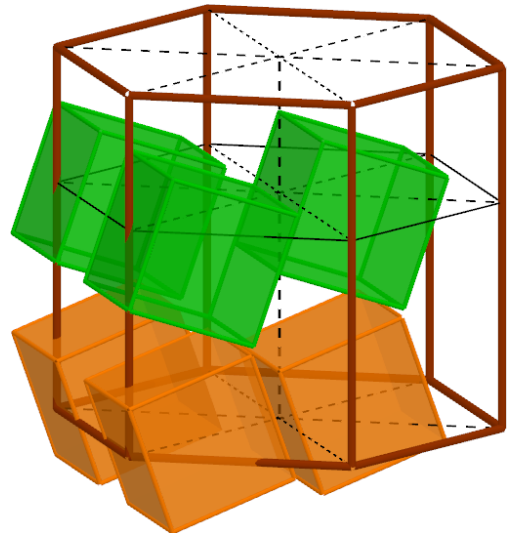
в)



г)



д)



е)

Рисунок 2.28 – Шаги построения модели Брэгга для примитивной кубической решётки (структурный тип *NaCl*)

Очевидно, что в случае гексагональной решётки вюртцита кубы Брэгга располагаются параллельными друг другу слоями, разделёнными небольшим промежутком (рис. 2.29). Внутри слоя между кубами также есть промежутки.

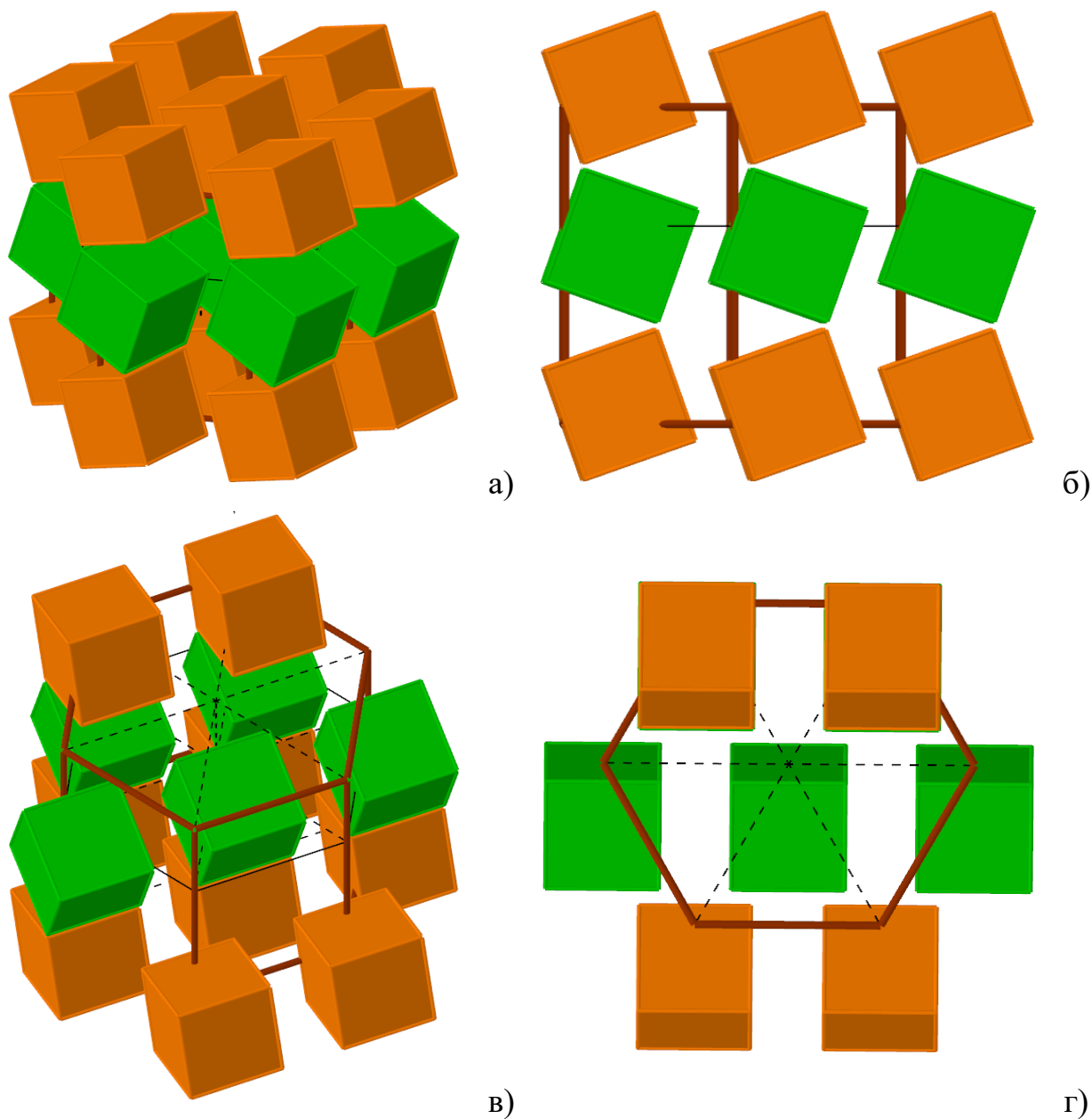


Рисунок 2.29 – Модель укладки кубов Брэгга гексагональной решётки типа рутил:
 а) элементарная ячейка, дополненная кубами ближайших соседей, б) тоже – вид сбоку,
 в) тоже – скрыта часть кубов, г) тоже – вид сверху

Это позволяет заключить, что кубы Брэгга в данной конфигурации не перекрываются. А значит полученная модель ячейки вюртцита сохраняет свойства элементарной ячейки и в модели связей, и в модели укладки кубов. Таким образом построены модели укладки кубов Брэгга для гексагональной плотно упакованной решётки и решётки структурного типа вюртцит.

2.2 Создание компактных векторно-матричных моделей

Как уже было отмечено в первой главе, оригинальный метод компактного матричного описания позволяет получать модели более удобные для выполнения сложных вычислений. Преимущества, формируемых с его помощью моделей, перед координатными матричными прежде всего состоят в уменьшении объёма исходных данных, а также в возможности разработки и применения скоростных высокоточных методов расчётов. Однако метод компактного матричного описания имеет ряд особенностей, мешающих его более широкому и эффективному применению.

2.2.1 Предлагаемый компактный векторно-матричный метод

Согласно оригинальному методу компактного матричного описания, построение описания пространственной структуры выполняется в два этапа. На первом этапе выделяются концентрические кубические координационные слои на базе элементарной ячейки исследуемой структуры. На втором этапе происходит формирование матриц, описывающих базовые координационные слои. В результате чего получается искомый набор компактных треугольных матриц, полностью описывающий моделируемую структуру.

Одной из важных особенностей оригинального метода компактного матричного описания является использование трех типов матриц для описания каждого координационного слоя:

1. универсальная количественная матрица (содержит информацию о *максимально возможном количестве частиц в конкретных позициях* данного координационного слоя);
2. структурная матрица (содержит информацию о *степени заполнения вакантных позиций* в координационном слое);
3. зарядовая матрица (содержит информацию о *зарядах частиц в конкретных позициях* данного координационного слоя).

При этом в оригинальной версии метода комбинация УКМ и СМ дает информацию о *реальном количестве частиц* и их геометрическое положение в выбранном координационном слое. А комбинация полученной матрицы с

ЗМ даёт информацию о суммарных зарядах частиц, находящихся в конкретных позициях данного координационного слоя.

Таким образом, как отмечается в работе [78], использование универсальной количественной матрицы приводит к необходимости постоянно выполнять операции над двумя-тремя матрицами для каждого координационного слоя в зависимости от конкретного исследования. Это приводит к усложнению алгоритмов численных методов, позволяющих производить расчёты на основе компактных матричных моделей, а также увеличивает потребление вычислительных ресурсов.

Ещё одной важной особенностью оригинального метода компактного матричного описания является его жесткая привязка к кубической элементарной ячейке. Следствием этого является невозможность использовать данную версию метода к пространственным решеткам других сингоний.

Для преодоления недостатков, вытекающих из названных особенностей оригинального метода компактного матричного описания, в работах [78, 79] был предложен ряд следующих модификаций.

Во-первых, возможно перейти от использования матриц трех разных типов к использованию матриц только одного типа: простой количественной матрицы. Такая матрица непосредственно содержит информацию о количестве, расположений и, при необходимости, заряде частиц, в конкретном координационном слое.

При этом простая количественная матрица имеет такую же размерность, что и каждая из замещаемых ею матриц. Тогда каждый координационный слой будет полностью описываться только одной матрицей. Что, в свою очередь, исключает необходимость выполнения дополнительных операций над матрицами при выполнении расчётов.

Таким образом, данная модификация позволяет существенно упростить алгоритмы расчетов таких параметров пространственной решётки, как постоянная Маделунга и коэффициент компактности. Эта же модификация ориги-

нальной версии метода позволяет уменьшить объем используемых вычислительных ресурсов и сократить время выполнения расчетов при сохранении точности получаемых результатов.

Во-вторых, возможно расширить область применения метода компактного матричного описания путём введения понятия куба-генератора. Куб-генератор – это фрагмент решетки, имеющий форму куба и позволяющий восстанавливать сколь-угодно большой фрагмент пространственной структуры путем трансляции [55].

Данная модификация основывается на следующем предположении. Для моделируемой пространственной решётки некубической сингонии возможно выделить фрагмент, одновременно обладающий свойствами: 1) фрагмент имеет форму куба; 2) при трансляции фрагмента на вектора, коллинеарные и равные по длине его рёбрам, восстанавливается исходная пространственная решётка. Именно такой фрагмент решётки является кубом-генератором.

Стоит заметить, что размеры такого фрагмента могут существенно отличаться от размеров элементарной ячейки моделируемой структуры как в большую, так и в меньшую сторону. Также по отношению к элементарной ячейке ориентация куба-генератора в пространстве может быть любой.

Таким образом, куб-генератор является аналогом элементарной ячейки для всех регулярных пространственных структур. А его выявление делает возможным применение к ней данного метода описания. В частности, куб-генератор позволяет свести задачу формирования компактного матричного описания решётки произвольной сингонии к задаче формирования компактного матричного описания решётки кубической сингонии. То есть, данная модификация делает компактный матричный метод универсальным [78, 79].

Тогда процесс формирования компактного матричного описания произвольной пространственной решётки в общем виде можно представить в виде схемы (рис. 2.30). Прежде всего, исследуемая решётка должна быть описана с помощью многогранников минимально возможных размеров. При этом частицы структуры могут располагаться только в их вершинах и в центрах.

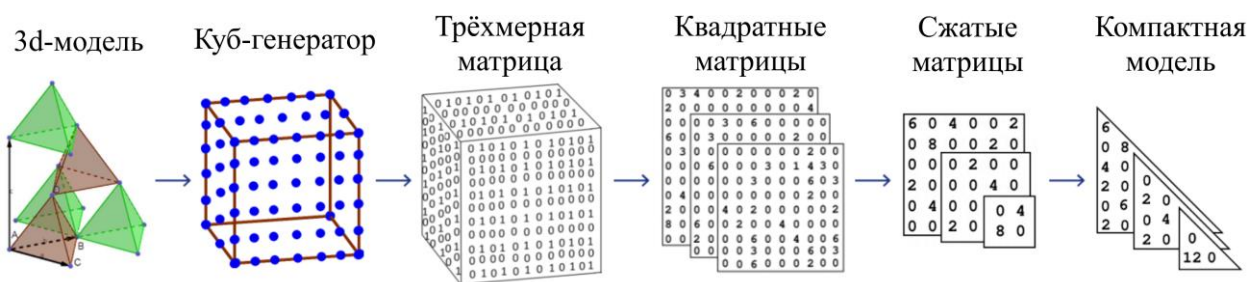


Рисунок 2.30 – Схема формирования компактного матричного описания произвольной решётки в соответствии с предлагаемой версией метода

На втором шаге необходимо выделить куб-генератор для данной решётки. После чего описать полученный фрагмент в виде трёхмерной бинарной матрицы. Полученная матрица уже может быть преобразована в набор квадратных матриц, описывающих базовые координационные слои. Затем выполняется пошаговое сжатие набора квадратных матриц. Результатом этого сжатия является набор треугольных матриц, представляющий собой компактную матричную модель исследуемой пространственной структуры.

2.2.2 Создание компактной матричной модели решётки типа магний

Рассмотрим формирование компактного матричного описания гексагональной плотно упакованной решётки более подробно. Первый шаг – получение трёхмерной модели исследуемой структуры. Известно, что ГПУ может быть легко описана с помощью слоёв чередующихся тетраэдров (рис. 2.31). При этом используются два типа тетраэдров, отличающихся только ориентацией в пространстве. Частицы располагаются только в вершинах тетраэдров.

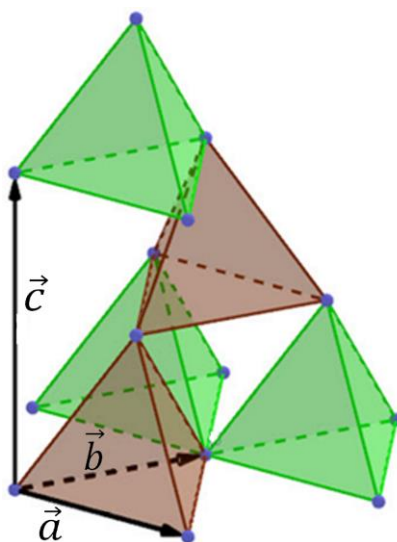


Рисунок 2.31 – Элементы двухкомпонентной тетраэдрической модели ГПУ: базовые и порождённые тетраэдры, вектора трансляции

Второй шаг – выявление куба-генератора. Эта задача сводится к определению двух параметров куба: длины ребра и ориентации в пространстве (относительно базовых элементов трёхмерной модели решётки). Поэтому в отношении выбранной тетраэдрической модели ГПУ предположим, что одновременно выполняются два следующих условия: 1) куб-генератор существует; 2) его пространственная диагональ ориентирована также, как высоты тетраэдров.

Тогда длину ребра куба-генератора можно определить путём построения кубических фрагментов исследуемой решётки, постепенно и равномерно увеличивая их размеры. В результате серии таких построений получен фрагмент гексагональной плотноупакованной решётки, обладающий свойствами элементарной ячейки (рис. 2.32). В частности, при визуальном анализе расположения тетраэдров в гранях данного куба становится очевидным, что противоположные грани идентичны. То есть возможно воссоздавать оригинальную пространственную структуру путём трансляции данного куба. Что в свою очередь означает, что полученный кубический фрагмент обладает свойствами элементарной ячейки.

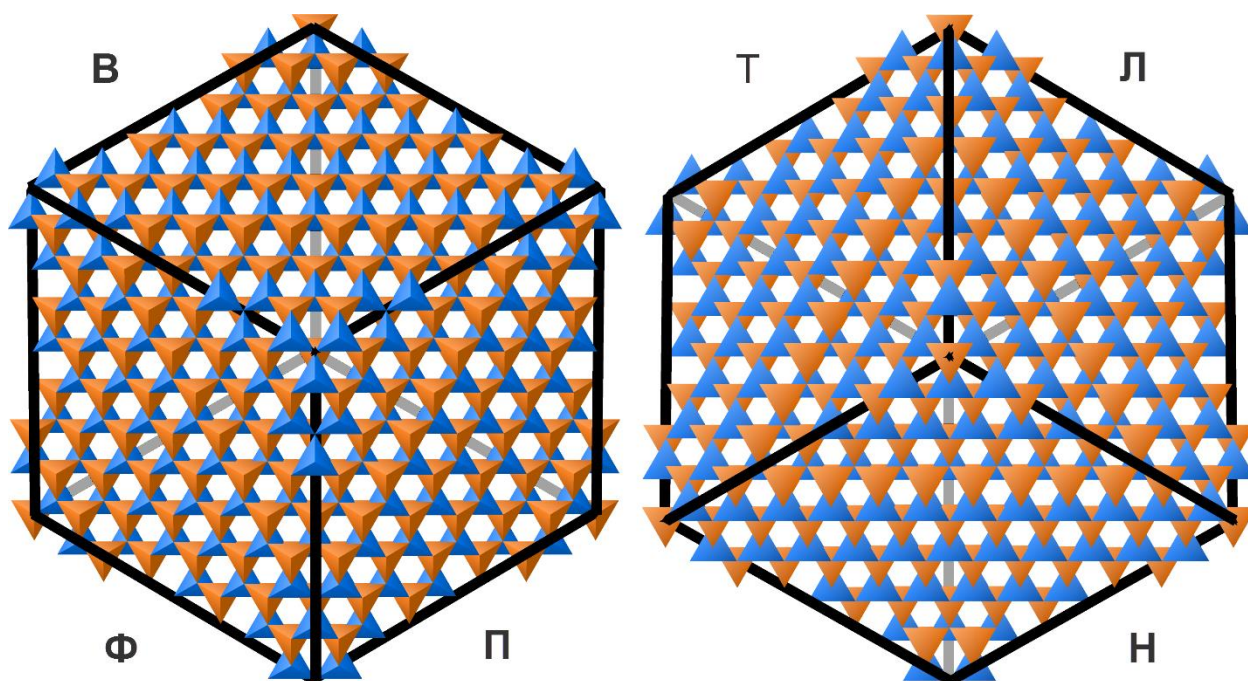


Рисунок 2.32 – Куб-генератор ГПУ. Грани: В – верхняя, Л – левая, Н – нижняя, П – правая, Т – тыльная, Ф – фронтальная

Учитывая взаимную ориентацию найденного куба и базовых элементов использованной модели, можно определить длину ребра данного кубического фрагмента:

$$c' = a'\sqrt{3} = kh,$$

где c' – пространственная диагональ куба-генератора, a' – длина его ребра, k – количество тетраэдров, укладываемых на диагонали куба, h – высота правильного тетраэдра (рис. 2.33).

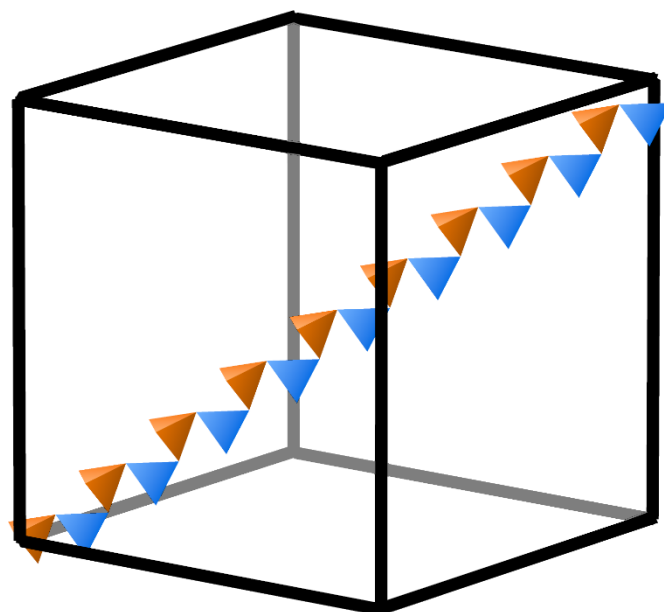


Рисунок 2.33 – Куб-генератор ГПУ. Элементы тетраэдрической модели, расположенные вдоль пространственной диагонали

Пусть d – расстояние между двумя частицами, находящимися в смежных вершинах тетраэдров используемой модели. Тогда $h = d\sqrt{6}/3$, откуда легко можно выразить длину ребра куба-генератора: $a' = dk\sqrt{2}/3$.

Таким образом, можно считать, что существование куба-генератора для решётки ГПУ подтверждено, а его параметры определены. Однако полученные результаты нуждаются в более строгой проверке методом вычислительного эксперимента.

Третьим шагом в применении предлагаемого метода компактного матричного описания является формирование трёхмерной бинарной матрицы. Такая матрица имеет размерность равную размерности куба-генератора. Элементы матрицы отображают информацию о наличии или отсутствии частицы

исследуемой пространственной структуры в конкретной точке пространства куба-генератора. Так как выбранная тетраэдрическая модель ГПУ использует целочисленную систему координат, то между координатами ячейки в матрице и точки в пространстве всегда существует прямое и однозначное соответствие.

Оставшиеся шаги включают последовательное выполнение двух основных действий. Сначала выполняется разделение трёхмерной матрицы, описывающей весь куб-генератор целиком, на последовательность трёхмерных матриц, каждая из которых описывает отдельный координационный слой. Затем производится последовательное сжатие трёхмерных матриц до плоских компактных треугольных матриц.

Процесс разделения трёхмерной матрицы куба-генератора на матрицы координационных слоёв прост и прямо соответствует геометрическому разделению пространства куба генератора на вложенные координационные кубы. Что сводится к копированию соответствующих элементов из матрицы куба-генератора в матрицы координационных слоёв.

Процесс преобразования полученных матриц в компактное матричное описание является более сложным и менее очевидным. В частности, сжатие трёхмерных матриц состоит из следующих этапов:

- 1) преобразование каждой трёхмерной матрицы в двумерную;
- 2) сжатие полученных квадратных матриц до четверти их размера;
- 3) сжатие полученных матриц до половины их размера.

Формирование двумерной матрицы на первом шаге можно представить в виде элементарных операций с развёрткой соответствующей кубической матрицы координационного слоя (рис. 2.34). В частности, выполняется сложение элементов условных «граней» трёхмерной матрицы. При этом размерность получаемой квадратной матрицы равна размерности «границ» исходной матрицы. Очевидно, что выполнение данной операции сохраняет информацию о количестве частиц исследуемой структуры и их расположении в координационном слое.

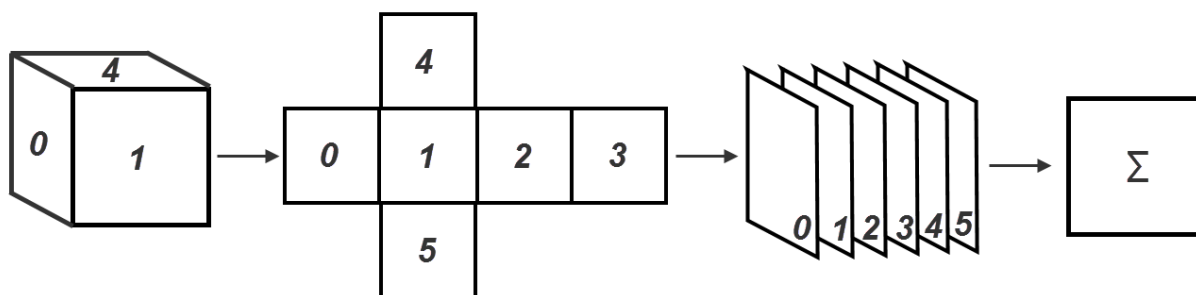


Рисунок 2.34 – Схема формирования двумерной матрицы произвольного координационного слоя

В частности, для третьего координационного слоя гексагональной плотно упакованной решётки трёхмерная матрица, представленная в виде развёртки, будет иметь вид, показанный на рис. 2.35. Стоит отметить, что соседние строки и столбцы стыкующихся граней в данном представлении являются общими. Поэтому квадратная матрица, полученная в результате выполнения первого этапа сжатия, будет иметь вид, показанный на рис. 2.36 а.



Рисунок 2.35 – Развёртка трёхмерной матрицы координационного слоя №3 гексагональной плотно упакованной решётки

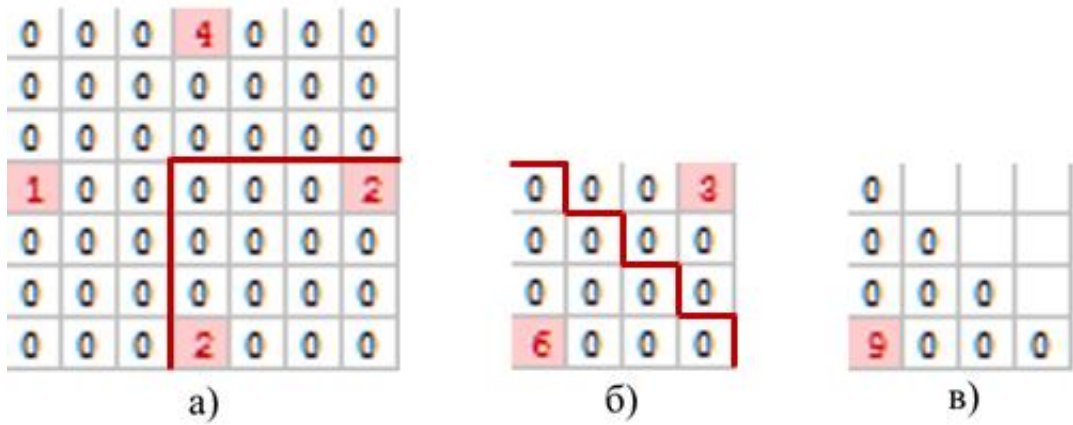


Рисунок 2.36 – Матрицы координационного слоя №3 гексагональной плотно упакованной решётки: а) квадратная матрица первого этапа сжатия; в) квадратная матрица второго этапа сжатия; г) компактная треугольная матрица третьего этапа сжатия

Формирование компактных матриц на следующих этапах рассмотрим на примере схемы двумерной матрицы второго координационного слоя (рис. 2.37). Её сжатие до одной четвёртой исходного размера может быть представлено как складывание квадратного листа бумаги. При этом, как и на предыдущем этапе, выполняется сложение соответствующих элементов матрицы. Соответствующие сжатые матрицы, описывающие третий координационный слой гексагональной плотно упакованной решётки будут иметь вид, показанный на рис. 2.36 б, в.

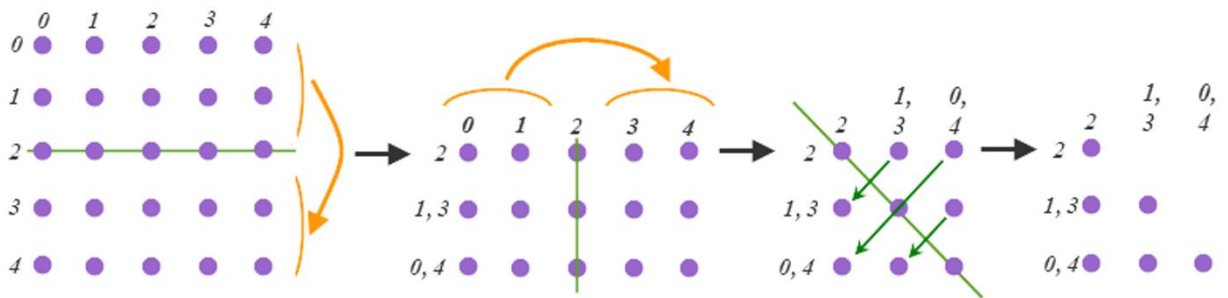


Рисунок 2.37 – Схема формирования компактных матриц на втором и третьем этапе

Для формирования компактного матричного описания были разработаны программа для ЭВМ «Ирис», а также программный модуль «Матрицы» в составе пакета прикладных программ «Оранжевая» [132, 133]. Полученная с их помощью компактная матричная модель гексагональной плотно упакованной решётки, а также построенная по аналогичной технологии модель решётки структурного типа вюрцит представлены в Приложениях В, Г.

2.2.3 Выявление кубического периода решётки типа магний

Наиболее сложный шаг в предлагаемом методе компактного матричного описания пространственных решёток – это этап выявления кубического периода. Рассмотрим более подробно решение этой задачи на примере гексагональной плотно упакованной решётки.

Исходные данные для вычислительного эксперимента по выявлению кубического периода для ГПУ можно следующим образом. Пускай в трёхмерной декартовой системе координат расположена рассмотренная тетраэдрическая модель (см. рис. 2.31) так, что вектор \vec{c} коллинеарен вектору $(1; 1; 1)$, заданному в той же системе координат. Пускай вершины одного из тетраэдров имеют координаты: $A(3; 0; 3)$, $B(0; 3; 3)$, $C(3; 3; 0)$, $D(4; 4; 4)$. Тогда вектора трансляции рассматриваемой модели будут иметь координаты:

$$\begin{aligned}\vec{a} & (0; 6; -6), \\ \vec{b} & (-6; 0; 6), \\ \vec{c} & (4; 4; 4).\end{aligned}$$

Здесь важно заметить, что длина единичного отрезка в используемой системе координат должна быть такой, чтобы координаты всех возможных частиц исследуемой структуры были целыми числами. Это позволит, с одной стороны, повысить скорость и точность расчёта. С другой стороны, следующий шаг – формирование трёхмерного бинарного матричного описания, потребует точного попадания частиц структуры в узлы равномерной трёхмерной сетки. Что так же обеспечивается переходом к целочисленным координатам [57, 67].

Для достижения этого необходимо выполнять ряд дополнительных чертежей и расчётов. Построим тетраэдр $ABCD$, куб $OGNCAPBC'$ и упростим чертёж (рис. 2.38 слева). Проведём диагонали GD , PC , PC' , GC . В равностороннем треугольнике ABC проведём медиану из вершины C на сторону AB . При этом получим точку E , являющуюся основанием медианы CE , и точку F , являющуюся центром основания правильного тетраэдра $ABCD$ (рис. 2.38 справа).

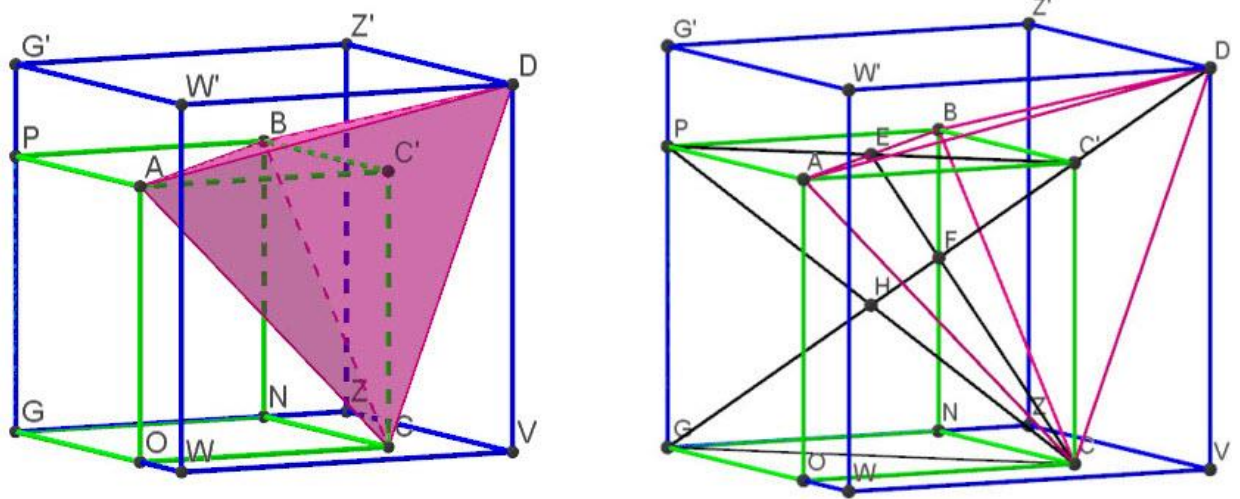


Рисунок 2.38 – Куб, описанный вокруг тетраэдра, образованного четырьмя соприкасающимися частицами, и дополнительные построения

Рассмотрим отдельно получившийся прямоугольник $GPC'C$ и отрезок GD (рис. 2.39). Поскольку PG и $C'C$ – рёбра куба $OGNCAPBC'$, а GC и PC' – диагонали граней того же куба, то $PG = C'C = a$, $GC = PC' = a\sqrt{2}$.

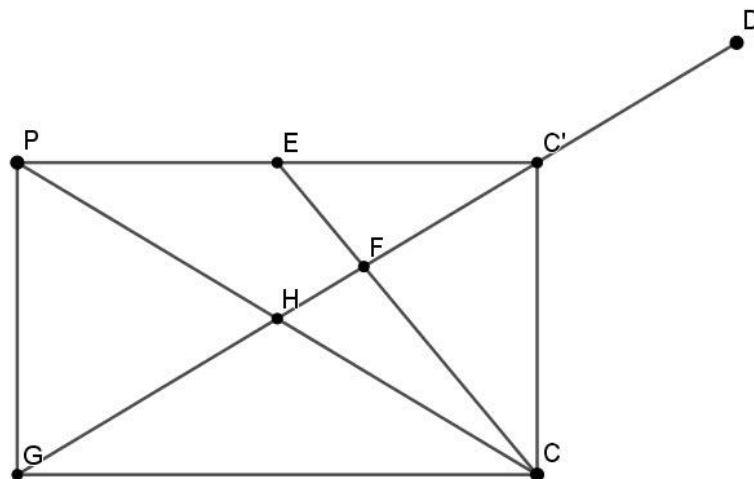


Рисунок 2.39 – Прямоугольник $GPC'C$ и отрезок GD

Рассмотрим треугольник $\triangle GCC'$: $\angle GCC' = 90^\circ$, $GC' = \sqrt{GC^2 + CC'^2} = \sqrt{2a^2 + a^2} = a\sqrt{3}$. Тогда по свойству диагоналей прямоугольника $GPC'C$ имеем: $GH = HC' = \frac{1}{2}GC' = \frac{a\sqrt{3}}{2}$.

Рассмотрим треугольник $\triangle PC'C$: $\angle PC'C = 90^\circ$, $PH = HC$, по свойству диагоналей прямоугольника $GPC'C$, $C'H$ – медиана $\triangle PC'C$. При этом $PE = EC'$ по свойству диагоналей квадрата $APBC'$. В свою очередь, CE – медиана

$\triangle PC'C$. Тогда по свойству медиан треугольника: $CE \cap C'H = F \Rightarrow HF:FC' = 1:2$. Откуда: $3HF = HC' = \frac{a\sqrt{3}}{2}, HF = \frac{a\sqrt{3}}{6}, FC' = \frac{a\sqrt{3}}{3}$.

Рассмотрим тетраэдр $ABCD$: FD – высота, следовательно $FD = \sqrt{\frac{2}{3}}AB = \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot a\sqrt{2} = \frac{2a}{\sqrt{3}} = \frac{2a\sqrt{3}}{3}$. Тогда в кубе $GZVWG'Z'DW'$ можно найти диагональ:

$$GD = GH + HF + FD = \frac{a\sqrt{3}}{2} + \frac{a\sqrt{3}}{6} + \frac{2a\sqrt{3}}{3},$$

$$CG = \frac{a\sqrt{3}(3 + 1 + 4)}{6} = \frac{4a\sqrt{3}}{3},$$

$$GV^2 = 2 \cdot DV^2,$$

$$GD^2 = GV^2 + DV^2 = 2DV^2 + DV^2 = 3DV^2,$$

$$\left(\frac{4a\sqrt{3}}{3}\right)^2 = 3DV^2,$$

$$DV = \frac{4}{3}a.$$

Для дальнейшего рассмотрения моделей гексагональной плотноупакованной решётки будем использовать трёхмерную декартову систему координат с длиной единичного отрезка по каждой из осей равной $\frac{1}{3}a$, как наиболее удобную для построений. Будем называть такой отрезок условной единицей.

Таким образом имеем следующие соотношения: $1 \text{ у. е.} = \frac{1}{3}a, m = a\sqrt{2}$, где a – длина ребра куба $OGNCAPBC'$, m – длина ребра тетраэдра (см. рис. 2.38). При этом $m = 2R$, где R – радиус сферы, соответствующей частице исследуемой пространственной решётки. Откуда имеем: $a = R\sqrt{2}, 1 \text{ у. е.} = \frac{R\sqrt{2}}{3}$.

Полученные соотношения позволяют решить две задачи. Во-первых, описать все элементы гексагональной плотноупакованной решётки в целочисленной системе координат. А во-вторых, определить размер ячейки трёхмерной сетки, необходимой для выполнения последующего шага формирования компактного матричного описания. Это позволяет непосредственно сформулировать задачу и условия вычислительного эксперимента [67–73].

Предположим, что куб-генератор существует и ориентирован так же, как оси выбранной системы координат, а точка $O(0; 0; 0)$ является одной из его вершин. Тогда, двигаясь вдоль каждой координатной оси, на равных расстояниях от исходной точки мы будем обнаруживать точки идентичные ей.

Для оси OX точкой, идентичной точке $O(0; 0; 0)$, будет точка O' такая, что для неё одновременно выполняются следующие условия: 1) O' находится в тетраэдре того же типа и на том же месте, что и исходная точка O , 2) координаты точек O и O' отличаются только одним компонентом. Таким образом, координаты искомой точки будут иметь вид: $O'(x'; 0; 0)$.

Аналогично можно сформулировать критерии определения идентичных точек для оставшихся осей координат.

Для оси OY точкой, идентичной точке $O(0; 0; 0)$, будет точка O'' такая, что для неё одновременно выполняются следующие условия: 1) O'' находится в тетраэдре того же типа и на том же месте, что и исходная точка O , 2) координаты точек O и O'' отличаются только одним компонентом. Таким образом, координаты искомой точки будут иметь вид: $O''(0; y''; 0)$.

Для оси OZ точкой, идентичной точке $O(0; 0; 0)$, будет точка O''' такая, что для неё одновременно выполняются следующие условия: 1) O''' находится в тетраэдре того же типа и на том же месте, что и исходная точка O , 2) координаты точек O и O''' отличаются только одним компонентом. Таким образом, координаты искомой точки будут иметь вид: $O'''(0; 0; z''')$.

Если рассматриваемая гипотеза верна и для решётки ГПУ действительно существует куб-генератор, ориентированный в пространстве заданным способом, то необходимо должны выполняться следующие условия: 1) двигаясь вдоль каждой из осей координат в любом направлении, мы будем встречать точки, идентичные исходной на равном расстоянии друг от друга (с одинаковой периодичностью); 2) периоды, выявленные для исследуемой структуры вдоль каждой из осей, будут одинаковыми [67–73].

Как известно, фрагмент любого размера регулярной пространственной решётки может быть описан с помощью векторов трансляции и базового элемента модели данной структуры. Для ГПУ в качестве базового элемента могут быть выбраны: расширенная элементарная ячейка, тетраэдр, куб Брэгга, связи (пары частиц) и ряд других фрагментов. Однако в каждом из этих случаев в качестве векторов трансляции может быть использован один и тот же набор векторов трансляции \vec{a} , \vec{b} и \vec{c} , описанный ранее [67–73].

Таким образом, алгоритм вычислительного эксперимента в общем виде будет сводиться к четырём простым шагам: 1) выбору базового элемента; 2) определению его координат; 3) циклическому перемещению базового элемента на комбинацию векторов трансляции; 4) проверке координат частиц, находящихся в базовом элементе, полученном в результате трансляции, на соответствие сформулированным требованиям.

Стоит отметить два важных момента. Во-первых, при таких постановке задачи и формулировке алгоритма эксперимента перечисленные варианты базовых элементов модели, в целом, равнозначны. Это обусловлено следующими причинами: 1) модели решётки ГПУ, основанные на различных базовых элементах, эквивалентны друг другу; 2) используется один и тот же набор векторов трансляции; 3) проверка координат выполняется для всех частиц транслированного базового элемента.

Во-вторых, так как расположение частиц в любом возможном базовом элементе известна, то весь элемент целиком может быть однозначно восстановлен из одной своей точки по заранее заданному набору специальных векторов. Это позволяет транслировать не весь базовый элемент целиком, а только лишь одну его точку. При сохранении точности результатов эксперимента данный факт позволит многократно уменьшить объём вычислений, а значит уменьшить требования к необходимым вычислительным ресурсам и сократить затраты времени для получения результатов [67–73].

В качестве базового элемента тетраэдр, включающий точку A (см. рис. 2.38). Для упрощения расчётов перенесём начало используемой системы координат в точку A . Тогда, согласно описанной методике вычислительного эксперимента, можно получать все возможные тетраэдры данного типа путём трансляции исходного тетраэдра на вектор \vec{t} :

$$\vec{t}_i = \alpha_i \cdot \vec{a} + \beta_i \cdot \vec{b} + \gamma_i \cdot \vec{c},$$

где α_i, β_i и γ_i – целые числа. Для каждого получаемого тетраэдра будем проверять точку O'_i , на соответствие исходной точке $O(0; 0; 0)$ согласно сформулированным ранее условиям. Коэффициенты α_i, β_i и γ_i будем менять в некотором диапазоне, позволяющем исследовать необходимый объём структуры.

Диапазон для коэффициентов α_i, β_i и γ_i должен выбираться опытным путём с учётом предполагаемого значения периода в тридцать шесть условных единиц. Данная методика вычислительного эксперимента обладает простотой и прозрачностью, но подразумевает включение в обработку элементов модели решётки, заведомо не отвечающих сформулированным условиям (например, находящихся не на координатных осях выбранной системы координат). Однако, соответствующая оптимизация, с одной стороны, приведёт к усложнению методики эксперимента. С другой стороны, возможностей современных вычислительных средств достаточно для получения результатов эксперимента за приемлемое время даже для большого диапазона коэффициентов.

Тогда, в ходе эксперимента будут накоплены три списка точек, идентичных исходной, для каждой из осей соответственно. Если такие точки будут найдены, останется проанализировать их координаты для выявления периодичности их появления, а также проверки сохранения периода вдоль каждой из координатных осей.

Таким образом, если значения периодов гексагональной плотноупакованной решётки будут выявлены вообще и будут совпадать по всем трём осям, то можно будет обоснованно заключить, что кубический период данной решётки действительно существует и имеет рассчитанное в ходе эксперимента значение. Так же это позволит сделать вывод об ориентации куба-генератора.

Что в свою очередь позволит описать его с помощью матриц и, таким образом, перейти от стереометрических и координатно-векторных моделей пространственной решётки ГПУ к компактной матричной модели.

Для проведения вычислительного эксперимента по выявлению кубического периода ГПУ были разработаны компьютерная программа «Астра» и программный модуль «Поиск периода» в составе пакета прикладных программ «Оранжевая» [73, 132, 133]. С их помощью было обработано 8 120 601 комбинация коэффициентов при векторах трансляции согласно описанной методике вычислительного эксперимента. Каждый из коэффициентов $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i$ изменялся в диапазоне $[-100; 100]$. Вычисления выполнялись на персональном компьютере со следующей конфигурацией: ЦП – *Intel Core i7 CPU 930, 2.80 GHz*; ОЗУ – 6 Гб (доступно 5,5 Гб); ОС – *Microsoft Windows 8.1, Профессиональная x64*. Эксперимент занял 21 секунду.

В ходе исследования были получены три набора точек, соответствующих условиям идентичности, сформулированным в задачах методики проведения эксперимента. Данные наборы представлены в таблицах 2.1–2.3.

Таблица 2.1 – Список точек, идентичных исходной, для оси *OX*

α_i	β_i	γ_i	<i>Point</i>	α_i	β_i	γ_i	<i>Point</i>
-50	-100	75	(900;0;0)	2	4	-3	(-36;0;0)
-48	-96	72	(864;0;0)	4	8	-6	(-72;0;0)
-46	-92	69	(828;0;0)	6	12	-9	(-108;0;0)
-44	-88	66	(792;0;0)	8	16	-12	(-144;0;0)
-42	-84	63	(756;0;0)	10	20	-15	(-180;0;0)
-40	-80	60	(720;0;0)	12	24	-18	(-216;0;0)
-38	-76	57	(684;0;0)	14	28	-21	(-252;0;0)
-36	-72	54	(648;0;0)	16	32	-24	(-288;0;0)
-34	-68	51	(612;0;0)	18	36	-27	(-324;0;0)
-32	-64	48	(576;0;0)	20	40	-30	(-360;0;0)
-30	-60	45	(540;0;0)	22	44	-33	(-396;0;0)
-28	-56	42	(504;0;0)	24	48	-36	(-432;0;0)
-26	-52	39	(468;0;0)	26	52	-39	(-468;0;0)
-24	-48	36	(432;0;0)	28	56	-42	(-504;0;0)
-22	-44	33	(396;0;0)	30	60	-45	(-540;0;0)
-20	-40	30	(360;0;0)	32	64	-48	(-576;0;0)
-18	-36	27	(324;0;0)	34	68	-51	(-612;0;0)
-16	-32	24	(288;0;0)	36	72	-54	(-648;0;0)
-14	-28	21	(252;0;0)	38	76	-57	(-684;0;0)
-12	-24	18	(216;0;0)	40	80	-60	(-720;0;0)
-10	-20	15	(180;0;0)	42	84	-63	(-756;0;0)

Таблица 2.1 – Список точек, идентичных исходной, для оси OX (окончание)

α_i	β_i	γ_i	<i>Point</i>	α_i	β_i	γ_i	<i>Point</i>
-8	-16	12	(144;0;0)	44	88	-66	(-792;0;0)
-6	-12	9	(108;0;0)	46	92	-69	(-828;0;0)
-4	-8	6	(72;0;0)	48	96	-72	(-864;0;0)
-2	-4	3	(36;0;0)	50	100	-75	(-900;0;0)
0	0	0	(0;0;0)				

Таблица 2.2 – Список точек, идентичных исходной, для оси OY

α_i	β_i	γ_i	<i>Point</i>	α_i	β_i	γ_i	<i>Point</i>
-100	-50	-75	(0; -900;0)	4	2	3	(0;36;0)
-96	-48	-72	(0; -864;0)	8	4	6	(0;72;0)
-92	-46	-69	(0; -828;0)	12	6	9	(0;108;0)
-88	-44	-66	(0; -792;0)	16	8	12	(0;144;0)
-84	-42	-63	(0; -756;0)	20	10	15	(0;180;0)
-80	-40	-60	(0; -720;0)	24	12	18	(0;216;0)
-76	-38	-57	(0; -684;0)	28	14	21	(0;252;0)
-72	-36	-54	(0; -648;0)	32	16	24	(0;288;0)
-68	-34	-51	(0; -612;0)	36	18	27	(0;324;0)
-64	-32	-48	(0; -576;0)	40	20	30	(0;360;0)
-60	-30	-45	(0; -540;0)	44	22	33	(0;396;0)
-56	-28	-42	(0; -504;0)	48	24	36	(0;432;0)
-52	-26	-39	(0; -468;0)	52	26	39	(0;468;0)
-48	-24	-36	(0; -432;0)	56	28	42	(0;504;0)
-44	-22	-33	(0; -396;0)	60	30	45	(0;540;0)
-40	-20	-30	(0; -360;0)	64	32	48	(0;576;0)
-36	-18	-27	(0; -324;0)	68	34	51	(0;612;0)
-32	-16	-24	(0; -288;0)	72	36	54	(0;648;0)
-28	-14	-21	(0; -252;0)	76	38	57	(0;684;0)
-24	-12	-18	(0; -216;0)	80	40	60	(0;720;0)
-20	-10	-15	(0; -180;0)	84	42	63	(0;756;0)
-16	-8	-12	(0; -144;0)	88	44	66	(0;792;0)
-12	-6	-9	(0; -108;0)	92	46	69	(0;828;0)
-8	-4	-6	(0; -72;0)	96	48	72	(0;864;0)
-4	-2	-3	(0; -36;0)	100	50	75	(0;900;0)
0	0	0	(0;0;0)				

Таблица 2.3 – Список точек, идентичных исходной, для оси OZ

α_i	β_i	γ_i	<i>Point</i>	α_i	β_i	γ_i	<i>Point</i>
-66	66	99	(0;0;1188)	2	-2	-3	(0;0; -36)
-64	64	96	(0;0;1152)	4	-4	-6	(0;0; -72)
-62	62	93	(0;0;1116)	6	-6	-9	(0;0; -108)
-60	60	90	(0;0;1080)	8	-8	-12	(0;0; -144)
-58	58	87	(0;0;1044)	10	-10	-15	(0;0; -180)
-56	56	84	(0;0;1008)	12	-12	-18	(0;0; -216)
-54	54	81	(0;0;972)	14	-14	-21	(0;0; -252)
-52	52	78	(0;0;936)	16	-16	-24	(0;0; -288)
-50	50	75	(0;0;900)	18	-18	-27	(0;0; -324)
-48	48	72	(0;0;864)	20	-20	-30	(0;0; -360)

Таблица 2.3 – Список точек, идентичных исходной, для оси OZ (окончание)

α_i	β_i	γ_i	<i>Point</i>	α_i	β_i	γ_i	<i>Point</i>
-46	46	69	(0;0;828)	22	-22	-33	(0;0;-396)
-44	44	66	(0;0;792)	24	-24	-36	(0;0;-432)
-42	42	63	(0;0;756)	26	-26	-39	(0;0;-468)
-40	40	60	(0;0;720)	28	-28	-42	(0;0;-504)
-38	38	57	(0;0;684)	30	-30	-45	(0;0;-540)
-36	36	54	(0;0;648)	32	-32	-48	(0;0;-576)
-34	34	51	(0;0;612)	34	-34	-51	(0;0;-612)
-32	32	48	(0;0;576)	36	-36	-54	(0;0;-648)
-30	30	45	(0;0;540)	38	-38	-57	(0;0;-684)
-28	28	42	(0;0;504)	40	-40	-60	(0;0;-720)
-26	26	39	(0;0;468)	42	-42	-63	(0;0;-756)
-24	24	36	(0;0;432)	44	-44	-66	(0;0;-792)
-22	22	33	(0;0;396)	46	-46	-69	(0;0;-828)
-20	20	30	(0;0;360)	48	-48	-72	(0;0;-864)
-18	18	27	(0;0;324)	50	-50	-75	(0;0;-900)
-16	16	24	(0;0;288)	52	-52	-78	(0;0;-936)
-14	14	21	(0;0;252)	54	-54	-81	(0;0;-972)
-12	12	18	(0;0;216)	56	-56	-84	(0;0;-1008)
-10	10	15	(0;0;180)	58	-58	-87	(0;0;-1044)
-8	8	12	(0;0;144)	60	-60	-90	(0;0;-1080)
-6	6	9	(0;0;108)	62	-62	-93	(0;0;-1116)
-4	4	6	(0;0;72)	64	-64	-96	(0;0;-1152)
-2	2	3	(0;0;36)	66	-66	-99	(0;0;-1188)
0	0	0	(0;0;0)				

Анализ полученных результатов показывает, что для каждой координатной оси и заданного диапазона коэффициентов выявлено не менее пятидесяти точек, идентичных исходной и располагающихся через одинаковые промежутки как на положительном, так и на отрицательном направлении. Рассмотрение координат точек, представленных в таблицах 2.1–2.3, очевидно, показывает, что расстояние между любыми двумя последовательно расположенными точками равно тридцати шести условным единицам [67–73].

Таким образом, результаты вычислительного эксперимента позволяют сделать следующие выводы: 1) кубический период и куб-генератор для решётки ГПУ существует; 2) куб-генератор ориентирован в пространстве так, что его пространственная диагональ сонаправлена вектору \vec{c} тетраэдрической модели ГПУ (см. рис. 2.31); 3) значение кубического периода равно тридцати шести условным единицам; 4) выявленная периодичность сохраняется на протяжённом фрагменте решётки.

2.3 Возможность применения к сложны решёткам

Как уже было отмечено, развитие и разработка новых методов описания целесообразнее выполнять и проверять на простых и хорошо изученных структурах. Например, на решётках кубических сингоний, на которых была опробована оригинальная версия метода компактного матричного описания, а также оригинальные методы расчёта значений коэффициента компактности и постоянной Маделунга. В том же качестве выступают решётки гексагональных сингонии, на которых выполняется апробирование предлагаемых новых версий соответствующих методов.

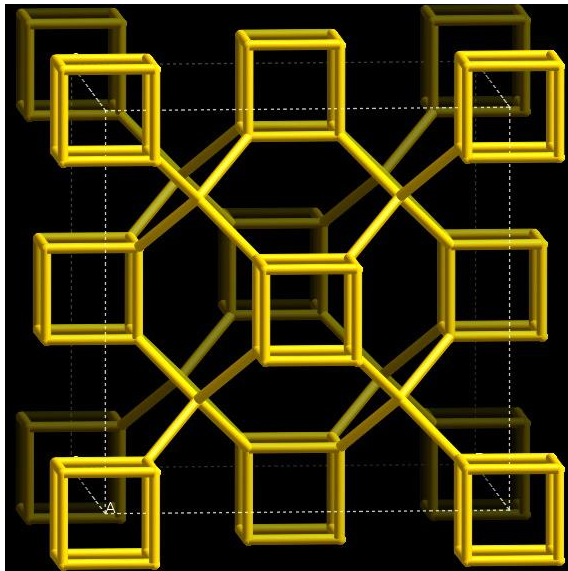
Однако возможность применения развиваемых в данной работе подходов к решёткам с более сложными составом и структурами остаётся не вполне очевидной. Применимость предлагаемых методов в отношении сложных решёток можно на примере простейшего из цеолитов.

2.3.1 Решётки цеолитов кубического типа

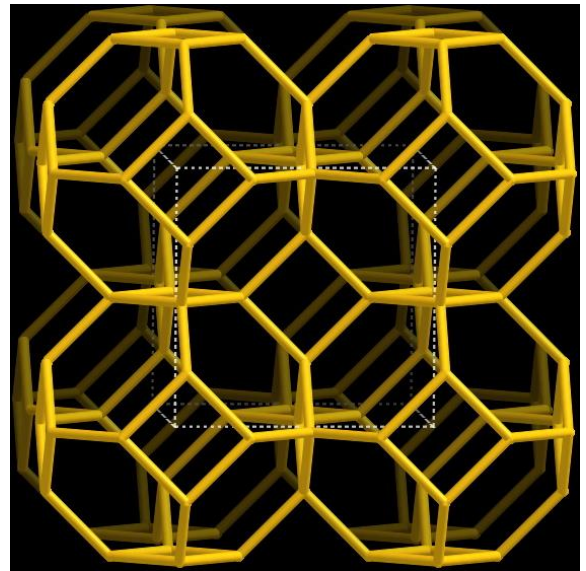
Цеолиты являются каркасными алюмосиликатами и образуют очень широкий класс соединений со сложной регулярной структурой, в который входят как природные, так и синтетические представители. Цеолиты обладают высокими адсорбционными, ионообменными и каталитическими свойствами. Благодаря чему они находят широкое применение в разных областях науки и техники. Например, в качестве катализаторов в химической промышленности, в медицине, экологии, в сельском хозяйстве и других [134–145].

Среди множества известных на данный момент структур цеолитов есть решётки с известной кубической структурой. В частности *ACO*, *ANA*, *AST*, *BSV*, *-CLO*, *FAU*, *-ITV*, *JSR*, *JST*, *KFI*, *LTA*, *LTN*, *MEP*, *MTN*, *MWF*, *NTP*, *PAU*, *PWN*, *RHO*, *RWY*, *SOD*, *TSC* (рис. 2.40) [146].

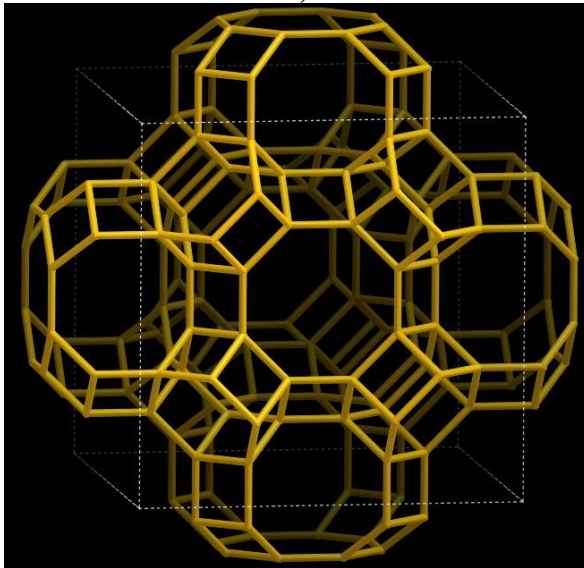
При этом даже самые простые цеолиты с таким типом структуры на много сложнее классических Брэгговских кубических и гексагональных решёток. Поэтому оригинальный метод компактного матричного описания и соответствующие методы расчёта параметров решёток не применимы.



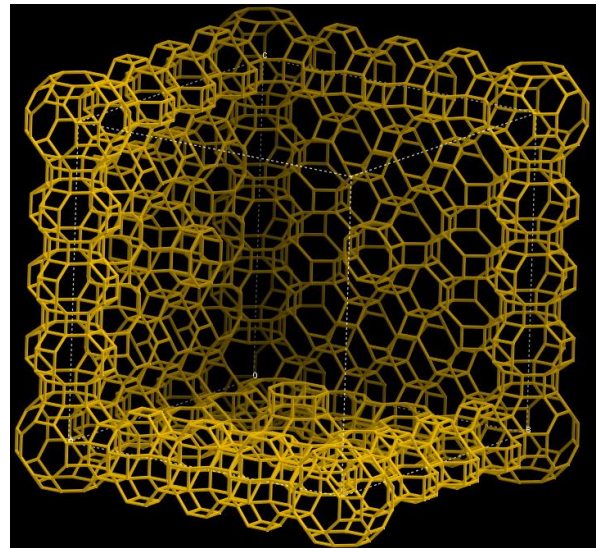
а)



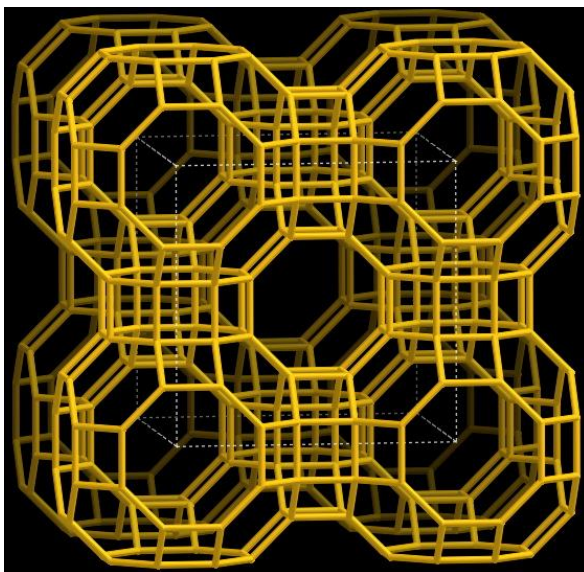
б)



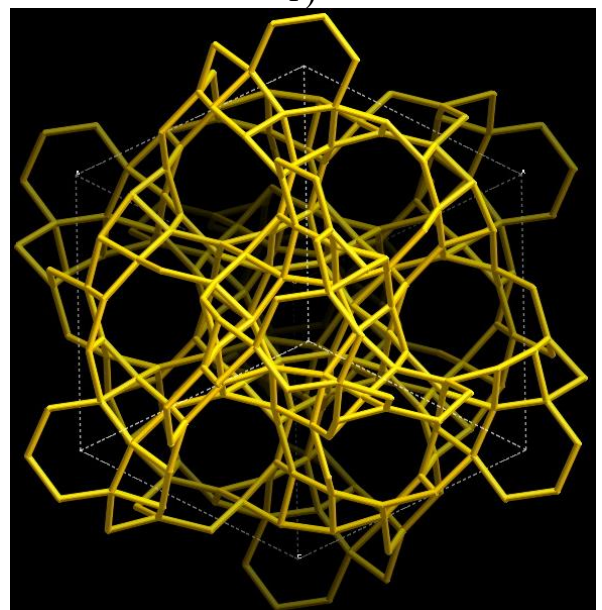
в)



г)



д)



е)

Рисунок 2.40 – Решётки кубических цеолитов: а) *AST*; б) *SOD*; в) *KFI*; г) *MWF*; д) *RHO*; е) *BSV* [146]

2.3.2 Определение параметров сетки для решётки АСО

Стоит отметить, что в общем случае решётки цеолитов формируются тетраэдрами, образованными ионами кремния и кислорода. Эти тетраэдры связаны друг с другом общими вершинами и могут образовывать очень сложные пространственные конфигурации.

Простейшим по структуре цеолитом, решётка которого имеет свойства кубической симметрии, можно назвать АСО (рис. 2.41). На рис. 2.41 б) красным отмечены расположение и половины связей, идущих от ионов кислорода, жёлтым – от ионов кремния.

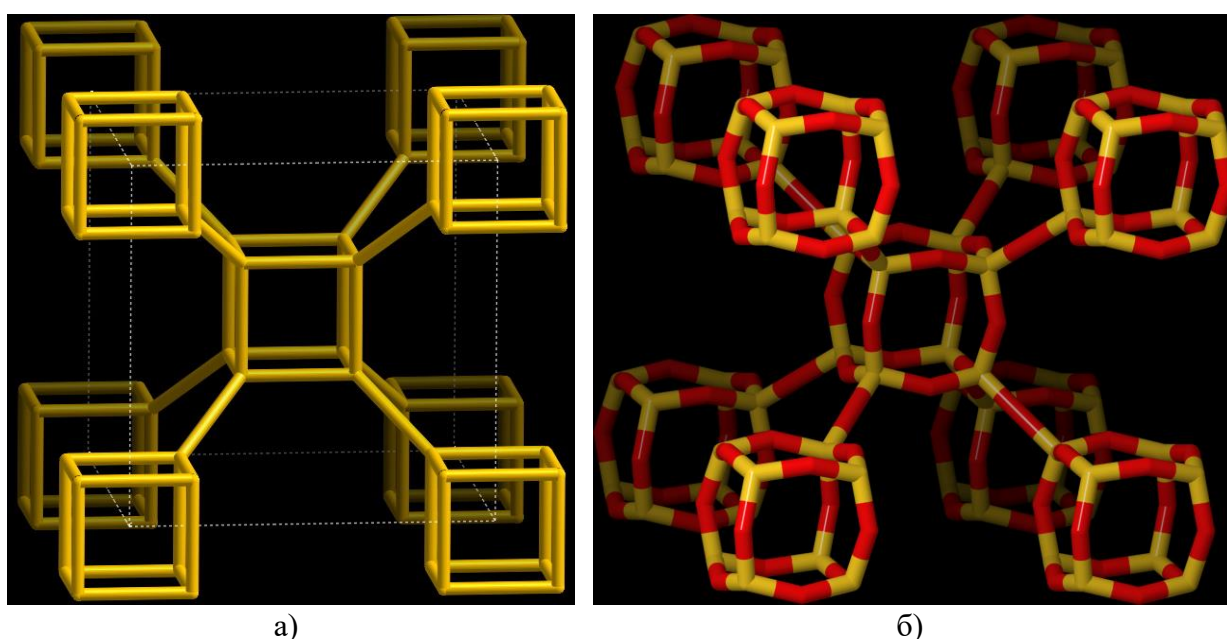


Рисунок 2.41 – Структура цеолита АСО: а) решётка; б) межатомные связи [146]

В качестве базового элемента цеолита АСО можно выбрать фрагмент, показанный на рис. 2.42 а. Очевидно, что не все атомы располагаются на поверхности обычного куба. Это делает более сложной задачу определения параметров равномерной трёхмерной сетки, необходимой для формирования компактного матричного описания. Однако её можно решить, путём использования приёмов подобных применённых при формировании матричных описаний решёток типов вюртцит и магний.

В частности, нужно перейти к тетраэдрическому представлению решётки, особым образом соотнести тетраэдры и кубы, определить длину единичного отрезка и направленность осей новой системы координат (рис. 2.42).

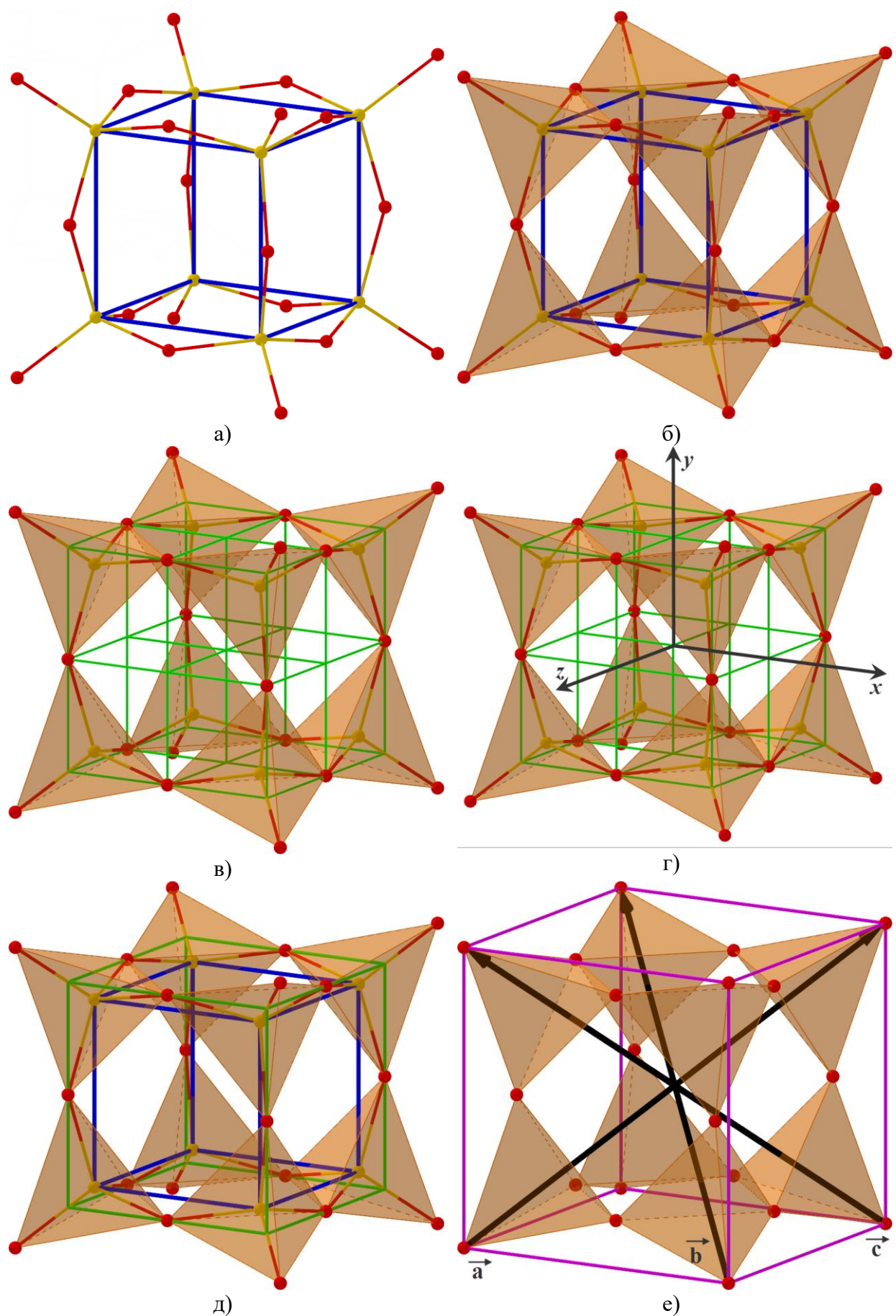


Рисунок 2.42 – Базовый фрагмент решётки АСО: а) атомный каркас; б) тетраэдрическое представление; в) соотношение тетраэдров и вспомогательных кубов; г) новая система координат; д) соотношение вспомогательного куба и куба решётки; е) вектора трансляции

После этого останется рассчитать координаты расположения частиц этого фрагмента и соответствующих векторов трансляции. Этого достаточно, чтобы в дальнейшем перейти к формированию компактного матричного описания данной решётки.

Как отмечалось, решётки цеолитов формируются атомами кремния и кислорода, связи которых можно описать с помощью тетраэдров (рис. 2.42 б). Тогда для каждого тетраэдра базового фрагмента решётки ASO можно построить куб, такой что вершины основания тетраэдра совпадают с вершинами куба так, как показано на рис. 2.42 в).

Тогда можно задать новую систему координат, центр которой располагается в центре базового фрагмента, совпадающем с общей вершиной всех вспомогательных кубов (рис. 2.42 г). Стоит заметить, что куб, образованный вспомогательными кубами, имеет такую же ориентацию в пространстве, как и куб, вершинами которого являются атомы кремния. При этом все атомы кислорода попадают ровно в середины рёбер данного куба.

Более того, базовый фрагмент можно вписать в куб, вершины которого совпадают с вершинами тетраэдров. Тогда вектора трансляции данного фрагмента решётки будут направлены вдоль и равны по модулю пространственным диагоналям данного куба (рис. 2.42 е).

Результаты этой последовательность построений позволяют, во-первых, обоснованное предположение о том, что равномерная трёхмерная сетка, накладываемая на фрагмент решётки, должна быть ориентирована так же, как и вспомогательные кубы (см. рис. 2.42 в). А во-вторых, перейти к расчёту координат частиц, образующих базовый фрагмент решётки.

Для этого нужно отдельно рассмотреть каждую пару «тетраэдры – вспомогательный куб» и выполнить дополнительные построения. Пусть атомы кремния и кислорода образуют тетраэдр $ABCD$. Атом кремния находится в центре тетраэдра – точке G , атомы кислорода находятся в его вершинах – точках A, B, C, D . Точка F – центр основания тетраэдра. Точки A, B и C также

являются вершинами куба, длина ребра которого равна a , а вершина O является центром системы координат. При этом оси системы координат так, как показано на рис. 2.43.

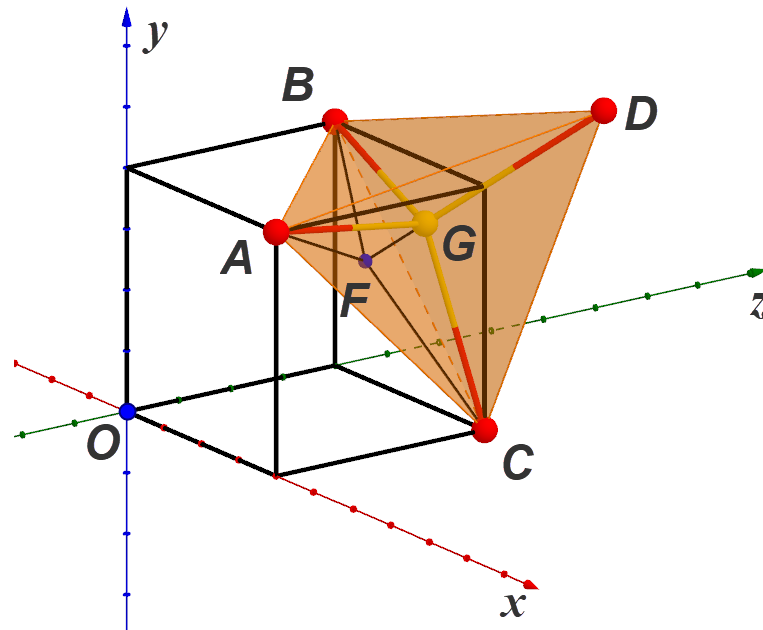


Рисунок 2.43 – Вспомогательный куб и тетраэдр в новой системе координат

В таком случае, легко определить координаты точек A , B и C , а также длину ребра R' тетраэдра $ABCD$: $A(a; a; 0)$, $B(0; a; a)$, $C(a; 0; a)$, $R' = a\sqrt{2}$.

Тогда координаты точки F можно рассчитать следующим образом:

$$F = A + \text{norm}(\overrightarrow{AB} + \overrightarrow{AC}) \cdot R_{\Delta ABC},$$

где $R_{\Delta ABC}$ – радиус описанной окружности ΔABC .

Тогда по свойству правильного треугольника:

$$R_{\Delta ABC} = \frac{a\sqrt{2}}{\sqrt{3}}.$$

Откуда координаты точки F : $(a \cdot 2/3; a \cdot 2/3; a \cdot 2/3)$. При этом координаты точки D можно рассчитать так:

$$D = F + \text{norm}(1; 1; 1) \cdot H_{ABCD},$$

где H_{ABCD} – высота тетраэдра $ABCD$.

По свойствам правильного тетраэдра:

$$H_{ABCD} = \frac{2a}{\sqrt{3}}.$$

Тогда координаты точки D : $(a \cdot 4/3; a \cdot 4/3; a \cdot 4/3)$. При этом координаты точки G можно рассчитать следующим образом:

$$G = F + \text{norm}(1; 1; 1) \cdot r_{ABCD},$$

где r_{ABCD} – радиус вписанной окружности тетраэдра $ABCD$.

По свойствам правильного тетраэдра:

$$r_{ABCD} = \frac{a}{2\sqrt{3}}.$$

Тогда координаты точки G : $(a \cdot 5/6; a \cdot 5/6; a \cdot 5/6)$.

Аналогичным образом рассчитываются координаты частиц, входящих в состав других тетраэдров базового фрагмента структуры. Что, в свою очередь, позволяет рассчитать координаты векторов трансляции (см. рис. 2.42 е):

$$\vec{a} \left(\frac{8a}{3}; \frac{8a}{3}; \frac{8a}{3} \right),$$

$$\vec{b} \left(-\frac{8a}{3}; \frac{8a}{3}; \frac{8a}{3} \right),$$

$$\vec{c} \left(\frac{8a}{3}; -\frac{8a}{3}; \frac{8a}{3} \right).$$

Однако для наложения равномерной трёхмерной сетки требуется использовать целочисленные координаты. Очевидно, что найденные координаты точек и векторов можно легко привести к требуемому виду, установив длину ребра вспомогательного куба равной *шести* единичным отрезкам, а шаг сетки – равным одному единичному отрезку. При этом величина межъядерного расстояния d связана с длиной ребра вспомогательного куба a через радиус описанной окружности тетраэдра и коэффициент перевода величин k :

$$d = \frac{a\sqrt{3}}{2} k.$$

Тогда координаты всех частиц для каждого тетраэдра и векторов трансляции базового фрагмента решётки цеолита ASO будет иметь вид:

$$\begin{pmatrix} 6 & 6 & 0 \\ 0 & 6 & 6 \\ 6 & 0 & 6 \\ 8 & 8 & 8 \\ 5 & 5 & 5 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 6 & 6 & 0 \\ 0 & 6 & -6 \\ 6 & 0 & -6 \\ 8 & 8 & -8 \\ 5 & 5 & -5 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -6 & 6 & 0 \\ 0 & 6 & 6 \\ -6 & 0 & 6 \\ -8 & 8 & 8 \\ -5 & 5 & 5 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -6 & 6 & 0 \\ 0 & 6 & -6 \\ -6 & 0 & -6 \\ -8 & 8 & -8 \\ -5 & 5 & -5 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 6 & -6 & 0 \\ 0 & -6 & 6 \\ 6 & 0 & 6 \\ 8 & -8 & 8 \\ 5 & -5 & 5 \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} 6 & -6 & 0 \\ 0 & -6 & -6 \\ 6 & 0 & -6 \\ 8 & -8 & -8 \\ 5 & -5 & -5 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -6 & -6 & 0 \\ 0 & -6 & 6 \\ -6 & 0 & 6 \\ -8 & -8 & 8 \\ -5 & -5 & 5 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -6 & -6 & 0 \\ 0 & -6 & -6 \\ -6 & 0 & -6 \\ -8 & -8 & -8 \\ -5 & -5 & -5 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 16 & 16 & 16 \\ -16 & 16 & 16 \\ 16 & -16 & 16 \end{pmatrix}.$$

Полученный набор координат позволяет перейти к формированию компактного матричного описания решётки цеолита *ASO*. Что показывает возможность применения развиваемых подходов и основанных на них разработанных методах к решёткам достаточно сложных структур.

2.4 Выводы по главе

В качестве альтернативы известным и широко распространённым способам описания пространственных решёток были предложены два новых подхода. В частности, укладка кубов Брэгга и метод компактного матричного описания. Анализ разработанных методов позволяет сформулировать следующие выводы.

Во-первых, получены модели укладки кубов Брэгга для всех существующих кубических решёток, а также для решёток структурных типов магний и вюрцит. Что позволяет повысить точность расчётов межъядерного расстояния по кристаллографической формуле длины связи для веществ, имеющих соответствующие пространственные структуры.

Во-вторых, разработана универсальная версия метода компактного матричного описания, отличающаяся применимостью к пространственным структурам любых сингонии. Матричная модель, формируемая с помощью предложенного метода, имеет более простую и эффективную структуру по сравнению с оригинальным методом компактного матричного описания. Такое матричное описание содержит только целочисленные элементы, что увеличивает скорость и уменьшает погрешность расчётов при использовании вычислительной техники. При этом сохраняются преимущества оригинального подхода: многократное уменьшение объёма матричного описания по сравнению с координатным матричным методом.

В-третьих, выявлены кубические периоды гексагональной плотно упакованной решётки и решётки структурного типа вюртцит. Что показывает применимость к ним представленного метода компактного матричного описания.

В-четвёртых, построены компактные матричные описания гексагональной плотно упакованной пространственной решётки и решётки структурного типа вюртцит. Предложенные модели позволяют использовать точные скоростные методы для расчёта структурных и энергетических параметров веществ с соответствующей пространственной структурой.

В-пятых, для решётки цеолита *АСО* выделен базовый фрагмент структуры, рассчитаны целочисленные координаты векторов трансляции и частиц. А также определены параметры равномерной трёхмерной сетки, использование которой позволяет сформировать компактное описание соответствующей структуры. Это свидетельствует о возможности применения метода компактного матричного описания к соединениям со сложной пространственной структурой, представляющим высокий интерес для различных отраслей современных науки и техники.

3 МЕТОДЫ РАСЧЁТА ПАРАМЕТРОВ ГЕКСАГОНАЛЬНЫХ РЕШЁТОК

Приведённые в первой главе аналитические расчёты значений коэффициента компактности и межъядерного расстояния показали, что модель укладки кубов Брэгга позволяет получать более точные результаты, чем модель укладки шаров. При этом данные расчёты производились на основе классических элементарных ячеек Бравэ.

Некоторые другие важные структурные и энергетические параметры веществ, такие как постоянная Маделунга, рассчитываются по достаточно крупным фрагментам решёток. Конкретно этот параметр характеризует силовое взаимодействие между ионами в решётке, а также полную энергию кристаллической структуры, её стабильность и модуль упругости [115].

В то же время предложенные во второй главе методы описания потенциально позволяют выполнить необходимые вычисления по большим фрагментам пространственных решёток с высокими точностью и скоростью. Как это было показано для ряда веществ кубической сингонии [22, 25, 27, 28, 30].

Расчёты перечисленных структурных и энергетических параметров всегда предполагают определение количества частиц в заданном объёме решётки в качестве одного из промежуточных шагов. При этом представленные компактные матричные модели построены с помощью предлагаемого нового метода. Как следствие, их структура сильно отличается от оригинальной версии метода компактного матричного описания, изложенной в работах [23–24, 26].

В свою очередь, это означает, что существующие методы расчётов, использованные в работах [22, 25–32], не могут быть непосредственно использованы для вычислений по новым компактным матричным моделям. Поэтому возникает необходимость разработки нового эффективного, высокоточного, скоростного метода определения количества частиц в заданном объёме пространства, принимающего в качестве исходных данных новые компактные матричные модели.

3.1 Основания для разработки численных методов

Рассмотренные в первой главе способы расчёта значений межъядерного расстояния и коэффициента плотности пространственной упаковки предполагают определение количества частиц в исследуемом фрагменте решётки. При этом существует несколько способов расчёта коэффициента компактности. Классический подход предполагает расчёт отношения объёма части пространства, занятого частицами, к общему объёму исследуемой части пространства. Альтернативные методы определения коэффициента компактности предполагают расчёт отношения количества некоторых элементов (как правило, структурных или формульных единиц), содержащихся в исследуемом фрагменте пространства, к его общему объёму с учётом объёма пространства, приходящегося на отдельный элемент [42–44].

Учитывая предложенные во второй главе модели и рассмотренные способы расчётов некоторых структурных характеристик пространственных решёток, можно разработать новый способ расчёта значения коэффициента плотности пространственной упаковки.

3.1.1 Расчёт коэффициента компактности

Развивая подходы, предложенные в работах [42–44], в контексте разработанных кубических моделей пространственных решёток можно предложить новую формулу расчёта коэффициента компактности. В частности, можно предположить, что значение показателя плотности пространственной упаковки может быть определено как отношение объёма, занятого кубами Брэгга, к общему объёму исследуемой части пространства:

$$\gamma = \frac{V_{Br\ddot{u}}}{V} = \frac{N_{Br\ddot{u}} \cdot (2R)^3}{a^3}, \quad (3.1)$$

где $N_{Br\ddot{u}}$ – количество кубов Брэгга, полностью находящихся внутри объёма исследуемого пространства, R – радиус сфер, соответствующих частицам, а также половина межъядерного расстояния и половина длины ребра куба Брэгга, a – длина ребра куба, ограничивающего исследуемый фрагмент.

Данный способ расчёта должен позволить упростить и повысить точность вычисления благодаря изменению формы базового элемента модели, а значит и формулы расчёта его объёма. Для проверки данного подхода к расчёту коэффициента плотности пространственной упаковки можно использовать формулу расчёта межъядерного расстояния (1.15).

Для повышения точности получаемых данных выполнять расчёт нужно не по элементарной ячейке, а по достаточно крупному фрагменту пространственной решётки. Это позволяют сделать предложенные компактные матричные модели. Очевидно, что для выполнения данных расчётов необходимо разработать соответствующий эффективный численный метод и реализовать его в виде компьютерного программного обеспечения.

Выполнение расчётов по формуле (3.1) требует определения количества кубов Брэгга, находящихся в исследуемом фрагменте решётки, что является достаточно сложной задачей, учитывая их расположение и ориентацию в пространстве. Однако то, что один куб Брэгга соответствует в точности одной связи между двумя частицами, позволяет перейти от точного аналитического расчёта по формуле (3.1) к численному. В частности, вместо точного количества целых кубов, находящихся в заданном фрагменте решётки, можно использовать приближённую оценку:

$$N_{Brg} = \frac{N}{2}, \quad (3.2)$$

где N – количество целых частиц в исследуемом объёме. Стоит отметить, что использование этой приближённой оценки количества кубов Брэгга делает формулы (1.13) и (3.1) эквивалентными друг другу.

Тогда для получения точного значения коэффициента компактности необходимо минимизировать погрешность, возникающую из-за использования в расчёте приближённой оценки. Для этого необходимо с высокой степенью точности определять полное и эффективное количество частиц в некотором фрагменте пространственной решётки.

3.1.2 Связь базовых и составных координационных слоёв

Для разработки способа определения количества частиц в объёме пространства, занятого исследуемой пространственной решёткой, нужно более детально рассмотреть структуру и способ формирования компактной матричной модели. А также ввести несколько новых понятий.

Будем называть последовательность кубических координационных слоёв с номерами от 0 до M , полностью охватывающих пространство куба-генератора, базовым набором координационных слоёв. А все координационные слои, не входящие в базовый набор, будем называть составными координационными слоями.

На рис. 3.1 показан пример базового набора для некоторой решётки, куб-генератор которой имеет длину ребра равную шести единичным отрезкам. На основе данного ранее определения координационного слоя легко определить, что базовый набор будет включать слои с номерами $0-3$. Нулевой координационный слой показан сферой в центре. На рис. 3.1 права показан вид сверху, верхние грани координационных слоёв скрыты [131].

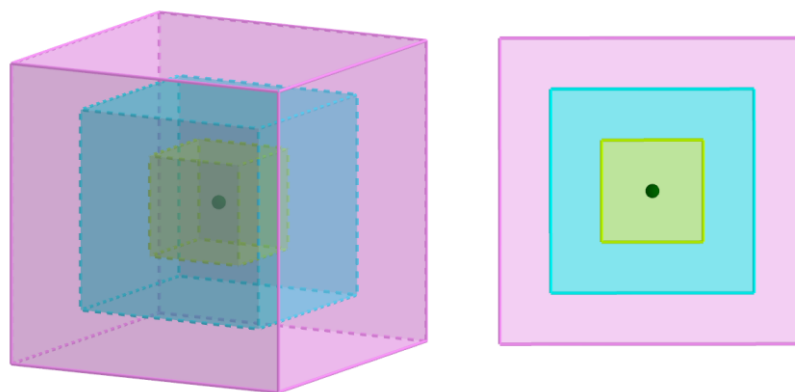


Рисунок 3.1 – Базовый набор из четырёх координационных слоёв

Сначала рассмотрим взаимодействие координационных слоёв со слоями базового набора в двумерном пространстве. Для этого рассмотрим фрагмент решётки, полностью описываемый квадратом, длина ребра которого в три раза больше ребра куба-генератора (рис. 3.2 а). При этом каждый из координационных слоёв № $0-3$ полностью совпадает с соответствующим слоем из базового набора (рис. 3.2 б).

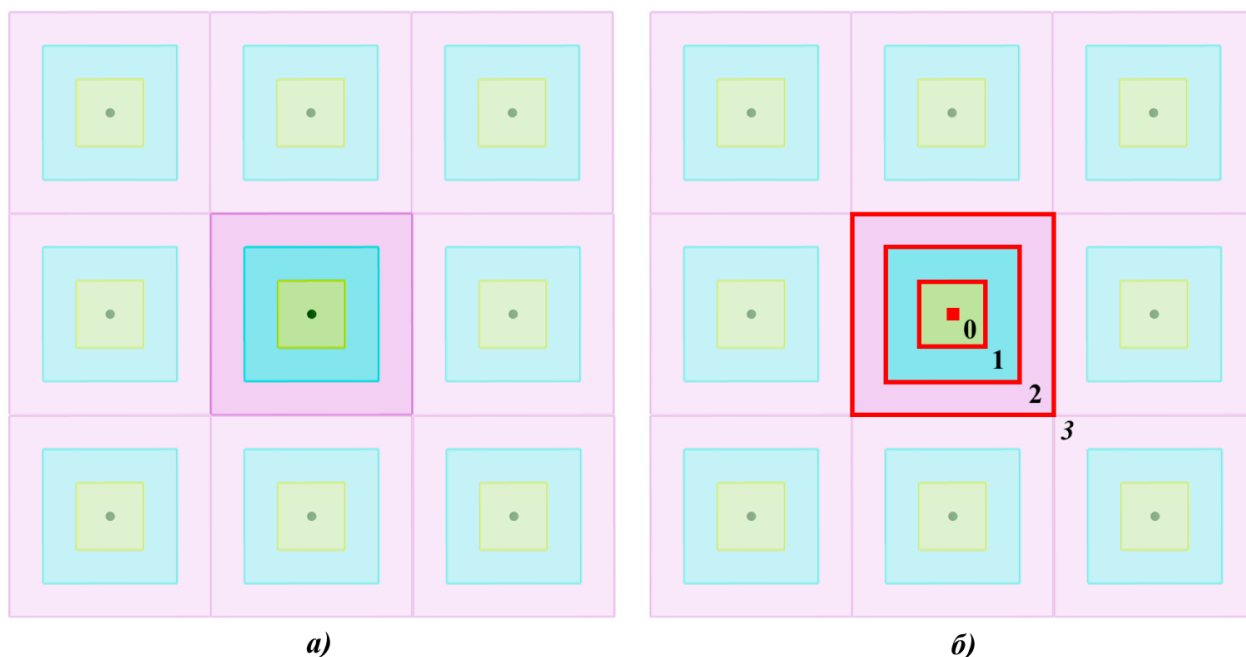


Рисунок 3.2 – Двумерное представление связи координационных слоёв и куба-генератора:
 а) общий вид, б) координационные слои №0–3

Все последующие координационные слои будут либо пересекать границы слоёв базового набора, либо включать в себя части этих слоёв (рис. 3.3). При этом координационный слой №9 оказывается целиком состоящим из элементов последнего слоя из базового набора. То есть становится эквивалентен по своему составу слою №3.

При анализе этих чертежей становятся более ясными принципы построения координационных слоёв, их связи со слоями базового набора, а также особенности, определяющиеся периодичностью кубической структуры. В том числе становится очевидным, что последующие группы слоёв в точности повторяют координационные слои №4–9. Единственным их отличием будет их более крупный размер.

Способ построения координационных слоёв и регулярность кубической структуры свидетельствуют о существовании прямой и однозначной связи между количеством базовых слоёв и количеством слоёв в группах. А также связь с номером координационного слоя и индексом элемента в нём, позволяющей разработать алгоритмы формирования матриц координационных слоёв из элементов матриц базового набора.

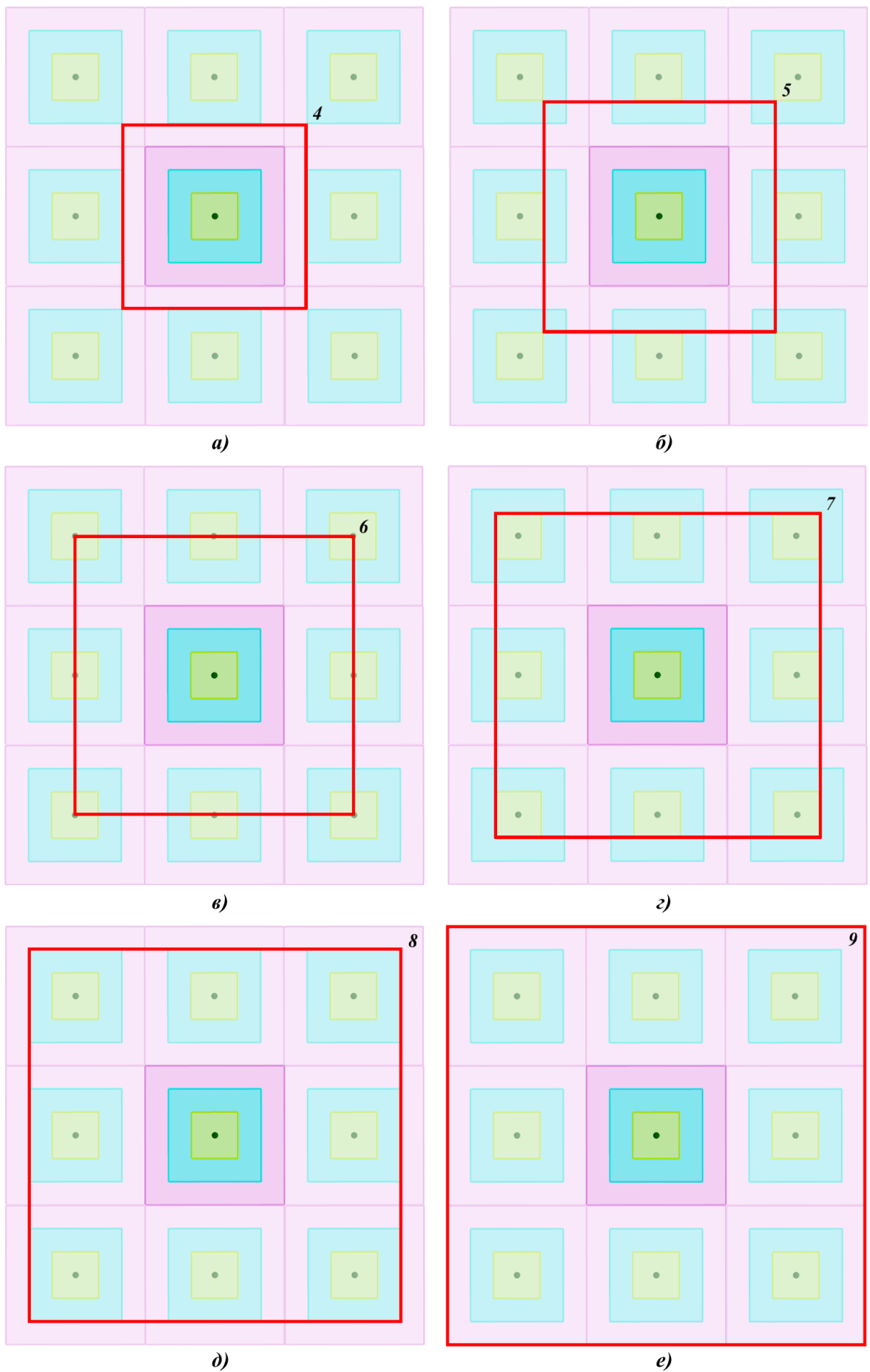


Рисунок 3.3 – Двумерное представление связи координационных слоёв и куба-генератора:
 а) слой №4, б) слой №5, в) слой №6, г) слой №7, д) слой №8, е) слой №9

Рассмотрим формирование координационных слоёв и их связи со слоями базового набора, полностью описывающих куб-генератор конкретной структуры, в трёхмерном пространстве. Как уже отмечалось, при построении координационных слоёв, охватывающих пространство большее, чем куб-генератор, оказывается, что их грани состоят из фрагментов координационных слоёв базового набора. Продемонстрировать это можно на примере координационного слоя с номером 5, и базового набора из четырёх слоёв (рис. 3.4).

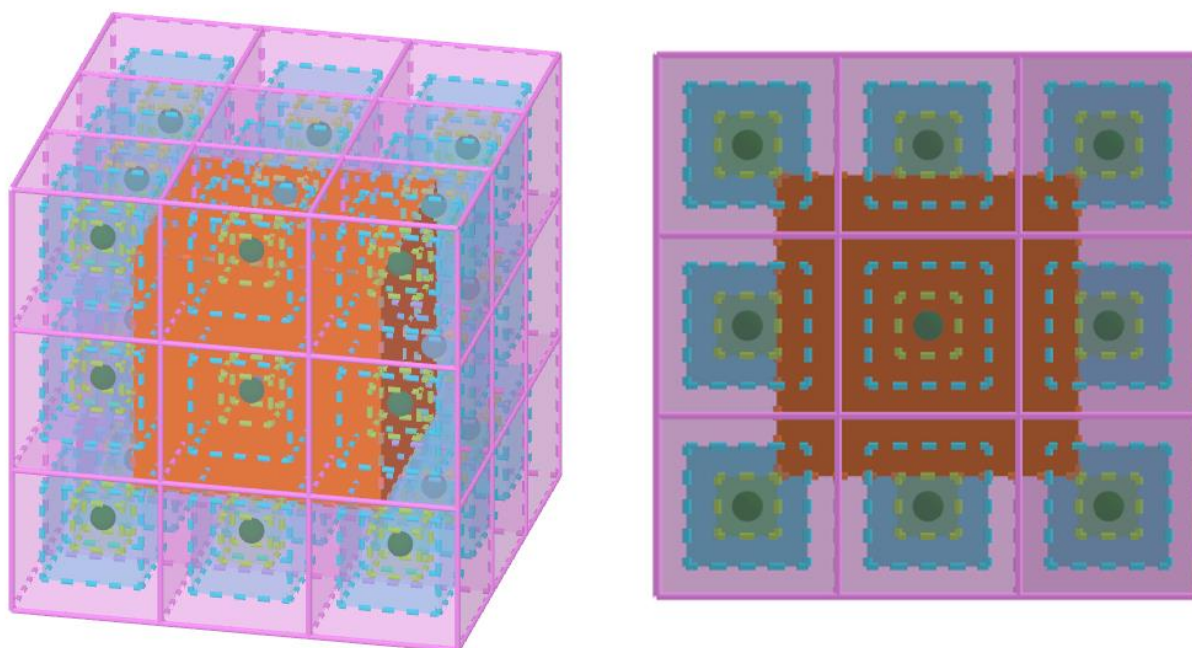


Рисунок 3.4 – Координационный слой №5 в окружении транслированных кубов-генераторов при базовом наборе из четырёх слоёв

Рассмотрим взаимодействие этого слоя со слоями базового набора более подробно. Координационный слой №5 пересекает границы слоя №3, входящего в базовый набор (рис. 3.5). Затем так же пересекает границы координационного слоя №2 (рис. 3.6) и соприкасается с поверхностью слоя №1 (рис. 3.7). При этом координационный слой №5 никак не взаимодействует с базовым координационным слоем №0.

То есть, координационный слой №5 содержит в своём составе элементы всех базовых слоёв кроме слоя №0. Это соответствует картине взаимодействия координационных слоёв в двумерном пространстве (см. рис. 3.3 б).

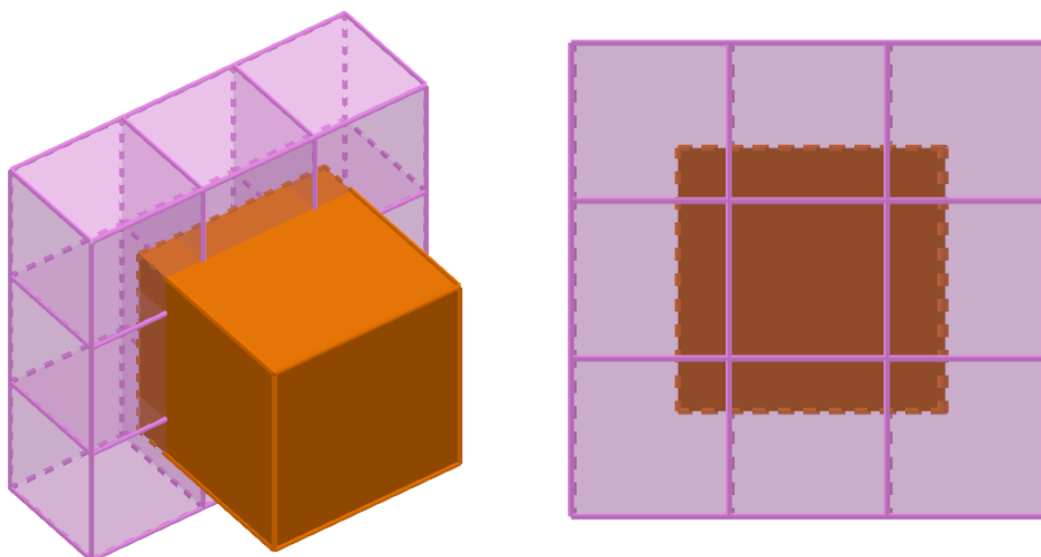


Рисунок 3.5 – Взаимодействие координационных слоёв №5, 3

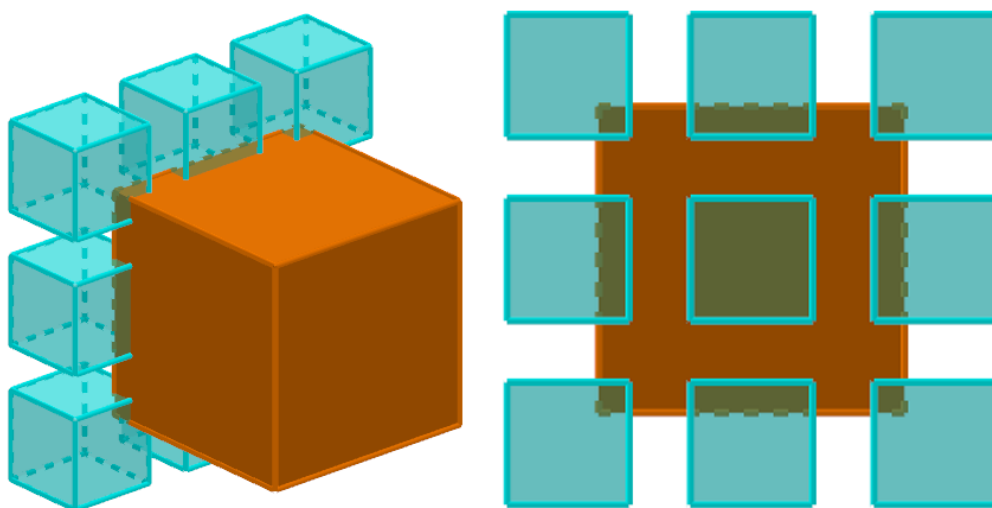


Рисунок 3.6 – Взаимодействие координационных слоёв №5, 2

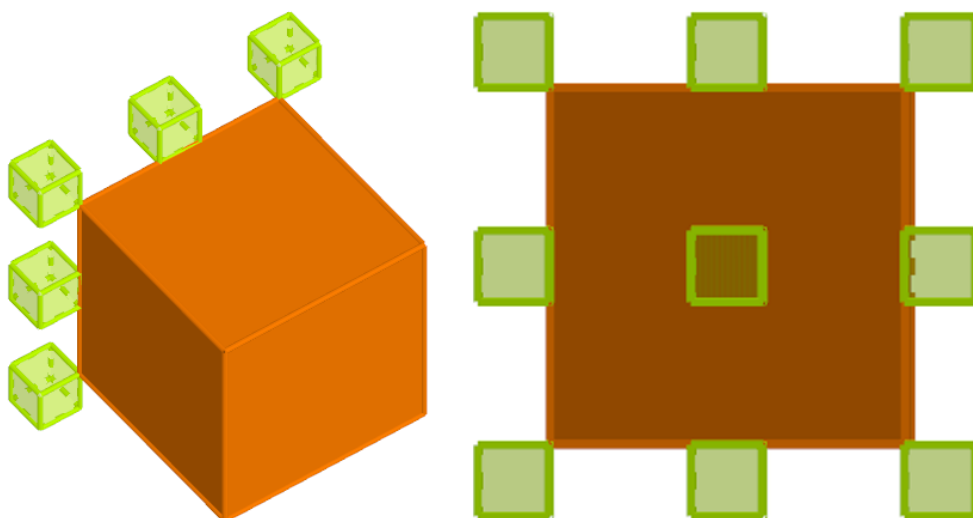


Рисунок 3.7 – Взаимодействие координационных слоёв №5, 1

Таким образом, структуру граней координационного слоя №5 можно представить в виде схемы, представленной на рис. 3.8 (использована более контрастная цветовая схема). Учитывая правила формирования координационных слоёв, становится достаточно просто определить, что координационный слой №4 будет взаимодействовать с базовым координационным слоем №3 также, как и №5. Со слоем №2 – также, как слой №5 взаимодействует со слоем №1, и не взаимодействует со слоями №0 и №1.

Не трудно заметить, что при дальнейшем увеличении номера формируемого координационного слоя, изменение взаимодействия с базовыми слоями будет идти в обратном порядке. Так слой №7 уже не будет взаимодействовать со слоем №0, слой №8 – со слоем №1 (рис. 3.9). Слой №9 будет целиком состоять из граней базового координационного слоя №3.

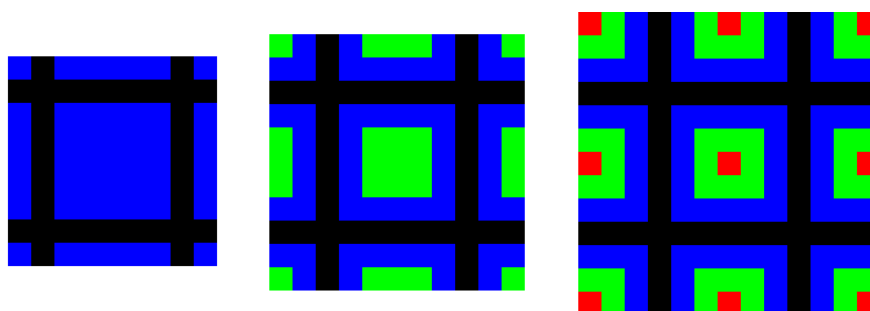


Рисунок 3.8 – Схемы координационных слоёв №4, 5, 6 (слева направо)

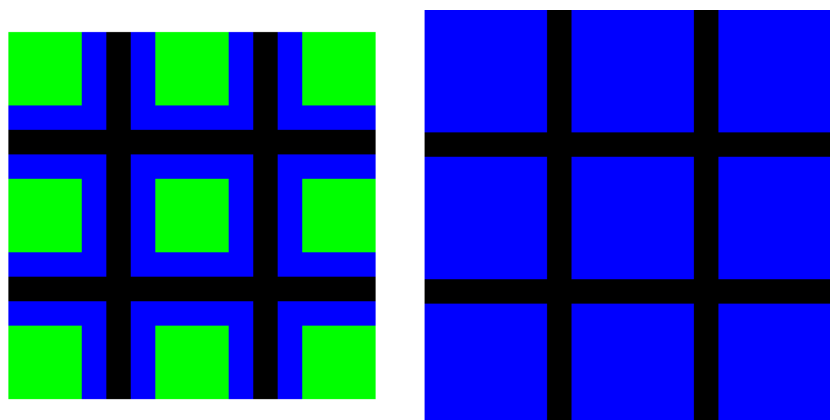


Рисунок 3.9 – Схемы координационных слоёв №7, 8 (слева направо)

Таким образом, становится ясен принцип формирования граней любого координационного слоя. Очевидно, что все грани одного и того же координационного слоя имеют одну и ту же схему и различаются только расположением конкретных элементов базовых слоёв.

Таким образом, выявление куба-генератора для некоторой решётки означает, что сколь-угодно большой фрагмент этой решётки может быть рассмотрен в виде примыкающих друг к другу одинаковых кубов с общими гранями. Выделение базового набора координационных слоёв означает, что каждый из этих кубов может рассматриваться как последовательность вложенных друг в друга концентрических кубов меньшего размера. Рассмотрение координационных слоёв, выходящих за пределы куба-генератора и базового набора, означает рассмотрение всего исследуемого пространства как последовательности вложенных друг в друга концентрических кубов.

В свою очередь, это позволяет сделать следующие выводы: 1) действительно абсолютно уникальными являются только координационные слои, составляющие базовый набор; 2) все остальные координационные слои состоят из элементов базовых координационных слоёв; 3) существуют очевидные закономерности формирования произвольного координационного слоя из базовых слоёв. Математическое описание этих закономерностей необходимо для разработки эффективного метода определения количества частиц во фрагменте решётки заданного объёма.

3.1.3 Периодичность составных координационных слоёв

Учитывая, что каждый кубический слой целиком описывается двумерной матрицей, дальнейшее рассмотрение произвольного составного координационного слоя можно свести к рассмотрению формирования только одной его грани. Построение последовательностей координационных слоёв позволяет сделать ряд следующих наблюдений.

Во-первых, схемы составных координационных слоёв периодически повторяются (см. рис. 3.8–3.10). Во-вторых, слои, занимающие одинаковые позиции в разных периодах, различаются только количеством вертикальных и горизонтальных «полос». На рис. 3.11 показаны схемы слоёв №6, 12, 18, принадлежащих к первому, второму и третьему «периодам» соответственно. Каждый из этих слоёв занимает позицию №2 в своих периодах.

Периодом будем называть последовательность координационных слоёв с номерами от $L_{min,T}$ до $L_{max,T}$, рассчитываемыми по формулам:

$$\begin{aligned} L_{min,T} &= (M+1) + 2M(T-1) = M(2T-1) + 1, \\ L_{max,T} &= M(2T-1) + 1 + 2M - 1 = M(2T+1), \end{aligned} \quad (3.3)$$

где $L_{min,T}$, $L_{max,T}$ – минимальный и максимальный номера слоёв, входящих в период T , T – номер периода, M – максимальный номер слоя в базовом наборе.

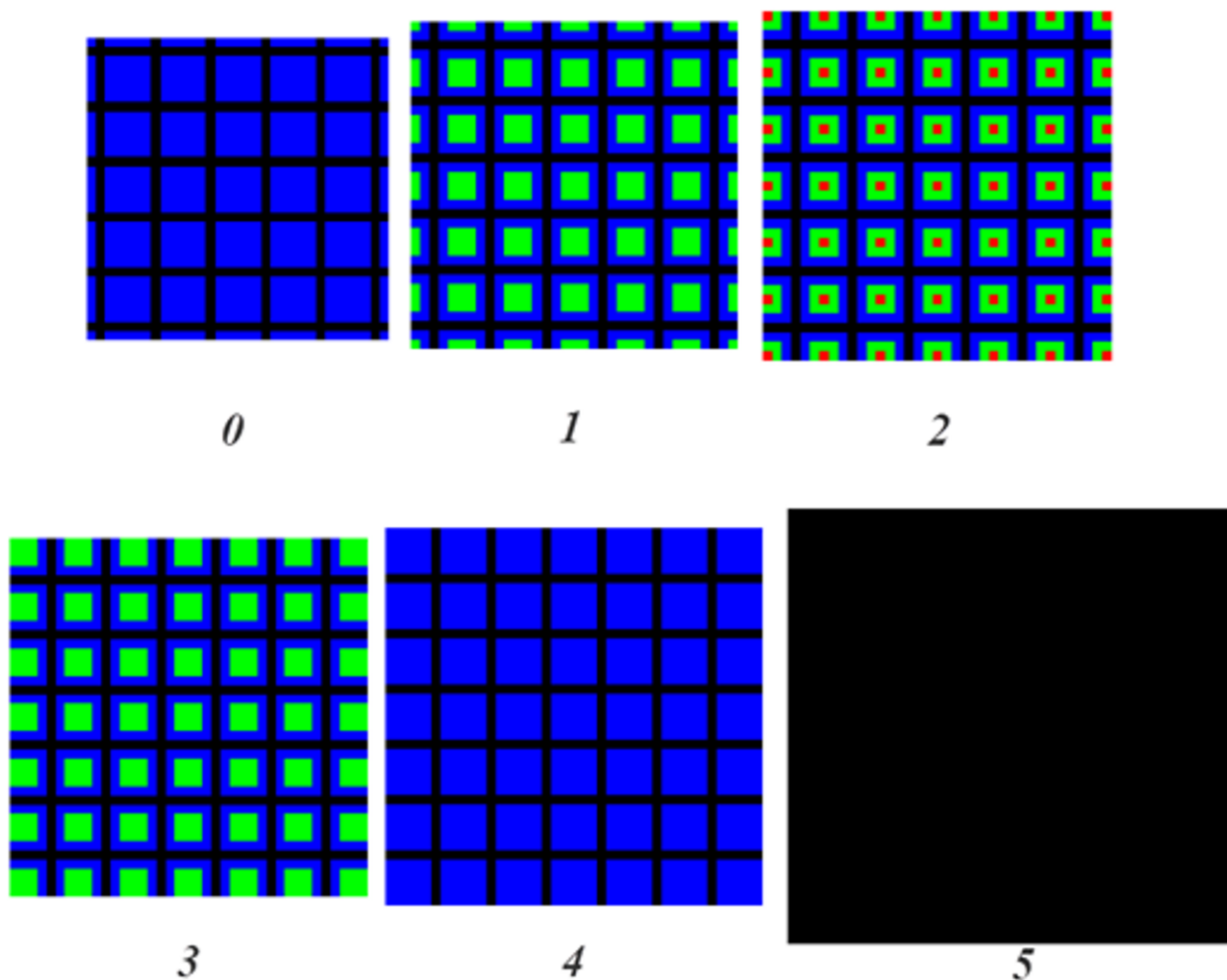


Рисунок 3.10 – Схемы слоёв №16–21 и их позиции в периоде

Очевидно, что наличие такой периодичности позволяет оптимизировать способ определения количества частиц в заданном объёме пространства. В частности, возможно заменить обращение к матрицам слоёв, относящихся к произвольному периоду, обращением к соответствующим матрицам первого периода.

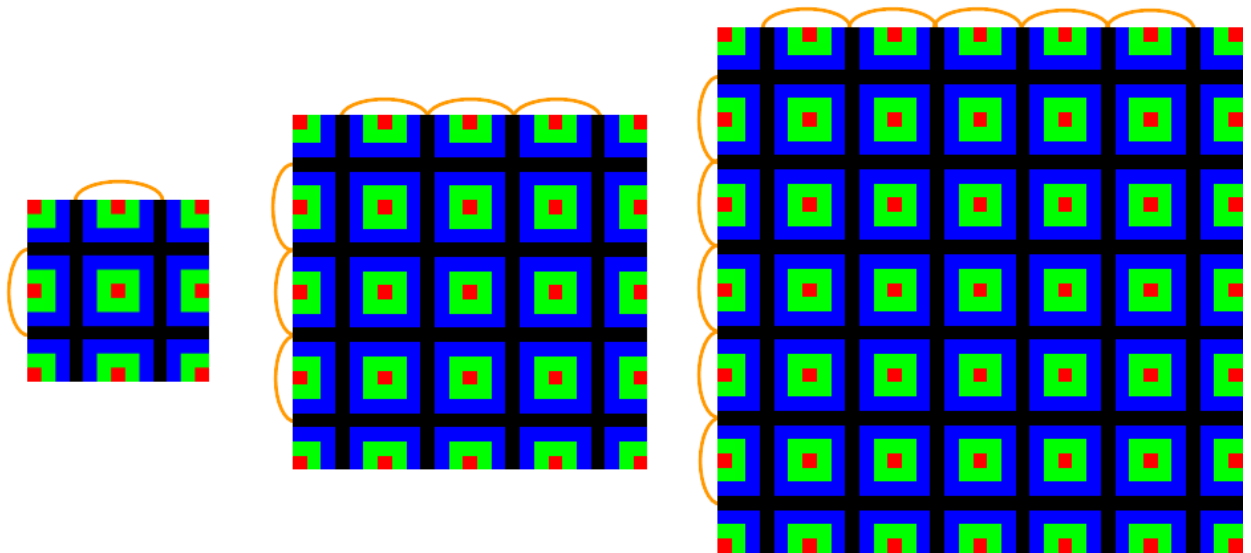


Рисунок 3.11 – Повторяющиеся вертикальные и горизонтальные «полосы» в координационных слоях №6, 12, 18 (слева на право)

При этом в контексте решения конкретных задач может быть удобно формировать матрицу нужного координационного слоя путём добавления повторяющихся «полос» в соответствующую матрицу первого периода.

3.1.4 Прямой метод определения полного количества частиц

Самым простым методом определения количества частиц в заданной области пространства будет являться прямой последовательный обход полного математического описания этой области. В частности, поэлементный обход традиционной координатной или трёхмерной бинарной матрицы. Прямой метод определения полного количества частиц в заданном объёме пространства предполагает выполнение расчёта по следующим формулам:

$$\begin{aligned}
 P &= \sum_{i=0}^I \sum_{g=0}^G \sum_{k=0}^K B_{i,g,k} , \\
 P &= \sum_{l=0}^L \sum_{g=0}^G \sum_{k=0}^K B'_{l,g,k} ,
 \end{aligned}
 \tag{3.4}$$

где P – полное количество частиц, $B_{i,g,k}$ – элемент полного трёхмерного матричного описания исследуемого фрагмента решётки, i, g, k , – индексы элементов в полном матричном описании, G и K – максимальные значения соответствующих индексов, $B'_{l,g,k}$ – элемент компактной матрицы координационного слоя l , L – наибольший номер слоя, включаемого в исследование.

Данный метод элементарен, но обладает рядом существенных недостатков. В частности, для его применения необходимо сформировать матрицу, полностью описывающую исследуемый фрагмент. Учитывая, что расчёты структурных и энергетических параметров решёток включают рассмотрение большого количества частиц, размер исходных данных численного метода также будет велик. По той же причине сам процесс формирования полного матричного описания также становится длительной ресурсоёмкой операцией.

Последующий поэлементный обход матрицы по тем же причинам тоже потребует значительных вычислительных ресурсов. Даже если при этом выполняются простые действия над элементами – их количества будет достаточно, чтобы сделать решение данной задачи длительным и ресурсоёмким.

Однако, рассмотрение некоторого фрагмента решётки в виде последовательности координационных слоёв создаёт свой контекст решения задачи определения количества частиц в заданном объёме пространства. В частности, данную задачу можно свести к расчёту суммы количеств частиц, находящихся в каждом из координационных слоёв, описывающих исследуемый фрагмент решётки. При этом периодические закономерности формирования координационных слоёв и, следовательно, их компактных матричных описаний открывают серьёзные возможности для разработки на много более эффективных методов решения поставленной задачи.

3.2 Структурный метод определения количества частиц

Проведённый анализ особенностей формирования кубических координационных слоёв, взаимосвязи базовых и составных слоёв, а также выявленные закономерности позволяют перейти к разработке метода определения полного количества частиц.

3.2.1 Расчёт полного количества частиц в матрицах первого шага

Последовательно сформулируем эффективные алгоритмы определения количества частиц в заданном объёме пространства для компактных матрич-

ных описаний первого, второго и третьего шага сжатия. Для этого сформулируем следствие из выявленной периодичности структуры координационных слоёв для компактных матриц первого шага сжатия.

Компактная матрица первого шага сжатия, занимающая некоторую позицию в первом периоде, имеет такую же структуру, что и компактные матрицы того же шага сжатия, занимающие такие же позиции в последующих периодах. Отличие между этими матрицами состоит только в количестве структурных компонентов (см. рис. 3.11).

Тогда, как уже отмечалось, если некоторая структура описывается компактными матрицами, полученными на первом шаге сжатия, то можно заменить обращение к матрице каждого исследуемого координационного слоя обращением к соответствующей ему матрице первого периода – будем называть его рабочим. При этом потребуется всего лишь кратно учесть результаты обработки отдельных структурных компонентов компактной матрицы первого периода.

Таким образом, для определения количества частиц в заданном фрагменте пространственной структуры нет необходимости воссоздавать матрицы всех затрагиваемых составных координационных слоёв. Исключение составляют координационные слои первого периода. Это уже делает данный метод расчёта более эффективным, чем описанный ранее более простой подход.

Однако возможности повышения эффективности метода определения количества частиц в заданном объёме пространства ещё не исчерпана. В частности, можно исключить необходимость перебора и отдельной обработки каждого исследуемого координационного слоя.

Для этого введём два новых понятия. Будем называть прообразами компактные матрицы, находящиеся в первом (рабочем) периоде. А образами – компактные матрицы такого же шага сжатия, занимающих такие же позиции в других периодах и имеющих такую же структуру, что и прообраз. В качестве примера можно привести компактные матрицы слоя №6 (прообраз) и слоёв №12, №18 (образы) при базовом наборе четырёх слоёв (см. рис. 3.11).

Пусть фрагмент структуры задан максимальным номером координационного слоя, находящегося в пространстве этого фрагмента. Тогда для каждой матрицы первого периода можно определить количество её образов, входящих в описание данного фрагмента.

На рис. 3.12 показано двумерное представление такого фрагмента и описывающие его координационные слои № 0–16. Слои № 0–3 образуют базовый набор. Слои № 4–9, 10–15 составляют первый и второй периоды соответственно. Слои № 16 является начальным слоем третьего периода и ограничивает исследуемый фрагмент. Номера координационных слоёв и образуемых ими периодов можно отобразить на числовой прямой (рис. 3.13).

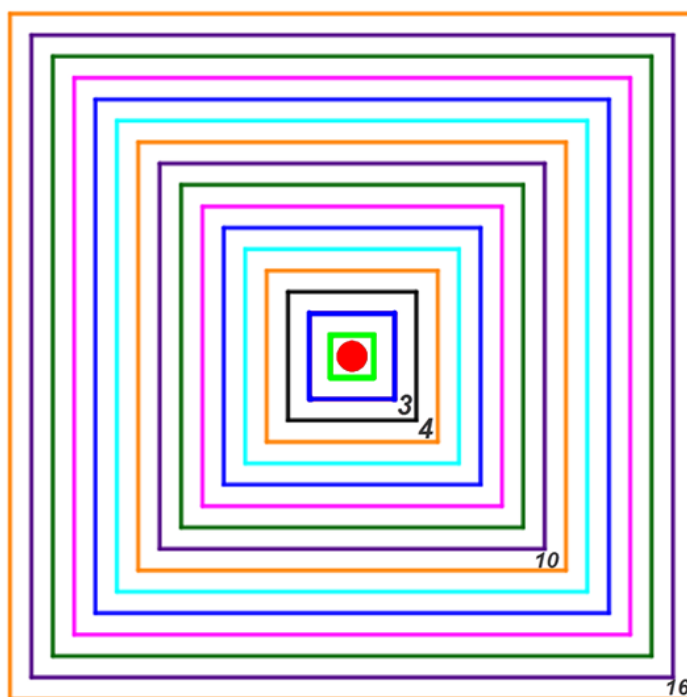


Рисунок 3.12 – Двумерное представление фрагмента структуры, описанного с помощью координационных слоёв: 3 – последний слой базового набора; 4, 10, 16 – первые слои периодов I, II и III соответственно

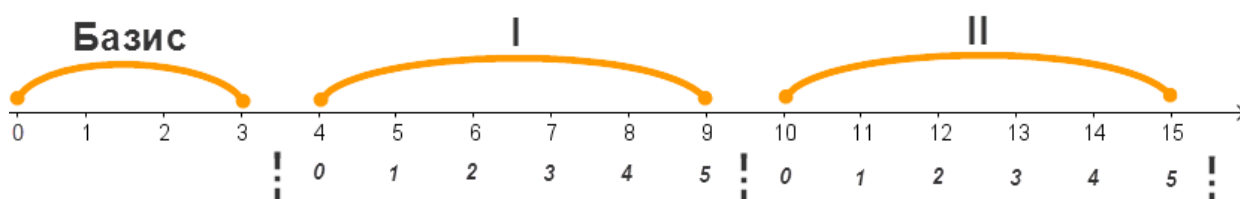


Рисунок 3.13 – Отображение последовательности периодов, координационных слоёв, и их позиций в периодах на числовой прямой

Тогда определить номер периода, которому принадлежит заданный координационный слой, позицию слоя в периоде, а также количество образов слоя L_{pro} можно по формулам:

$$\begin{aligned} T &= [(L - (M + 1)) \operatorname{div} (2M)] + 1, \\ L_{pro} &= (L - (M + 1)) \operatorname{mod} (2M), \\ n &= [(L_{max} - (M + 1 + L_{pro})) \operatorname{div} (2M)] + 1, \end{aligned} \quad (3.5)$$

где T – номер периода, которому принадлежит слой L , M – наибольший номер координационного слоя, входящего в состав базового набора, L_{pro} – номер позиции слоя L внутри периода, n – количество образов слоя L_{pro} в исследуемом объёме пространства, L_{max} – наибольший номер координационного слоя, описывающий заданный фрагмент решётки.

При этом компактную матрицу первого шага сжатия можно разбить на структурные компоненты (рис. 3.14). Границы этих компонентов легко определяются на основе количества матриц, составляющих базовый набор, и номера текущего координационного слоя.

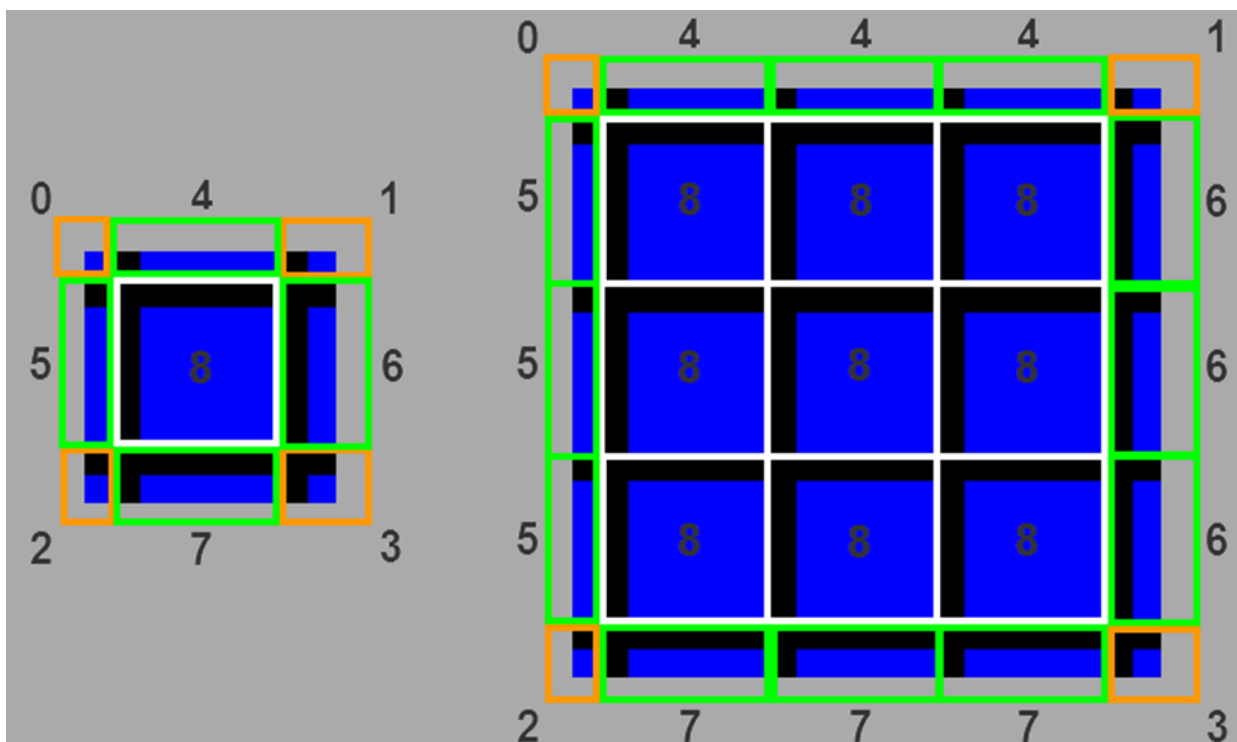


Рисунок 3.14 – Компоненты компактных матриц первого шага сжатия при базовом наборе из четырёх слоёв: слева – схема матрицы координационного слоя №4 (прообраз); справа – схема матрицы координационного слоя №10 (образ)

Например, угловой компонент №0 представляет собой квадрат с длиной стороны L' равной разности номера прообраза текущего координационного слоя L_{ProAbs} и наибольшего номера слоя M , входящего в базовый набор. Компонент №4 представляет собой прямоугольник, одна сторона которого совпадает со стороной квадрата компонента №0, а другая рассчитывается по следующей формуле:

$$W = 2(L_{ProAbs} - L') = 2M.$$

Принимая во внимание принцип формирования координационных слоёв, выявленную периодичность, анализ схем матриц, находящихся в отношениях прообраза и образов позволяет сделать следующие наблюдения. Во-первых, матрицы-образы имеют те же компоненты, что и матрица-прообраз. Во-вторых, количество компонентов разного типа в составе матрицы-образа определяется номером периода, в котором она находится (рис. 3.15).

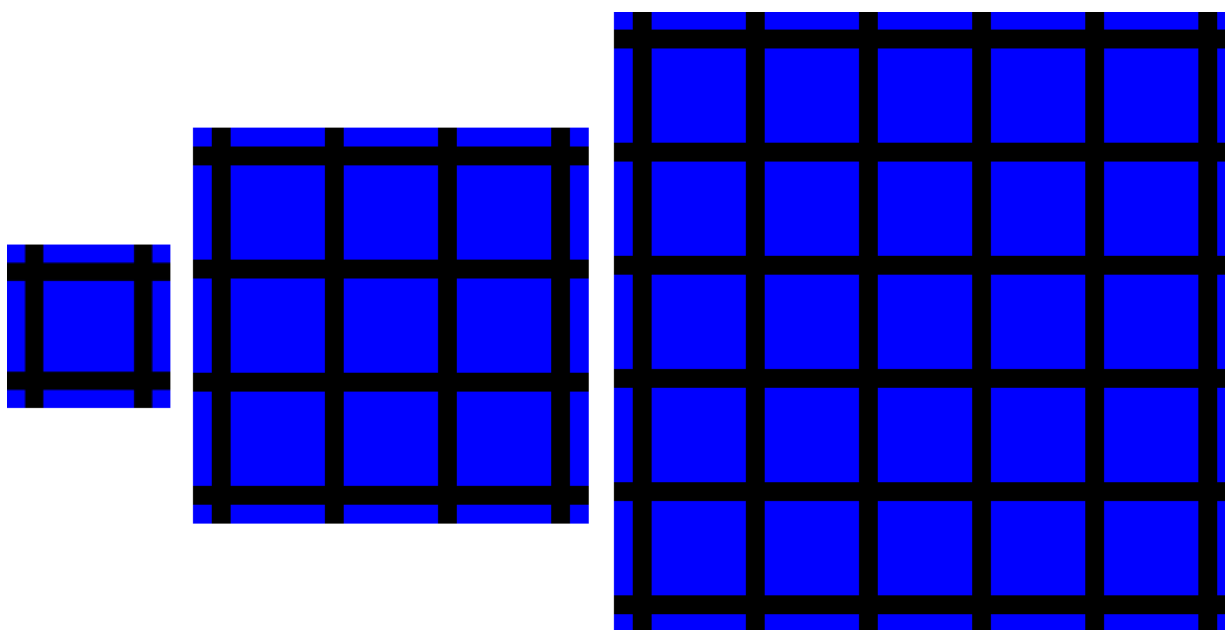


Рисунок 3.1 – Схемы компактных матриц первого шага сжатия слоёв № 4, 10, 16 (соответственно слева на право), при базовом наборе из четырёх слоёв

Построение схем компактных матриц первого шага сжатия, составляющих первые три периода, позволяет получить сведения о количестве структурных компонентов в их составе. Соответствующая информация, включающая тип структурного компонента и номера периода, представлена в таблице 3.1.

Таблица 3.1 – Количество компонентов в матрицах первого шага сжатия периодов I–III

Период	Углы (компоненты №0–3)	Рёбра (компоненты №4–7)	Центр (компонент №8)
1	1	1	1
2	1	3	9
3	1	5	25

Учитывая периодический характер структуры составных координационных слоёв, можно сделать вывод о том, что количество структурных компонентов каждого из типов напрямую зависит от номера периода и может быть рассчитано по формулам:

$$\begin{aligned}\alpha_T &= 1, \\ \beta_T &= 1 + 2(T - 1), \\ \gamma_T &= (\beta_T)^2,\end{aligned}\tag{3.6}$$

где α_T – количество угловых компонентов, β_T – количество рёберных компонентов, γ_T – количество центральных компонентов в структуре компактной матрицы первого шага сжатия периода T .

В свою очередь это позволяет определить количество частиц в конкретной матрице-образе P_L без её построения. Для этого достаточно определить количество структурных компонентов матрицы-прообраза в составе матрицы-образа по формулам (3.5), (3.6) и количество частиц в компоненте каждого типа. Затем остаётся найти сумму произведений по следующей формуле:

$$P_L = \alpha_T \cdot P_\alpha + \beta_T \cdot P_\beta + \gamma_T \cdot P_\gamma.\tag{3.7}$$

Легко заметить, что количество компонентов каждого типа в структуре матриц-образов, находящихся в разных периодах, образует простые числовые ряды. Применяя подходы теории числовых рядов, становится возможным не рассчитывать количество частиц в каждой компактной матрице, описывающей исследуемый фрагмент пространственной структуры. Вместо этого можно сразу же определять суммарное количество частиц во всех матрицах-образов для каждой конкретной матрицы-прообраза.

Для этого достаточно найти частичную сумму соответствующего ряда, представляющую собой количество компонентов данного типа во всех матрицах-образов, описывающих исследуемый фрагмент решётки. При этом должно

быть учтено количество таких же структурных компонентов в составе матрицы-прообраза.

Принимая во внимание формулы (3.6), количество компонентов каждого из типов может быть рассчитано следующим образом:

$$\begin{aligned}
 C_0 &= \sum_{T=1}^n \alpha_T = \sum_{T=1}^n 1 = n, \\
 C_1 &= \sum_{T=1}^n \beta_T = \sum_{T=1}^n (1 + 2(T - 1)) = n^2, \\
 C_2 &= \sum_{T=1}^n \gamma_T = \sum_{T=1}^n (1 + 2(T - 1))^2 = \frac{4n^3 - n}{3},
 \end{aligned} \tag{3.8}$$

где C_0 – суммарное количество угловых компонентах во всех исследуемых матрицах-образах, C_1 – суммарное количество рёберных компонентов, C_2 – суммарное количество центральных компонентов, n – количество матриц-образов данного прообраза в исследуемом фрагменте кристалла [147, 148].

Тогда общее количество частиц P , содержащееся в компактных матрицах первого шага сжатия, описывающих все исследуемые координационные слои, с учётом (3.8) можно рассчитать по формуле:

$$P = \sum_{i=0}^M P_i + \sum_{j=N+1}^{3M} \sum_{g=0}^2 (C_{g,j} \cdot P_{g,j}), \tag{3.9}$$

где P_i – количество частиц в i -ой матрице базового набора, $C_{g,j}$ – количество компонентов g -го типа во всех матрицах-образах j -го прообраза, включая сам прообраз, $P_{g,j}$ – количество частиц в структурном компоненте g -го типа j -той матрицы-прообраза. При этом P_i и $P_{g,j}$ рассчитываются с помощью прямого метода определения количества частиц.

3.2.2 Расчёт полного количества частиц в матрицах второго шага

Разработанный скоростной высокоточный метод определения количества частиц в заданном фрагменте решётки позволяет выполнять расчёты на

основе компактных матриц первого шага сжатия. Такие матрицы уже позволяют уменьшить объём вычислений в 6 раз, благодаря использованию свойств симметрии куба.

Компактные матрицы второго шага сжатия позволяют уменьшить объём вычислений ещё в четыре раза, благодаря использованию свойств симметрии квадрата. Это позволяет разработать более эффективный скоростной высокоточный метод определения количества частиц в заданном фрагменте пространственной решётки. Для его разработки проведём аналогичные рассуждения в отношении матриц второго шага сжатия.

Компактную матрицу второго шага сжатия можно разбить на структурные компоненты (рис. 3.16). Границы компонентов можно легко определить на основе количества матриц, составляющих базовый набор, и номера текущего координационного слоя.

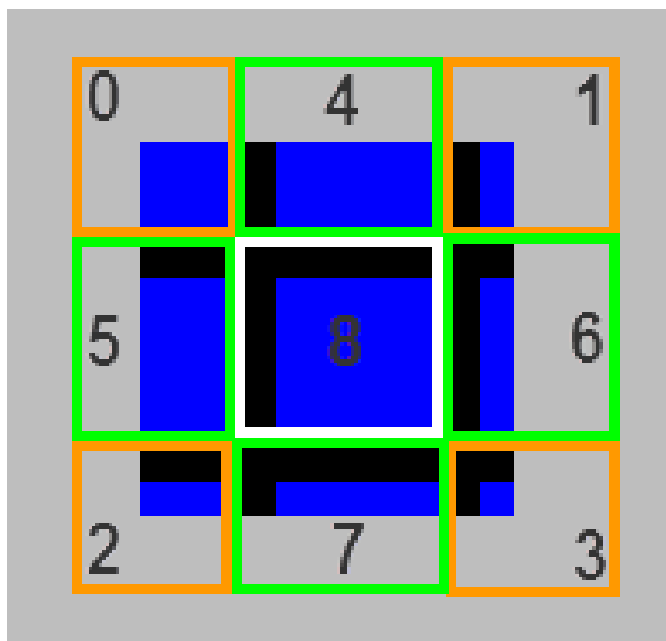


Рисунок 3.16 – Компоненты компактных матриц второго шага сжатия при базовом наборе из четырёх слоёв (прообраз)

Например, угловой компонент №0 представляет собой квадрат с длиной стороны равной номеру наибольшего слоя M , входящего в базовый набор. Компонент №4 представляет собой прямоугольник, одна из сторон которого совпадает со стороной квадрата компонента №0, а другая рассчитывается следующим образом: $W = 2M$.

Принимая во внимание принцип формирования координационных слоёв, выявленную периодичность, анализ схем матриц, находящихся в отношениях прообраза и образов позволяет сделать следующие наблюдения. Во-первых, матрицы-образы имеют те же компоненты, что и матрица-прообраз. Во-вторых, количество компонентов разного типа в составе матрицы-образа определяется номером периода, в котором она находится (рис. 3.17).

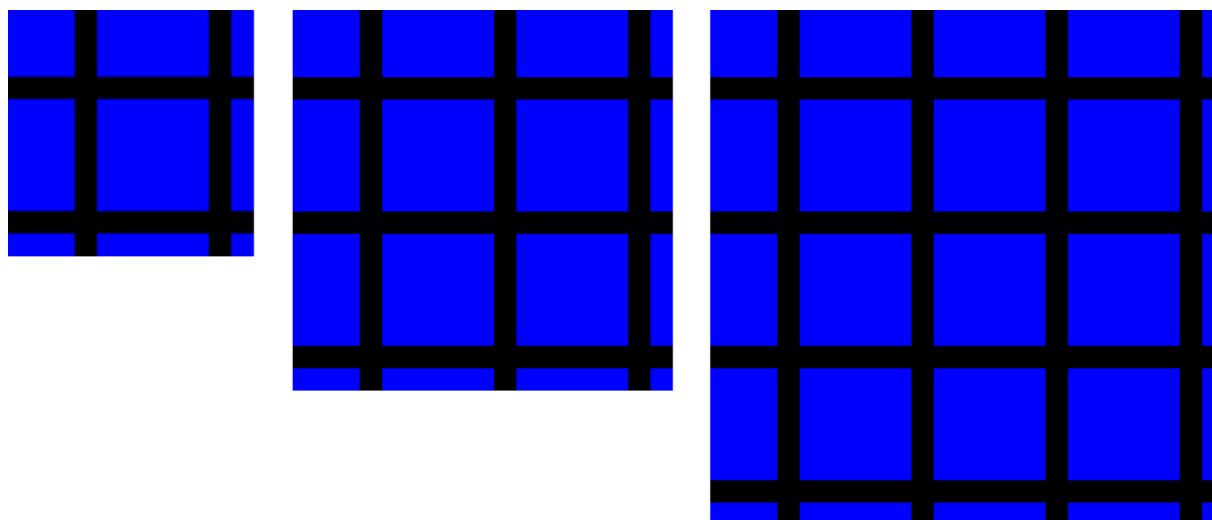


Рисунок 3.17 – Схемы компактных матриц второго шага сжатия слоёв № 10, 16, 20 (соответственно слева на право), при базовом наборе из четырёх слоёв

Построение схем компактных матриц второго шага сжатия, составляющих периоды II–IV, позволяет получить сведения о количестве структурных компонентов в их составе. Соответствующая информация, включающая тип структурного компонента и номера периода, представлена в таблице 3.2. Для удобства расчётов нумерация периодов в таблице и в последующих вычислениях начинается со второго периода.

Таблица 3.2 – Количество компонентов в матрицах второго шага сжатия периодов II–IV

Период	Углы (компоненты №0–3)	Рёбра (компоненты №4–7)	Центр (компонент №8)
1	1	1	1
2	1	2	4
3	1	3	9

Важно заметить, что анализ построенных схем компактных матриц второго шага сжатия также показал, что компактные матрицы, находящиеся в пределах первого периода, содержат не все структурные компоненты матриц

последующих периодов. Поэтому прообразами матриц второго шага сжатия будут являться матрицы, находящиеся во втором периоде (рис. 3.18). Поэтому для матриц второго шага сжатия рабочим будет являться второй период.

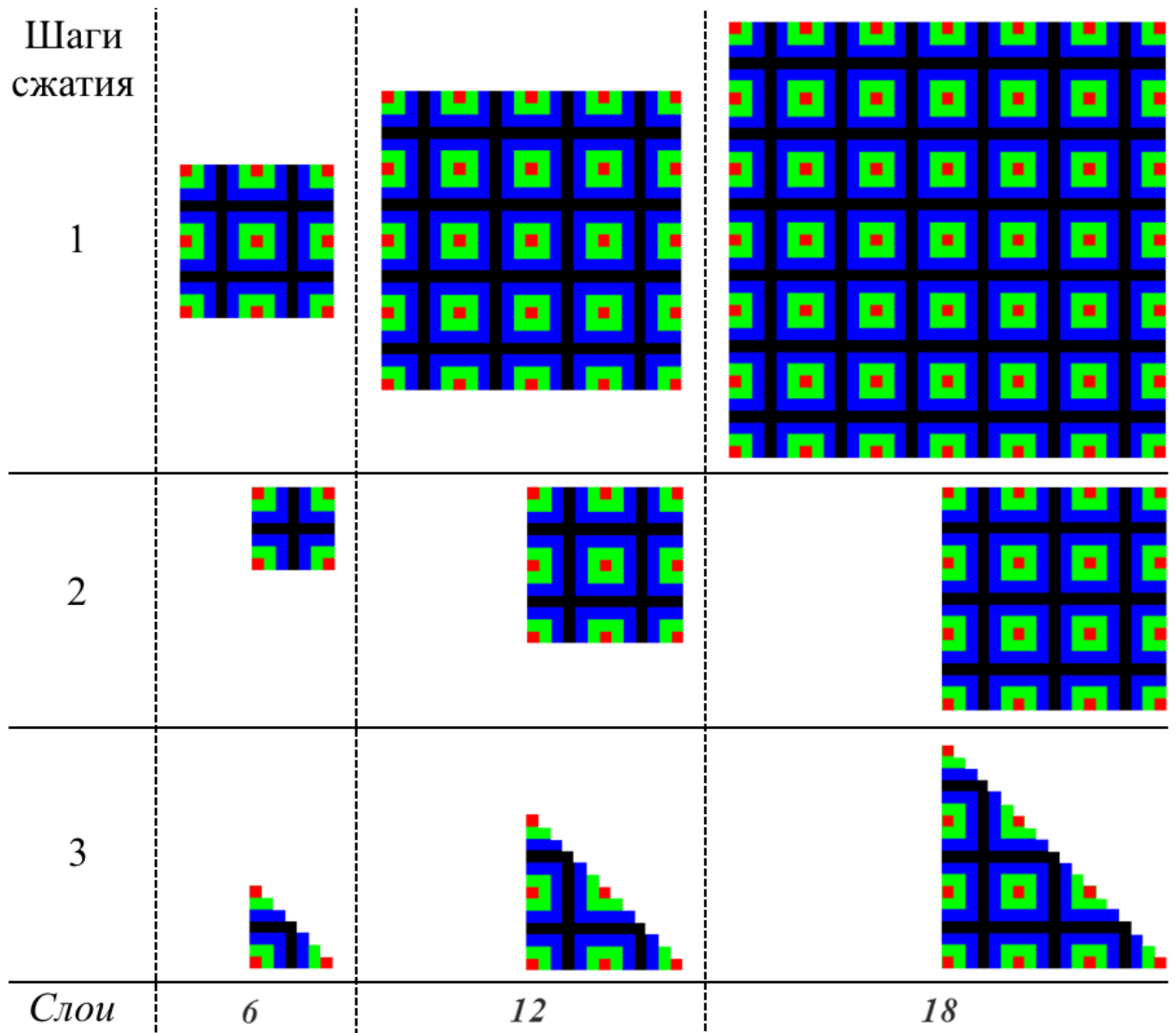


Рисунок 3.18 – Схемы матриц 1–3 шагов сжатия координационных слоёв № 6, 12, 18, принадлежащих I, II и III периодам соответственно, при базовом наборе из четырёх слоёв

Учитывая периодический характер структуры составных координационных слоёв, можно сделать вывод о том, что количество структурных компонентов каждого из типов напрямую зависит от номера периода и может быть рассчитано по формулам:

$$\begin{aligned}
 \alpha_T &= 1, \\
 \beta_T &= T, \\
 \gamma_T &= (\beta_T)^2.
 \end{aligned}
 \tag{3.10}$$

Как и в случае с компактными матрицами первого шага сжатия, это позволяет определить количество частиц в конкретной матрице-образе P_L без её построения. Сделать это возможно с помощью формул (3.5), (3.7) и (3.10).

Легко заметить, что количество компонентов каждого типа в структуре матриц-образов, находящихся в разных периодах, также образуют простые числовые ряды. Применяя подходы теории числовых рядов, становится возможным сразу же определять суммарное количество частиц во всех матрицах-образах для каждой конкретной матрицы-прообраза.

Для этого достаточно найти частичную сумму соответствующего ряда, представляющую собой количество компонентов данного типа во всех матрицах-образах, описывающих исследуемый фрагмент решётки. При этом должно быть учтено количество таких же структурных компонентов в составе матрицы-прообраза.

Принимая во внимание формулы (3.10), количество компонентов каждого из типов может быть рассчитано следующим образом:

$$\begin{aligned} C_0 &= \sum_{T=1}^n \alpha_T = \sum_{T=1}^n 1 = n, \\ C_1 &= \sum_{T=1}^n \beta_T = \sum_{T=1}^n T = \frac{n^2 + n}{2}, \\ C_2 &= \sum_{T=1}^n \gamma_T = \sum_{T=1}^n T^2 = \frac{n(n+1)(2n+1)}{6}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Тогда общее количество частиц P , содержащееся в компактных матрицах второго шага сжатия, описывающих все исследуемые координационные слои, с учётом (3.11) можно рассчитать по формуле:

$$P = \sum_{i=0}^M P_i + \sum_{k=M+1}^{3M} P_k + \sum_{j=3M+1}^{5M} \sum_{g=0}^2 (C_{g,j} \cdot P_{g,j}), \quad (3.12)$$

где P_i – количество частиц в i -ой матрице базового набора, P_k – количество частиц в k -ой матрице первого периода, $C_{g,j}$ – количество компонентов g -го

типа во всех матрицах-образах j -го прообраза, включая сам прообраз, $P_{g,j}$ – количество частиц в структурном компоненте g -го типа j -той матрицы-прообраза. При этом P_i , P_k и $P_{g,j}$ рассчитываются с помощью прямого метода определения количества частиц.

3.2.3 Расчёт полного количества частиц в матрицах третьего шага

Теперь разработанный скоростной высокоточный метод определения количества частиц в заданном фрагменте решётки позволяет выполнять расчёты на основе компактных матриц второго шага сжатия. Что позволяет уменьшить объём вычислений в 24 раза, благодаря использованию свойств симметрии куба и квадрата.

Компактные матрицы третьего шага сжатия позволяют уменьшить объём вычислений ещё в два раза, благодаря использованию свойств симметрии квадрата. Это позволяет разработать ещё более эффективный скоростной высокоточный метод определения количества частиц в заданном фрагменте пространственной решётки. Для его разработки проведём рассуждения в отношении матриц второго шага сжатия аналогичные представленным ранее.

Компактную матрицу третьего шага сжатия можно разбить на структурные компоненты (рис. 3.19). Границы компонентов можно легко определить на основе количества матриц, составляющих базовый набор, и номера текущего координационного слоя.

Например, угловой компонент №0 представляет собой квадрат с длиной стороны равной наибольшему номеру слоя M , входящего в базовый набор. Компонент №3 представляет собой прямоугольник, одна сторона которого совпадает со стороной квадрата компонента №0, а другая рассчитывается идентично соответствующей стороне структурного компонента №4 компактной матрицы второго шага.

Анализ построенных схем компактных матриц третьего шага сжатия также показал, что компактные матрицы, находящиеся в пределах первого и второго периодов, содержат не все структурные компоненты матриц последу-

ющих периодов. Поэтому прообразами матриц третьего шага сжатия будут являться матрицы, находящиеся в третьем периоде (см. рис. 3.18). Поэтому для матриц третьего шага сжатия рабочим будет являться третий период.

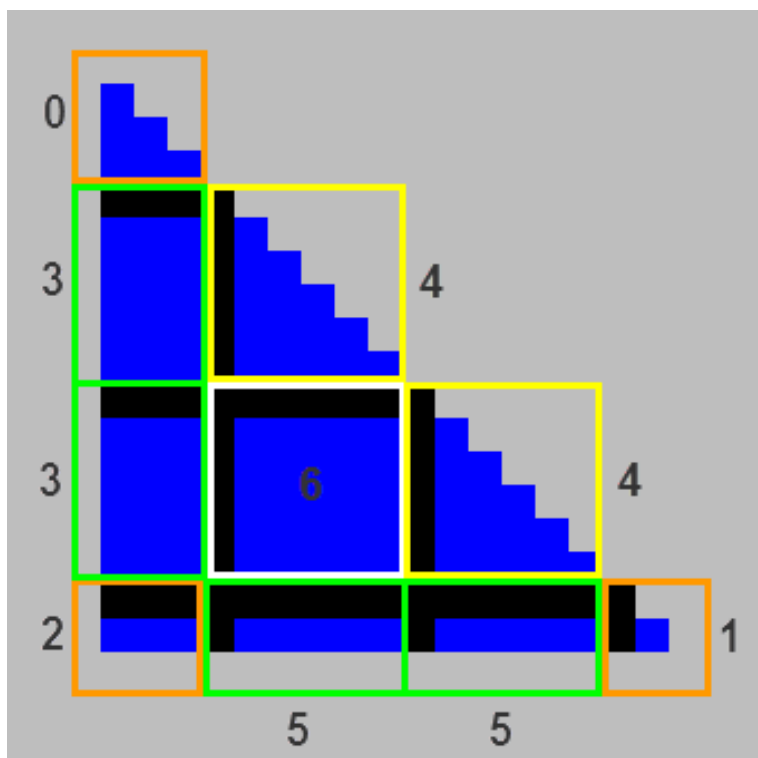


Рисунок 3.19 – Компоненты компактных матриц третьего шага сжатия при базовом наборе из четырёх слоёв (прообраз)

Принимая во внимание принцип формирования координационных слоёв, выявленную периодичность, анализ схем матриц, находящихся в отношении прообраза и образов позволяет сделать следующие наблюдения. Во-первых, матрицы-образы имеют те же компоненты, что и матрица-прообраз. Во-вторых, количество компонентов разного типа в составе матрицы-образа определяется номером периода, в котором она находится (рис. 3.20).

Построение схем компактных матриц второго шага сжатия, составляющих периоды III–V, позволяет получить сведения о количестве структурных компонентов в их составе. Соответствующая информация, включающая тип структурного компонента и номера периода, представлена в таблице 3.3. Для удобства расчётов нумерация периодов в таблице и в последующих вычислениях начинается со третьего периода.

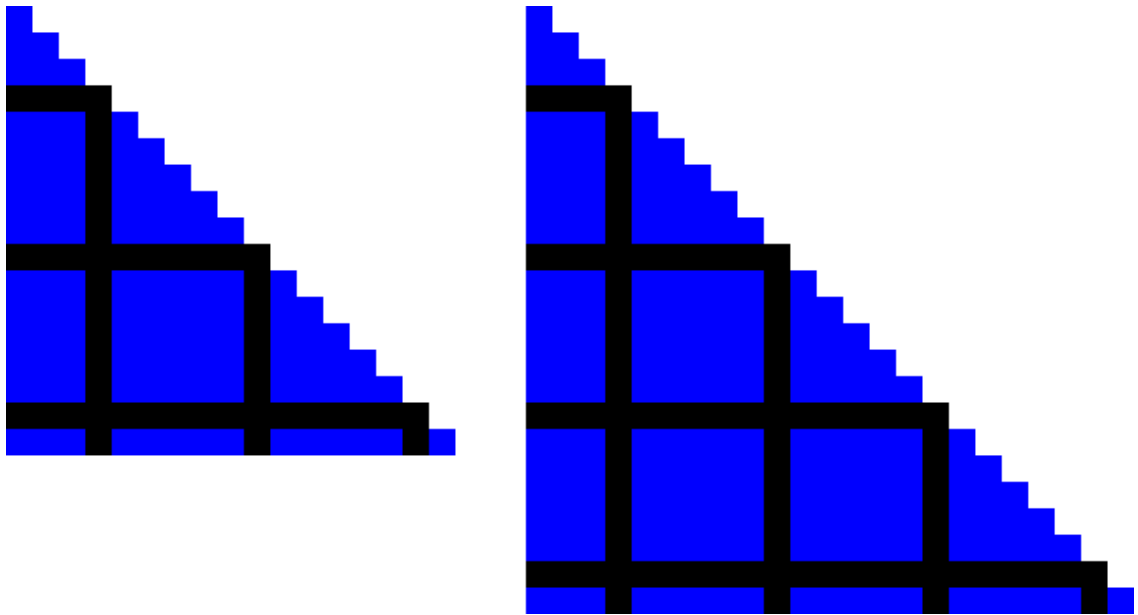


Рисунок 3.20 – Схемы компактных матриц третьего шага сжатия слоёв № 16, 20 (соответственно слева на право), при базовом наборе из четырёх слоёв

Таблица 3.3 – Количество компонентов в матрицах третьего шага сжатия периодов III–V

Период	Углы (компоненты №0–3)	Рёбра (компоненты №3–5)	Центр (компонент №6)
1	1	2	1
2	1	3	3
3	1	4	6

Следует заметить, что количество центральных компонентов при рассмотрении треугольных компактных матриц уже само по себе изменяется как сумма ряда от периода к периоду. Учитывая периодический характер структуры составных координационных слоёв, можно сделать вывод о том, что количество структурных компонентов каждого из типов напрямую зависит от номера периода и может быть рассчитано по формулам:

$$\begin{aligned}
 \alpha_T &= 1, \\
 \beta_T &= T+1; \\
 \gamma_T &= \sum_{j=1}^T j = \frac{T^2 + T}{2}.
 \end{aligned}
 \tag{3.13}$$

Как и в случае с компактными матрицами первых двух шагов сжатия, это позволяет определить количество частиц в конкретной матрице-образе P_L без её построения. Сделать это возможно с помощью формул (3.5), (3.7), (3.13).

Легко заметить, что количество компонентов каждого типа в структуре матриц-образов, находящихся в разных периодах, также образуют простые числовые ряды. Применяя подходы теории числовых рядов, становится возможным не рассчитывать количество частиц в каждой компактной матрице, описывающей исследуемый фрагмент пространственной структуры. Вместо этого можно сразу же определять суммарное количество частиц во всех матрицах-образах для каждой конкретной матрицы-прообраза.

Для этого достаточно найти частичную сумму соответствующего ряда, представляющую собой количество компонентов данного типа во всех матрицах-образах, описывающих исследуемый фрагмент решётки. При этом должно быть учтено количество таких же структурных компонентов в составе матрицы-прообраза.

Принимая во внимание формулы (3.13), количество компонентов каждого из типов может быть рассчитано следующим образом:

$$\begin{aligned}
 C_0 &= \sum_{T=1}^n \alpha_T = \sum_{T=1}^n 1 = n, \\
 C_1 &= \sum_{T=1}^n \beta_T = \sum_{T=1}^n (T + 1) = \frac{n^2 + n}{2} + n, \\
 C_2 &= \sum_{T=1}^n \gamma_T = \sum_{T=1}^n \sum_{j=1}^T j = \sum_{T=1}^n \frac{T^2 + T}{2} = \frac{n(n + 1)(n + 2)}{6}.
 \end{aligned} \tag{3.14}$$

Тогда общее количество частиц P , содержащееся в компактных матрицах второго шага сжатия, описывающих все исследуемые координационные слои, с учётом (3.14) можно рассчитать по формуле:

$$P = \sum_{i=0}^M P_i + \sum_{k=M+1}^{3M} P_k + \sum_{m=3M+1}^{5M} P_m + \sum_{j=5M+1}^{7M} \sum_{g=0}^2 (C_{g,j} \cdot P_{g,j}), \tag{3.15}$$

где P_i – количество частиц в i -ой матрице базового набора, P_k – количество частиц в k -ой матрице первого периода, P_m – количество частиц в m -ой матрице второго периода, $C_{g,j}$ – количество компонентов g -го типа во всех матрицах-образах j -го прообраза, включая сам прообраз, $P_{g,j}$ – количество частиц в

структурном компоненте g -го типа j -той матрицы-прообраза. При этом значения P_i , P_k , P_m и $P_{g,j}$ рассчитываются с помощью прямого метода определения количества частиц.

Таким образом, разработан метод определения количества частиц в заданном фрагменте пространственной решётки (формулы (3.5), (3.12) – (3.15)). Данный метод принимает в качестве исходных данных компактную матричную модель, формируемую в соответствии с предлагаемой версией метода математического описания, представленную во второй главе.

Благодаря сжатию исходных данных, происходящему во время построения компактной матричной модели, предложенный метод определения количества частиц должен обладать высоким быстродействием и низкими требованиями к вычислительным ресурсам. То есть быть более эффективным, чем рассмотренный метод прямого подсчёта.

3.2.4 Расчёт эффективного количества частиц

Расчёт некоторых структурных и энергетических параметров пространственных решёток обладает своей спецификой. В частности, канонический расчёт значения коэффициента компактности предполагает использование эффективного количества частиц. То есть, если некоторая частица лежит на поверхности исследуемого фрагмента решётки, то при расчётах должна учитываться только та её часть, которая принадлежит внутреннему пространству данного фрагмента.

В то же время, разработанный скоростной метод определения количества частиц позволяет рассчитать не эффективное, а полное количество частиц. То есть предложенный метод рассматривает все частицы как целиком находящиеся в пространстве исследуемого фрагмента.

Использование в расчётах полного количества частиц будет вносить заметные искажения в результаты вычислений. При этом с увеличением размеров исследуемых фрагментов такое искажение будет только возрастать, так как будет увеличиваться площадь поверхности фрагментов, а значит и количество частиц, не полностью находящихся внутри них.

Таким образом, необходимо разработать метод определения эффективного количества частиц в заданном объёме пространства на основе их полного количества и компактной матричной модели. Данный метод должен быть прост, позволять производить расчёты с высокими скоростью и точностью, чтобы не нивелировать соответствующие характеристики предложенного метода определения полного количества частиц. Для решения этой задачи необходимо выполнить дополнительный анализ используемых пространственных структур, абстракций и методов.

При детальном рассмотрении процесса формирования трёхмерного матричного описания куба-генератора обнаруживается следующая особенность. Шаг сетки, использованной для получения трёхмерной бинарной матрицы, может быть меньше величины межъядерного расстояния. То есть, меньше радиусов сфер, соответствующих частицам в модели укладки шаров.

Это означает, что при исследовании фрагмента решётки будут встречаться сферы, соответствующие частицам, находящимся непосредственно на поверхности, а также находящимся на небольшом удалении от поверхности. Такие сферы будут лишь частично принадлежать внутреннему пространству заданного фрагмента. А значит могут стать причиной искажений в результатах дальнейших расчётов.

Однако, особый учёт сфер, не лежащих на поверхности исследуемого фрагмента, является излишним. Легко заметить, что части сфер, выходящие за пределы фрагмента у одной его грани, симметрично входят в его внутреннее пространство у противоположной грани (рис. 3.21).

Таким образом учёт фрагментов сфер, находящихся близко к его поверхности и частично выступающих за его пределы, в качестве полных сфер оказывается скомпенсированным. Поэтому данная особенность источником искажений в результатах дальнейших расчётов являться не может.

Тогда остаётся вторая особенность моделирования пространственных решёток с помощью координационных слоёв и предложенного метода опреде-

ления количества частиц. Данная особенность заключается в том, что разработанный метод не учитывает принадлежность частиц ко внутреннему пространству кристалла или же его поверхности.



Рисунок 3.21 Принцип компенсации объёма фрагментов сфер, находящихся рядом с поверхностью исследуемого фрагмента решётки

В частности, все координационные слои в ходе выполнения расчётов рассматриваются как равноправные и обрабатываются одинаково. Именно поэтому предложенный скоростной метод даёт полное, а не эффективное количество частиц в качестве результата.

Это означает, что существует два способа решения возникшей проблемы: 1) изменить сам метод расчёта, введя особую обработку последнего исследуемого координационного слоя, 2) разработать метод, с помощью которого можно из полного количества частиц получать эффективное.

Изменение метода расчёта неизбежно приведёт к его усложнению. Также стоит иметь в виду, что для расчётов тех или иных параметров решёток может требоваться именно полное количество частиц. Значит текущую версию скоростного метода определения количества частиц в заданном фрагменте решётки имеет смысл оставить без изменений, и разработать метод получения эффективного из полного количества частиц.

Рассмотрим подробнее различие между способами расчёта полного и эффективного количества частиц на примере фрагмента примитивной кубической решётки (рис. 3.22).

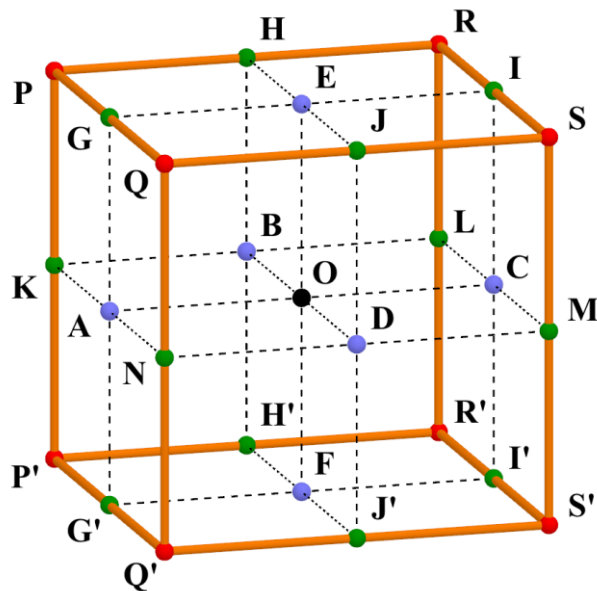


Рисунок 3.22 – Фрагмент примитивной кубической решётки

В данном примере частицы располагаются в центрах граней (A, B, C, D, E, F), серединах рёбер ($G, G', H, H', I, I', J, J', K, L, M, N$), вершинах ($P, P', R, R', S, S', Q, Q'$) и в центре (O) представленного куба. Полное количество частиц для данного фрагмента решётки равно 27.

Расчёт эффективного количества частиц выполняется по следующим правилам:

1. только половина каждой частицы, находящейся на грани куба, принадлежит пространству исследуемого фрагмента;
2. только одна четвёртая каждой частицы, находящейся на ребре куба, принадлежит пространству исследуемого фрагмента;
3. только одна восьмая каждой частицы, находящейся в вершине куба, принадлежит пространству исследуемого фрагмента;
4. остальные частицы полностью принадлежат пространству исследуемого фрагмента.

Соответственно, эффективное количество частиц P_{ef} в исследуемом фрагменте решётки можно рассчитать по формуле:

$$P_{ef} = \frac{1}{2} \cdot P_{fcs} + \frac{1}{4} \cdot P_{edg} + \frac{1}{8} \cdot P_{vrt} + 1 \cdot P_{ins}, \quad (3.16)$$

где P_{fcs} , P_{edg} , P_{vrt} , P_{ins} – это количество частиц, находящихся на гранях, рёбрах, в вершинах и во внутреннем пространстве исследуемого фрагмента решётки.

Тогда эффективное количество частиц для фрагмента решётки, представленного на рис. 3.22 будет равно:

$$P_{ef} = \frac{1}{2} \cdot 6 + \frac{1}{4} \cdot 12 + \frac{1}{8} \cdot 8 + 1 \cdot 1 = 8.$$

Как уже отмечалось, предложенный метод определения полного количества частиц в заданном фрагменте решётки учёл все частицы, находящиеся на поверхности целиком. То есть полное количество частиц может быть представлено в виде суммы:

$$P = 1 \cdot P_{fcs} + 1 \cdot P_{edg} + 1 \cdot P_{vrt} + 1 \cdot P_{ins}.$$

Тогда, очевидно, получить эффективное количество частиц из полного можно путём вычитания из последнего специальной поправки P_{crt} :

$$P_{crt} = \frac{1}{2} \cdot P_{fcs} + \frac{3}{4} \cdot P_{edg} + \frac{7}{8} \cdot P_{vrt}, \quad (3.17)$$

$$P_{ef} = P - P_{crt}.$$

Для фрагмента решётки, приведённого на рис. 3.22, значение данной поправки будет равно:

$$P_{crt} = \frac{1}{2} \cdot 6 + \frac{3}{4} \cdot 12 + \frac{7}{8} \cdot 8 = 19.$$

Откуда эффективное количество частиц для того же фрагмента решётки:

$$P_{ef} = 27 - 19 = 8.$$

Количество частиц каждого типа, расположенных на поверхности исследуемого фрагмента, можно определить на основе компактной матрицы старшего координационного слоя. Это означает, что можно также использовать её матрицу-прообраз, основываясь на тех же соображениях и применяя тот же подход, что и в методе определения полного количества частиц.

В частности, анализ способа формирования и структуры компактной матриц третьего шага сжатия позволяет сделать следующий вывод. Такие матрицы содержат информацию о количестве частиц, располагающихся в вершинах соответствующего кубического координационного слоя, в сегменте *A*. На рёбрах – в сегменте *B*. На гранях – в сегменте *C* (рис. 3.23). При чём ширина и высота сегмента *A* всегда равна единице.

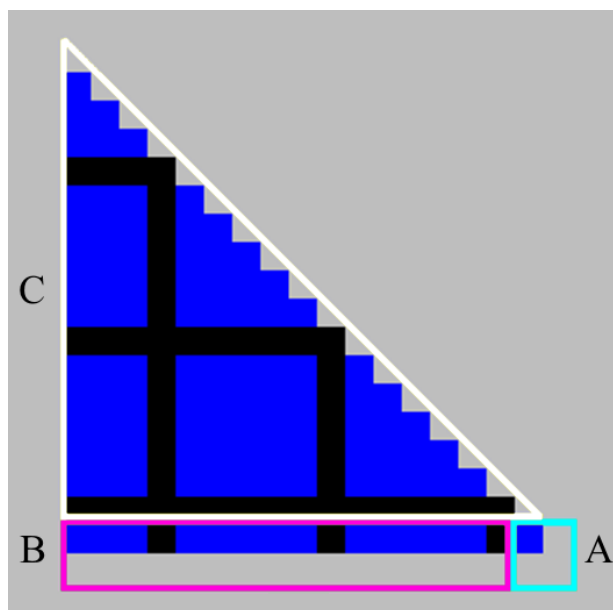


Рисунок 3.23 – Сегменты компактной матрицы третьего шага сжатия, содержащие информацию о количестве частиц в вершинах (A), на рёбрах (B), на гранях (C)

Совмещая наложением границы структурных компонентов (рис. 3.19) и сегментов (рис. 3.23) компактных матриц третьего шага сжатия, можно определить отношения между ними (рис. 3.24). В частности, сегмент A содержит часть элементов структурного компонента №1. Сегмент B содержит все элементы структурных компонентов №2 и 5, а также часть элементов компонента №1. Сегмент C содержит все элементы компонентов №0, 3, 4, 6, а также часть элементов структурных компонентов №1, 2 и 5.

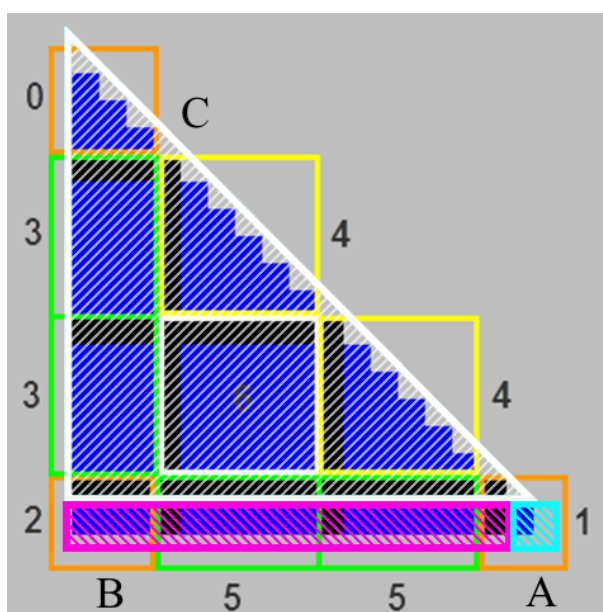


Рисунок 3.24 – Соотношение структурных компонентов и сегментов компактной матрицы третьего шага сжатия

Учитывая периодичность структуры, описанную в таблице 3.3 и в выражениях (3.13), количество частиц в каждом из сегментов компактной матрицы третьего шага сжатия может быть рассчитано по следующим выражениям:

$$P_{fcs} = (P_{C,0} + P_{C,1} + P_{C,2}) + (P_{C,3} + P_{C,4} + P_{C,5})(T + 1) + P_{C,6} \cdot \frac{T(T + 1)}{2}, \quad (3.18)$$

$$P_{edg} = (P_{B,1} + P_{B,2}) + P_{B,5}(T + 1),$$

$$P_{vrt} = P_{A,1},$$

где T – период, к которому принадлежит последний координационный слой, $P_{A,1}$, $P_{B,1}$, $P_{B,2}$, $P_{B,5}$, $P_{C,0}$, $P_{C,1}$, $P_{C,2}$, $P_{C,3}$, $P_{C,4}$, $P_{C,5}$, $P_{C,6}$ – количество частиц в соответствующих фрагментах структурных компонентов №1–6, находящихся в составе сегментов А–С.

Очевидно, что подобные рассуждения позволяют построить схемы сегментации и аналогичные выражения для компактных матрицы первого и второго шага сжатия. Однако использование матриц третьего шага позволяет выполнять соответствующие расчёты наиболее быстро, благодаря наименьшему количеству элементов в матрицах данного типа.

Таким образом, разработан метод расчёта, позволяющий определить эффективное количество частиц в заданном фрагменте пространственной решётки. Данный метод использует в качестве исходных данных полное количество частиц и компактную матричную модель решётки. При этом данный метод основан на тех же подходах, что и предложенный ранее метод определения полного количества частиц, потому также должен обладать высокими скоростью и точностью.

Разработанный метод позволяет быстро и с высокой точностью рассчитывать количество частиц в заданном объёме пространства. Данный метод целиком и полностью основывается на особенностях структур координационных слоёв и компактных матриц. Поэтому будем называть его структурным методом определения количества частиц.

3.3 Оценка эффективности структурного метода

Для практического применения, а также проверки скорости и точности разработанных моделей и методов, был разработан пакет прикладных программ «Оранжевая». Это позволяет выполнить теоретический анализ их эффективности. После чего выполнить серию вычислительных экспериментов и практических расчётов значений коэффициентов компактности и величин межъядерного расстояния для различных веществ и соединений с соответствующей пространственной структурой.

3.3.1 Теоретическая оценка эффективности

Рассмотрим предложенный в данной главе метод расчёта коэффициента компактности по заданному фрагменту исследуемой решётки. Его работу можно представить в виде последовательности вычислений (рис. 3.25).

То есть, сначала выполняется расчёт полного количества частиц на основе компактной матричной модели по следующим формулам: если используется набор матриц первого шага сжатия – (3.8), (3.9); если используется набор матриц второго шага сжатия – (3.11), (3.12); если используется набор матриц третьего шага сжатия – (3.14), (3.15); а также (3.5).

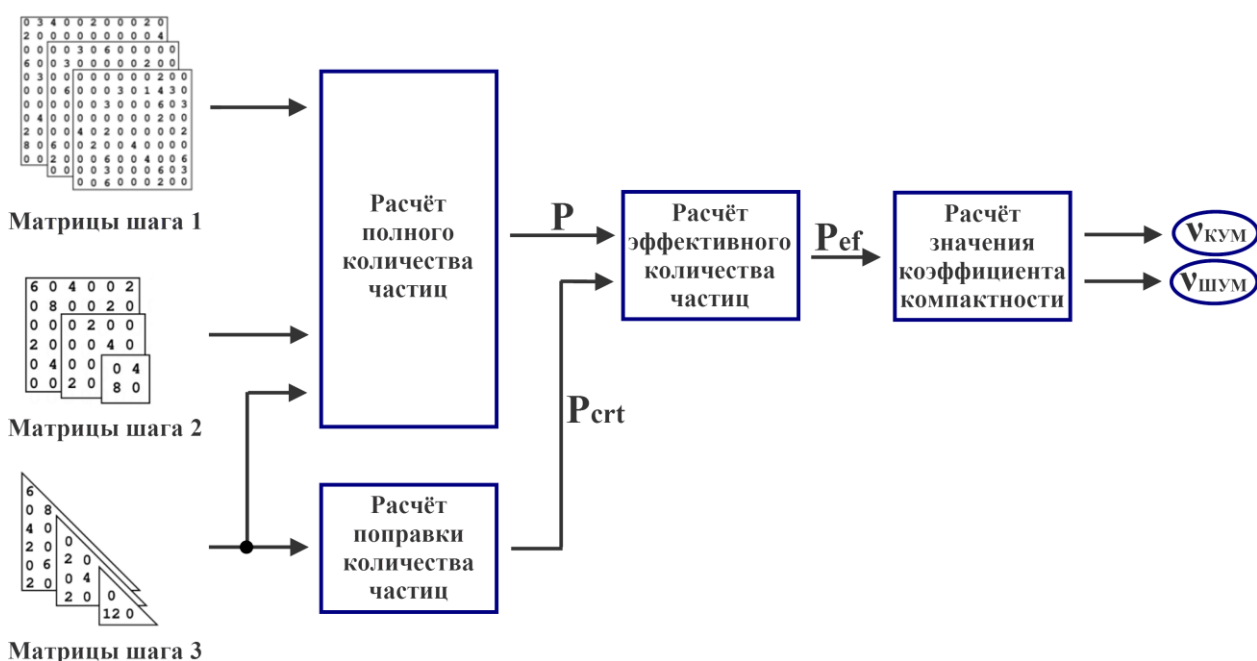


Рисунок 3.25 – Последовательность выполнения расчётов согласно предложенному структурному численному методу

После чего выполняется расчёт эффективного количества частиц в исследуемом фрагменте решётки по формулам (3.17) и (3.18). Затем определяется значение коэффициента плотности пространственной упаковки по следующим формулам: если коэффициент должен быть рассчитан по модели укладки кубов – (3.1) и (3.2); если коэффициент должен быть рассчитан по модели укладки шаров – (1.1).

Рассмотрение соответствующих формул позволяет заключить, что почти весь объём вычислений выполняется при расчёте полного количества частиц в заданном фрагменте решётки. Поэтому достаточно точная теоретическая оценка эффективности предложенного метода может быть дана на основе анализа соответствующей части структурного численного метода.

В частности, анализ формул (3.8), (3.9), (3.11), (3.12), (3.14) и (3.15), по которым выполняется расчёт полного количества частиц, позволяет заметить, что структурный метод предполагает поэлементный обход матриц некоторых координационных слоёв. В частности, таким способом всегда обрабатываются матрицы базовых слоёв, а также матрицы нескольких периодов: если расчёт выполняется на основе матриц первого шага сжатия – первого периода; если расчёт выполняется на основе матриц второго шага сжатия – первых двух периодов; если расчёт выполняется на основе матриц третьего шага сжатия – первых трёх периодов. Затем полученные результаты используются в небольшом объёме простых вычислений.

Таким образом, во время выполнения вычислений, согласно предложенному структурному методу, количество совершаемых операций будет расти в зависимости от максимального номера координационного слоя, включённого в исследование. Однако так будет происходить только до обработки некоторого порогового слоя – слоя с наибольшим номером в периодах I, II или III, в зависимости от типа используемых компактных матриц. После этого количество элементов матриц, которые должны быть обработаны, а значит и количество операций не растёт и не зависит от оставшегося объёма исследуемой решётки. Это является прямым следствием предложенного способа расчёта.

Номера пороговых слоёв легко рассчитать из формул (3.3) и изложенных соображений. При этом подсчитать количество элементов в матрице слоя l в зависимости от типа компактных матриц можно по формулам:

$$\begin{aligned} Q_{1,l} &= (1 + 2l)^2, \\ Q_{2,l} &= (1 + l)^2, \\ Q_{3,l} &= \frac{(1 + 2l)^2}{2}, \end{aligned}$$

где $Q_{1,l}$, $Q_{2,l}$, $Q_{3,l}$ – количество элементов в компактной матрице первого, второго и третьего шага сжатия координационного слоя l .

Тогда определить количество элементов, которые нужно обработать во время исследования, можно рассчитать по формулам:

$$\begin{aligned} Q_1 &= \sum_{l=0}^L (1 + 2l)^2 = \frac{4L^3 + 12L^2 + 11L}{3}, \\ Q_2 &= \sum_{l=0}^L (1 + l)^2 = \frac{2L^3 + 9L^2 + 13L}{6}, \\ Q_3 &= \sum_{l=0}^L \frac{(1 + 2l)^2}{2} = \frac{2L^3 + 9L^2 + 13L}{12}, \end{aligned} \tag{3.19}$$

где Q_1 , Q_2 , Q_3 – количество элементов, которые нужно обработать во время исследования, при использовании матриц первого, второго и третьего шагов сжатия соответственно, L – номер порогового координационного слоя.

При этом в качестве исходных данных используются компактные матрицы, содержащие меньшее количество элементов по сравнению с полным матричным описанием. Так матрицы первого шага сжатия содержат в 6 раз меньше элементов, матрицы второго шага сжатия – в 24, матрицы третьего шага сжатия – в 48. Что также существенно уменьшает количество выполняемых операций и, тем самым, снижает вычислительную сложность расчётов. А значит, и требования к вычислительной технике, и время, необходимое для получения результатов.

Тогда зависимость количества операций от объёма исследуемого фрагмента решётки для разработанного структурного численного метода будет иметь следующий вид:

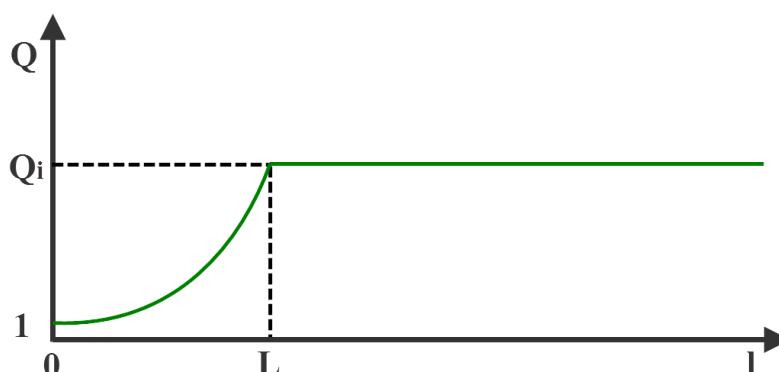


Рисунок 3.26 – Общий вид зависимости количества операций (Q) от объёма исследуемого фрагмента решётки, задаваемого номером координационного слоя (l), при использовании структурного метода

В то же время при использовании прямого численного метода и координатной матричной модели расчёты выполняются по формулам (3.1), (3.2), (1.1) и (3.4). Анализ этих формул позволяет заключить, что количество элементов матричного описания, которые необходимо обработать в ходе вычислительного процесса, непрерывно зависит от объёма исследуемого фрагмента решётки [78, 79].

Тогда даже при использовании компактных матричных моделей количество операций в случае выполнения расчётов на основе прямого численного метода можно рассчитать по формулам (3.19). При этом зависимость количества операций от объёма исследуемого фрагмента решётки будет иметь вид:

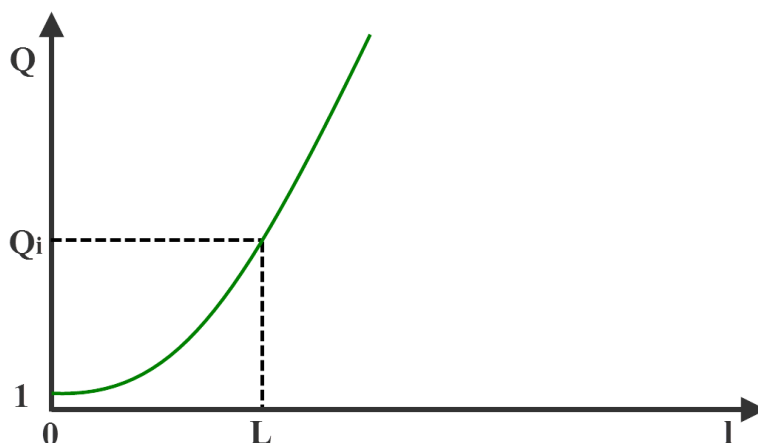


Рисунок 3.27 – Общий вид зависимости количества операций (Q) от объёма исследуемого фрагмента решётки, задаваемого номером координационного слоя (l), при использовании прямого метода

Таким образом, расчёты, выполняемые с помощью разработанного структурного метода, будут требовать выполнения на много меньшего количества операций по сравнению с прямым численным методом. Однако, данное преимущество будет проявляться при использовании компактных матричных моделей и при выполнении практических расчётов для больших фрагментов пространственных решёток. То есть, проведённый сравнительный теоретический анализ эффективности известного прямого и разработанного структурного численного метода свидетельствует об эффективности последнего.

3.3.2 Экспериментальная оценка эффективности

Приведённые теоретические выводы об эффективности предлагаемого структурного численного метода по сравнению с классическим подходом могут быть проверены в ходе соответствующего вычислительного эксперимента. Такой эксперимент должен состоять в последовательном вычислении коэффициента компактности для фрагментов решётки разных размеров. Расчёты должны выполняться с помощью каждого из рассматриваемых методов.

Объём фрагментов решётки может задаваться в виде максимальных номеров координационных слоёв, включаемых в конкретную итерацию исследования. Их номера должны изменяться в некотором диапазоне, позволяющем в последствии выполнить достаточно полное и точное сравнение эффективности численных методов. При этом по каждой итерации эксперимента необходимо накапливать информацию об объёме, по которому проводилось вычисление, рассчитанному значению коэффициента компактности, а также времени, затраченному на выполнение расчёта.

Для проведения вычислительных экспериментов подобного типа был разработан и реализован инструмент «Тест производительности» в составе программного модуля «Расчёты» пакета прикладных программ «Оранжевая». На одном и том же компьютере согласно описанной методике эксперимента последовательно была проведена серия расчётов коэффициента компактности пространственной решётки структурного типа вюртцит, а также гексагональной плотно упакованной решётки.

Вычислительные эксперименты проводились на компьютерном оборудовании со следующими характеристиками: процессор *Intel Core i7 CPU 930*, 2.80 GHz; общее количество ядер – 4, логических процессоров – 8; оперативная память – 6 Гб (доступно 5,5 Гб); операционная система – *Microsoft Windows 8.1, Профессиональная хб4*.

Эксперимент для оценки эффективности прямого численного метода на примере решётки типа вюртцит был проведён в диапазоне координационных слоёв [1; 2000]. Полученные результаты приведены в таблице 3.4.

Таблица 3.4 – Расчёт плотности упаковки решётки типа вюртцит прямым методом

Слой	Значение коэффициента компактности (КУМ)	Количество обработанных частиц	Затраченное время (мс)
1	9,18235928143573	1	0
2	1,14779491017947	1	0
3	0,340087380793916	1	0
4	0,143474363772433	1	0
5	0,293835497005943	4	0
6	0,212554612996197	5	0
...
36	0,331427748412589	1684	0
...
100	0,320344968251448	34887	9
...
1000	0,316591936001221	34478278	4376
...
2000	0,315825647458877	275158606	31545

Так же был проведён эксперимент для оценки эффективности прямого численного метода на примере решётки ГПУ. Исследовались слои в диапазоне [1; 500]. Полученные результаты приведены в таблице 3.5.

Таблица 3.5 – Расчёт плотности упаковки решётки ГПУ прямым методом

Слой	Значение коэффициента компактности (КУМ)	Количество обработанных частиц	Затраченное время (мс)
1	4,772970	1	2
2	0,596621	1	1
3	0,574524	10	0
4	0,876287	18	0

Таблица 3.5 – Расчёт плотности упаковки решётки ГПУ прямым методом (окончание)

Слой	Значение коэффициента компактности (КУМ)	Количество обработанных частиц	Затраченное время (мс)
5	0,687308	18	31
6	0,522044	42	1
...
36	0,693449	7213	12
...
100	0,701944	150369	208
...
500	0,664203	17457970	23883

Аналогичные вычислительные эксперименты были проведены для оценки эффективности структурного численного метода. В частности, оценка метода на примере решётки типа вюртцит была проведена для слоёв [1; 10000]. Некоторые из результатов приведены в таблице 3.6.

Таблица 3.6 – Расчёт плотности упаковки решётки типа вюртцит структурным методом

Слой	Значение коэффициента компактности (КУМ)	Количество обработанных частиц	Затраченное время (мс)
1	9,18235928143573	1	0
2	1,14779491017947	1	0
3	0,510131071190874	5	0
4	0,717371818862166	5	0
5	0,376476730538865	6	0
6	0,350715111443726	15	0
...
36	0,340087380793916	1806	0
...
100	0,34018345547899	37616	0
...
1000	0,340088679757667	37092873	10
...
2000	0,340087701836403	296518844	10
...
10000	0,340087393570829	37042595373	10

Эксперимент для оценки эффективности разработанного структурного численного метода на примере гексагональной плотно упакованной решётки был проведён в диапазоне координационных слоёв [1; 500]. Некоторые из результатов приведены в таблице 3.7.

Таблица 3.7 – Расчёт плотности упаковки решётки ГПУ структурным методом

Слой	Значение коэффициента компактности (КУМ)	Количество обработанных частиц	Затраченное время (мс)
1	4,77297	1	4
2	0,596621	1	1
3	0,574524	10	1
4	0,932221	18	1
5	0,687308	18	0
6	0,604908	42	0
...
36	0,698104	7125	0
...
100	0,69578	147993	1
...
500	0,697887	18332766	1

Анализ полученных данных в целом подтверждает результаты теоретической оценки эффективности рассматриваемых численных методов. Время, затрачиваемое на выполнение расчёта прямым численным методом, действительно увеличивается с увеличением исследуемого объёма структуры. Данная зависимость носит степенной характер и в целом соответствует предполагаемой (см. рис. 3.27–3.29).

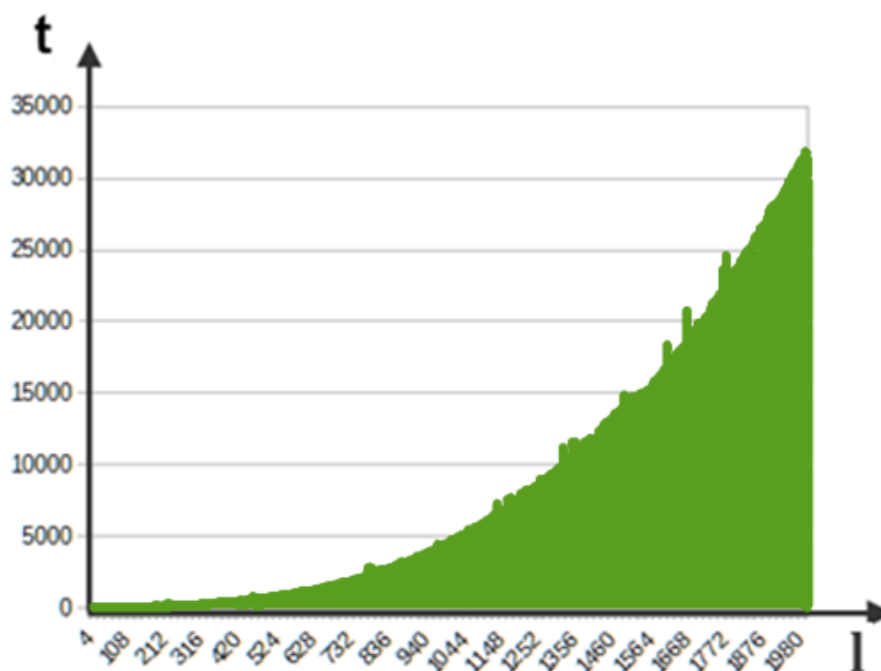


Рисунок 3.27 – Гистограмма зависимости времени расчёта плотности упаковки решётки типа вюрцпит прямым численным методом (t) от объёма исследуемого фрагмента решётки, задаваемого номером координационного слоя (l)

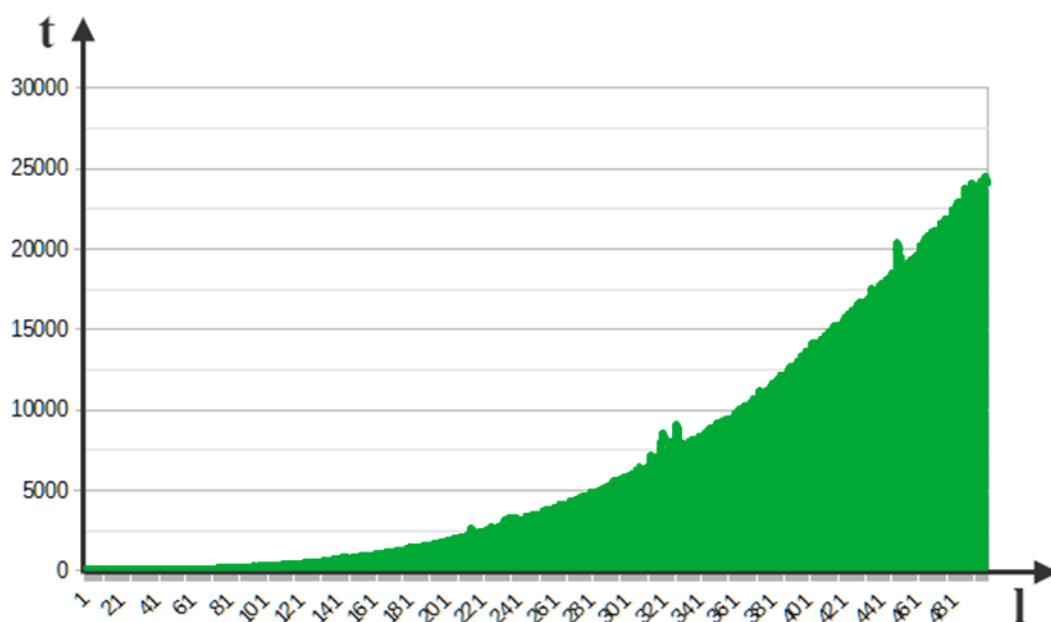


Рисунок 3.28 – Гистограмма зависимости времени расчёта плотности упаковки решётки ГПУ прямым численным методом (t) от объёма исследуемого фрагмента решётки, задаваемого номером координационного слоя (l)

Также анализ полученных экспериментальных данных показывает, что время вычислений коэффициента компактности предлагаемым структурным методом действительно почти не зависит от объёма исследуемой структуры (рис. 3.29, 3.30). Время расчёта структурным методом не превышает 40 мс.

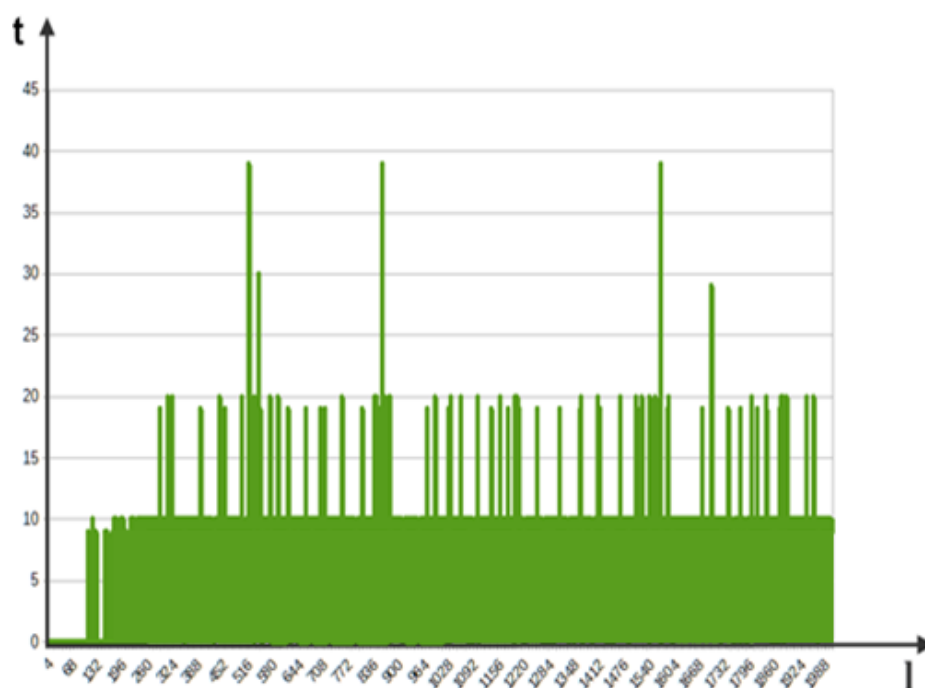


Рисунок 3.29 – Гистограмма зависимости времени расчёта плотности упаковки решётки типа вюрцит структурным численным методом (t) от объёма исследуемого фрагмента решётки, задаваемого номером координационного слоя (l)

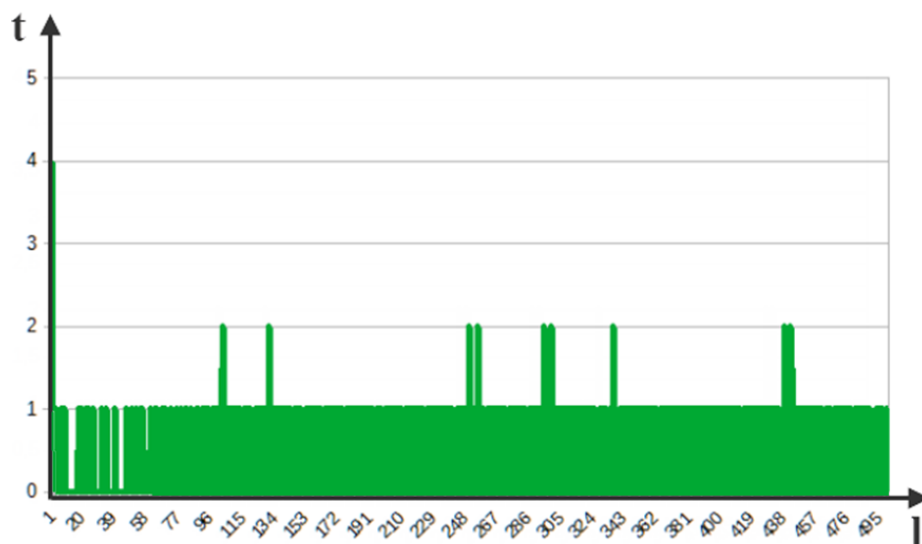


Рисунок 3.30 – График зависимости времени расчёта плотности упаковки решётки ГПУ структурным численным методом (t) от объёма исследуемого фрагмента решётки, задаваемого номером координационного слоя (l)

Стоит заметить, что практическое выполнение расчётов с помощью вычислительной техники накладывает свой отпечаток на получаемые результаты. В частности, продолжительность вычислений с помощью прямого численного метода растёт медленнее, чем количество выполняемых операций. Но достигает значительных величин уже при исследовании объёма, ограниченного 1000 координационным слоем [78, 79].

Даже не специализированная современная вычислительная техника выполняет операции, составляющие основу рассматриваемых вычислительных методов, за время на много меньшее одной миллисекунды. При этом на уровне языков программирования доступны измерения времени с точностью до 1 мс. Поэтому и в таблицах с результатами экспериментов, и на соответствующих графиках присутствуют данные о расчётах, выполненных за 0 мс. Это означает, что вычисления заняли менее 1 мс, то есть, меньше разрешающей способности используемой вычислительной техники.

Также стоит отметить, что графики, построенные на основе собранных данных, не являются «гладкими», а также содержат выбросы. Это можно объяснить тем, что постоянно присутствующие фоновые процессы операционной системы не равномерно используют ресурсы компьютера во времени. Моменты их более активного потребления неизбежно влекут замедление работы

прикладного программного обеспечения. В том числе пакета программ «Оранжея», что и наблюдается на графиках (3.27–3.30).

Важно обратить внимание на то, что в работе [115] приводятся данные об эффективности оригинальных версий метода компактного матричного описания и основанного на нём метода расчёта коэффициента компактности. В частности, отмечается, что расчёт коэффициента компактности для примитивной кубической решётки (структурный тип $NaCl$), включающий 1000 координационных слоёв, занял не более 8 секунд.

Таким образом, применение разработанных модели укладки кубов Брэгга, новой версии метода компактного матричного описания, компактных матричных моделей решёток ГПУ и типа вюртцит, а также структурного метода расчёта коэффициента компактности, позволяют сократить на порядок время проведения исследований. Однако необходимо выполнить оценку точности этих моделей и методов.

3.3.3 Практическая оценка точности

Несмотря на обоснованность и строгий вывод созданных моделей и методов необходимым доказательством их корректности является выполнение практических расчётов известных значений характеристик веществ. В качестве такой характеристики была выбрана величина межъядерного расстояния.

Аналогично теоретическим расчётам, приведённым в конце первой главы, практический расчёт данного параметра выполнялся для ряда веществ, обладающих структурами гексагональной плотно упакованной решёткой (структурный тип Mg) и решёткой вюртцита (структурный тип $\alpha-ZnS$). В качестве контрольных данных использовались значения межъядерного расстояния, установленные в ходе физических экспериментов. Вычисления выполнялись в пакете прикладных программ «Оранжея» по компактным матричным моделям решёток с использованием разработанного структурного численного метода и кристаллографической формулы длины связи (1.15). Объём исследуемой пространственной структуры был эквивалентен 100 000 кубических координационных слоёв. Результаты расчётов приведены в таблицах 3.8, 3.9.

Таблица 3.8 – Кристаллы типа *Mg*

Кристалл	<i>M</i> (а.е.м.)	ρ (кг/м ³) [108]	<i>a</i> _{эсп.} (нм)	Расчётное значение <i>d</i> (нм)		
				Контроль	ШУМ	КУМ
Cd	224,829 [104]	8690	0,29788 [109]	0,297880	0,315508	0,310694
Mg	48,610 [104]	1740	0,32093 [109]	0,320930	0,323686	0,318748
Re	372,414 [104]	20800	0,27608 [109]	0,276080	0,279074	0,274817
Ru	202,144 [104]	12100	0,27053 [109]	0,270530	0,272703	0,268543
Tl	408,760 [104]	11850	0,34563 [109]	0,345630	0,347255	0,341958
Zn	130,764 [104]	7134	0,2665 [108]	0,266500	0,281266	0,276975
ϵ -Co	117,866 [105]	8860	0,25071 [109]	0,250710	0,252765	0,248909

Таблица 3.9 – Кристаллы типа α -*ZnS*

Кристалл	<i>M</i> (а.е.м.)	ρ (кг/м ³) [108]	<i>a</i> _{эсп.} (нм)	Расчётное значение <i>d</i> (нм)		
				Контроль	ШУМ	КУМ
α -ZnS	97,43 [113]	4087	0,3814 [108]	0,233559	0,240253	0,236588
ZnO	81,37 [114]	5675	0,3250 [109]	0,199021	0,202802	0,199708
CdS	144,48 [114]	4820	0,4135 [109]	0,253216	0,259314	0,255358
α -SiC	40,097 [114]	3160	0,3081 [109]	0,188672	0,194707	0,191736
GaN	83,73 [109]	6070	0,3190 [108]	0,195347	0,200203	0,197149
AlN	40,989 [114]	3050	0,3110 [109]	0,190448	0,198470	0,195442
BeO	25,011 [114]	3019	0,2698 [109]	0,165218	0,168912	0,166336
InN	128,83 [114]	6786	0,3545 [109]	0,217086	0,222693	0,219296
MgTe	151,9 [114]	3850	0,4530 [109]	0,277405	0,284187	0,279852
CdSe	191,37 [113]	5660	0,4299 [109]	0,263259	0,269934	0,265817

Результаты вычислений позволяют сделать ряд следующих наблюдений. Во-первых, полученные расчётные значения величин межъядерных расстояний обладают высоким соответствием данным физических экспериментов.

Во-вторых, значения межъядерных расстояний, вычисленные в ходе теоретического и практического расчётов, почти не отличаются.

В-третьих, по сравнению с классической моделью шаровой упаковки использование модели кубической упаковки позволяет повысить точность расчётов в среднем на 0,5 %, а по некоторым веществам на 1,6 %.

В свою очередь, это позволяет сделать вывод о том, что разработанные в ходе данного исследования модели и методы являются адекватными и позволяют выполнять расчёты параметров исследуемых веществ с высокой точностью и скоростью.

3.4 Возможность применения для расчётов других параметров

В качестве одного из параметров, требующих более сложных расчётов и играющих важную роль для современной науки и техники, можно назвать постоянную Маделунга. Широко применяемые на данный момент методы расчёта данного параметра имеют ряд известных недостатков. А предложенные ранее модификации метода Харрисона, представленные в работах [10, 114, 116], имеют ограниченную область применения, так как они используют в качестве исходных данных матричную модель решётки, полученную с помощью оригинального метода компактного описания.

Разработанный модифицированный метод компактного матричного описания приводит к формированию другой структуры моделей пространственных решёток. Из чего возникает задача разработки нового метода расчёта постоянной Маделунга.

Такой метод расчёта может быть построен на основе существующих модификаций метода Харрисона. При этом он должен использовать в качестве исходных данных компактные модели решёток, полученные с помощью разработанной новой версии метода компактного матричного описания.

3.4.1 Структурный метод расчёта постоянной Маделунга

Главная идея метода Харрисона состоит в расчёте электростатического взаимодействия в некотором фрагменте решётки, ограниченном сферой заданного радиуса. При этом в качестве центра сферы выбирается одна из частиц решётки. Затем рассчитывается компенсирующий заряд этой сферы. Значением постоянной Маделунга будет являться разность этих двух величин.

Модификации метода Харрисона, например, метод Харрисона-Сычёва, вносит изменения в алгоритмы расчётов электростатического взаимодействия и компенсационного заряда. В частности, алгоритм прямого расчёта заменяется более эффективным алгоритмом, построенным на особенностях компактного матричного описания решётки.

Исходными данными для нового метода расчёта постоянной Маделунга будет являться компактное матричное описание решётки. Но расчёт электростатического взаимодействия предполагает учёт зарядов ионов. Поэтому при построении компактной матричной модели с помощью модифицированного метода описания нужно формировать не простые количественные, а простые зарядовые матрицы. Каждый элемент таких матриц должен содержать информацию не о количестве частиц, находящихся в соответствующих ему узлах сетки, наложенной на пространственную решётку, а о суммарном заряде ионов, находящихся в этих узлах.

Этого можно достичь, просто немного изменив метод формирования трёхмерной бинарной матрицы, используемой на ранних этапах создания описания исследуемой решётки. В частности, в её элементах нужно отмечать не факт наличия и отсутствия частицы в соответствующем узле сетки, а заряд иона. Если же соответствующий узел пуст или находящаяся в нём частица имеет нулевой заряд, то записывать нуль в элемент трёхмерной матрицы. Все остальные шаги построения компактного матричного описания решётки выполняются без изменений.

В качестве первого этапа расчёта постоянной Маделунга в оригинальной версии метода Харрисона-Сычёва, нужно выполнить проход по всем координатным слоям, участвующим в исследовании. При этом для каждого слоя выполняется генерация необходимого матричного описания и его поэлементный обход. В частности, выполняется расчёт решёточной суммы по формуле (1.18). Этот расчёт состоит в следующем: к текущей решёточной сумме добавляется частное от деления значения элемента зарядовой матрицы, на расстояние от узла решётки, соответствующего этому элементу, до узла, выбранного в качестве центрального (составляющего нулевой координатный слой).

Учитывая особенности структуры компактной матричной модели пространственной решётки, полученного с помощью новой версии метода компактного описания, можно заменить обращение к матрице произвольного ко-

ординационного слоя, обращением к соответствующей матрице рабочего периода либо к матрице из младших периодов и базового набора. Рабочим является период с номером I, II или III, в зависимости от типа используемых компактных матриц (первого, второго или третьего шага сжатия соответственно).

При этом, учитывая периодичность компактного описания и взаимосвязи структур координационных слоёв, рассмотренные ранее, будет необходимо выполнить поэлементный обход каждого координационного слоя с номерами от 0 до $(M + [2M + 1] \cdot [T_w - 1])$ включительно, где T_w – номер рабочего периода. Тогда останется выполнить поэлементных обход слоёв только рабочего периода.

При этом для каждого элемента матрицы, описывающей один из координационных слоёв рабочего периода, справедливо следующее наблюдение (на примере компактных матриц третьего шага сжатия): точно такие же элементы будут встречаться во всех матрицах-образах, включённых в исследование. То есть для каждого элемента матрицы рабочего периода существует некоторая последовательность элементов матриц из последующих периодов. Такие элементы будут содержать идентичную информацию о заряде, но иметь другие расположения в своих матрицах. При этом номера слоёв, а также строк и столбцов матриц, в которых расположены эти элементы чётко и однозначно определяются уже рассмотренными периодическими закономерностями компактного матричного описания – формулы (3.3), (3.5), (3.13).

Тогда поэлементный обход всех координационных слоёв из периодов с большими номерами можно заменить эквивалентными расчётами сумм соответствующих рядов. В частности, вклад элементов компонента №0 всех матриц рабочего периода и всех его образов можно рассчитать так (см. рис. 3.19):

$$A_{q,0} = \sum_{l=0}^{2M+1} \sum_{i=0}^{M-1} \sum_{g=0}^i \left(q_{l,i,g} \cdot \sum_{T=1}^{T_{max}} \frac{1}{R_{0,l,i,g,T}} \right),$$

$$R_{0,l,i,g,T} = \sqrt{[(5M + 1) + l + (T - 1)]^2 + i^2 + g^2},$$

где $A_{q,0}$ – суммарный вклад элементов компонента №0 и всех его образов, l – номер текущего слоя в рабочем периоде, $q_{l,i,g}$ – значение текущего элемента (заряд), $R_{0,l,i,g,T}$ – расстояние между текущим элементом или его образом и единственным элементом нулевого координационного слоя, T_{max} – номер последнего исследуемого периода.

Для компонента №1 соответствующие выражения будут иметь вид:

$$A_{q,1} = \sum_{l=0}^{2M+1} \sum_{i=0}^{M-1} \sum_{g=0}^i \left(q_{l,i,g} \cdot \sum_{T=1}^{T_{max}} \frac{1}{R_{1,l,i,g,T}} \right),$$

$$R_{1,l,i,g,T} = \sqrt{[(5M+1) + l + (T-1)]^2 + [3M + 2MT + i]^2 + [3M + 2MT + g]^2}.$$

Для компонента №2:

$$A_{q,2} = \sum_{l=0}^{2M+1} \sum_{i=0}^{M-1} \sum_{g=0}^{M-1} \left(q_{l,i,g} \cdot \sum_{T=1}^{T_{max}} \frac{1}{R_{2,l,i,g,T}} \right),$$

$$R_{2,l,i,g,T} = \sqrt{[(5M+1) + l + (T-1)]^2 + [3M + 2MT + i]^2 + g^2}.$$

Для компонента №3:

$$A_{q,3} = \sum_{l=0}^{2M+1} \sum_{i=0}^{2M-1} \sum_{g=0}^{M-1} \left(q_{l,i,g} \cdot \sum_{T=1}^{T_{max}} \sum_{j=0}^T \frac{1}{R_{3,l,i,g,T}} \right),$$

$$R_{3,l,i,g,T} = \sqrt{[(5M+1) + l + 2M(T-1)]^2 + [M + 2Mj + i]^2 + g^2}.$$

Для компонента №4:

$$A_{q,4} = \sum_{l=0}^{2M+1} \sum_{i=0}^{2M-1} \sum_{g=0}^i \left(q_{l,i,g} \cdot \sum_{T=1}^{T_{max}} \sum_{j=0}^T \frac{1}{R_{4,l,i,g,T}} \right),$$

$$R_{4,l,i,g,T} = \sqrt{[(5M+1) + l + 2M(T-1)]^2 + [M + 2Mj + i]^2 + [M + 2Mj + g]^2}.$$

Для компонента №5:

$$A_{q,5} = \sum_{l=0}^{2M+1} \sum_{i=0}^{M-1} \sum_{g=0}^{2M-1} \left(q_{l,i,g} \cdot \sum_{T=1}^{T_{max}} \sum_{j=0}^T \frac{1}{R_{5,l,i,g,T}} \right),$$

$$R_{5,l,i,g,T} = \sqrt{[(5M+1) + l + 2M(T-1)]^2 + [M + 2MT + i]^2 + [M + 2Mj + g]^2}.$$

Для компонента №6:

$$A_{q,6} = \sum_{l=0}^{2M+1} \sum_{i=0}^{2M-1} \sum_{g=0}^{2M-1} \left(q_{l,i,g} \cdot \sum_{T=1}^{T_{max}} \sum_{j=0}^{T-1} \sum_{p=0}^j \frac{1}{R_{6,l,i,g,T}} \right),$$

$$R_{6,l,i,g,T} = \sqrt{[(5M+1) + l + 2M(T-1)]^2 + [3M + 2Mj + i]^2 + [M + 2Mp + g]^2}.$$

Тогда остаётся выполнить второй этап расчёта постоянной Маделунга – рассчитать величину заряда Q компенсирующей сферы Харрисона. Данный параметр рассчитывается как простая сумма всех зарядов, находящихся внутри сферы. То есть, получаем задачу, близкую к задаче определения количества частиц в заданном фрагменте решётки. Очевидно, что значение Q может быть рассчитано тем же самым способом, в частности, методом расчёта полного количества частиц, применённого к компактному матричному описанию, состоящему из простых зарядовых матриц.

Для получения точных результатов при расчёте вкладов элементов и компонентов, а также при расчёте величины компенсирующего заряда необходимо проверять принадлежность текущего координационного слоя и конкретного элемента пространству ограничивающей сферы Харрисона. С учётом периодических особенностей структуры компактного описания каждый координационный слой включает элементы нескольких сфер, радиусы которых легко рассчитываются по формуле (1.16):

$$R_{L,min} = L,$$

$$R_{L,max} = L\sqrt{3},$$

где $R_{L,min}$ и $R_{L,max}$ – минимальный и максимальный радиусы сфер, затрагивающих координационный слой L (рис. 3.31, 3.32).

Это позволяет заключить, что проверять принадлежность пространству сферы Харрисона координационные слои с номерами l нет смысла, т. к. они целиком принадлежат внутреннему пространству данной сферы, если выполняется следующее соотношение:

$$l \leq L_{max}/\sqrt{3},$$

где L_{max} – последний координационный слой, затронутый исследованием.

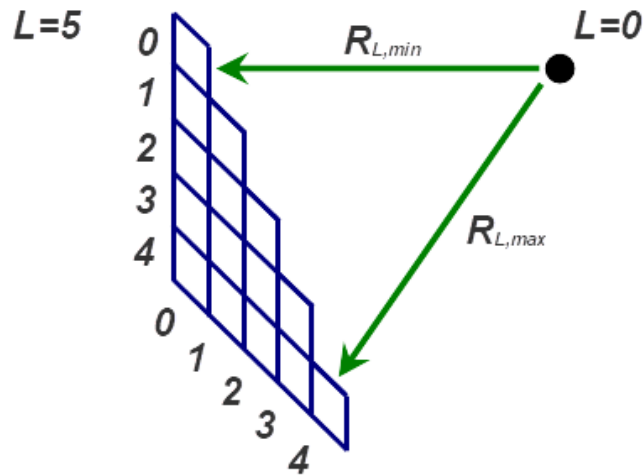


Рисунок 3.31 – Связь элементов координационного слоя с радиусами сфер на примере слоя № 4

0	4,00				
1	4,123105626	4,242640687			
2	4,472135955	4,582575695	4,898979486		
3	5,00	5,099019514	5,385164807	5,830951895	
4	5,656854249	5,744562647	6,00	6,403124237	6,928203230
	0	1	2	3	4

Рисунок 3.32 – Радиусы сфер, захватывающих соответствующие элементы координационного слоя № 4

В свою очередь, это позволяет выполнять поэлементную проверку принадлежности сфере Харрисона только для координационных слоёв с конкретными номерами. А значит, выполнять большую часть расчётов по предложенным выше способам расчёта количества частиц и вклада компонентов матриц.

Тогда формулу (1.17) для расчёта постоянной Маделунга можно преобразовать к следующему виду:

$$A_M = \frac{1}{k} \cdot \left(A_{q,s} + \sum_{i=0}^6 [A_{q,i}] - \frac{Q}{L_{max}} \right),$$

где k – коэффициент перевода линейных величин, $A_{q,s}$ – суммарный вклад элементов матриц базового набора, слоёв, находящихся в периодах младших, по отношению к рабочему, а также слоёв, требующих поэлементной проверки принадлежности компенсирующей сфере Харрисона, $A_{q,i}$ – суммарный вклад элементов компонента i и всех его образов, L_{max} – номер последнего слоя, включаемого в исследование.

3.4.2 Анализ структурного метода расчёта постоянной Маделунга

Сравнение предложенного способа расчёта постоянной Маделунга, основанного на методе расчёта Харрисона-Сычёва и *** модифицированном методе компактного матричного описания позволяет сделать следующие наблюдения.

Предложенный новый способ расчёта предполагает изменение способов выполнения промежуточных вычислений, но сохраняет идею и структуру оригинального метода. Таким образом, внесённые модификации не влияют на точность получаемых значений.

Также предложенные изменения предполагают более эффективное использование особенностей периодичности структуры компактной матричной модели пространственной решётки. В частности, исключена необходимость генерирования матричных описаний всех координационных слоёв, участвующих в исследовании. Вместо этого предложено выполнять обращение к соответствующей матрице рабочего периода.

Также введена альтернатива полного поэлементного прохода по всем компактным матрицам исследуемых слоёв в виде расчётов частичных сумм рядов – вкладов компонентов матриц.

Устранена необходимость проверки принадлежности компенсационной сфере Харрисона для каждого элемента матриц, участвующих в исследовании. Этого удалось достичь путём введения граничного условия, при выполнении которого весь координационный рассматривается полностью принадлежащим внутреннему пространству заданной сферы.

Важно отметить, что в предложенном методе расчёта предполагается использование только одного типа матриц для описания координационных слоёв, участвующих в исследовании. Это позволяет обойтись без выполнения поэлементного умножения матриц во время проведения исследования.

Более не предполагается сохранение промежуточных результатов во временной памяти вычислительного устройства, благодаря применению накопительного подхода к расчёту вкладов A_q . Также внесены некоторые другие небольшие изменения, направленные на оптимизацию процесса вычислений.

Кроме того, предложенный структурный метод расчёта постоянной Маделунга использует в качестве исходных данных компактные матрицы, формируемые с помощью предложенного модифицированного метода компактного матричного описания. Что делает его более универсальным, чем оригинальный метод расчёта данного параметра.

Предложенные модификации метода Харрисона-Сычёва должны привести к значительному сокращению вычислительных операций при выполнении расчётов постоянной Маделунга. Но, стоит отметить, что оборотной стороной этих изменений является повышение сложности алгоритма расчёта, возрастает его громоздкость и трудность для реализации в виде программного обеспечения для вычислительной техники.

Таким образом, предложен новый метод расчёта постоянной Маделунга, основанный на методе Харрисона-Сычёва и использующий в качестве исходных данных матричные модели решёток, получаемых с помощью новой версии метода компактного матричного описания. Что показывает возможность применения изложенных подходов к решёткам с более сложной структурой и для расчётов более сложных и важных параметров.

3.5 Выводы по главе

Проведённый анализ предложенной версии метода компактного матричного описания, а также полученных с его помощью математических моделей показал возможность и необходимость разработки новых методов расчёта параметров решётки. Таких как количество частиц в заданном фрагменте пространства, коэффициента плотности пространственной упаковки, значения постоянной Маделунга. При этом детальное рассмотрение особенностей формирования кубических координационных слоёв и свойств компактных матричных описаний обнаружило основания, позволяющие разрабатывать точные и

высокоскоростные методы расчётов параметров решёток. Анализ предложенных методов расчёта значения коэффициента компактности и величины постоянной Маделунга позволяет сформулировать следующие выводы.

Во-первых, разработан метод расчёта полного количества частиц в заданном фрагменте пространства на основе формул (3.5), а также набора компактных матриц первого – формулы (3.8), (3.9), второго – формулы (3.11), (3.12) и третьего – формулы (3.14), (3.15) шагов сжатия. Данный метод основывается на особенностях формирования кубических координационных слоёв и свойствах компактных матричных описаний. Поэтому обладает высокой точностью и позволяет выполнять расчёты с высокой скоростью.

Во-вторых, разработан метод расчёта эффективного количества частиц в заданном фрагменте пространства на основе набора компактных матриц третьего шага сжатия – формулы (3.17) и (3.18). Данный метод также основывается на особенностях формирования координационных слоёв и свойствах матричных описаний. Поэтому также обладает высокой эффективностью.

В-третьих, разработан структурный метод расчёта значения коэффициента компактности, включающий представленные методы определения полного и эффективного количества частиц в заданном объёме пространства – формулы (3.1), (3.2), (3.8), (3.9), (3.11), (3.12), (3.14) и (3.15). Структурный метод целиком и полностью основывается на использовании свойств координационных слоёв и матричных описаний. Благодаря чему обладает высокой точностью и эффективностью. При этом позволяет выполнять расчёты за фиксированное конечное время даже по большим фрагментам решёток.

В-четвертых, структурный метод расчёта значения коэффициента компактности позволяет на порядок сократить время вычислений как по сравнению с прямым методом расчёта, так и по сравнению с методом, использующим оригинальные компактные матричные модели. Что подтверждается проведёнными теоретической и экспериментальной оценками.

В-пятых, предложенный метод расчёта коэффициента компактности также обладает высокой точностью получаемых результатов. Что подтверждается результатами практических расчётов. В частности, высоким соответствием полученных значений величины межъядерного расстояния данным физических экспериментов и аналитических расчётов.

В-шестых, предложенный численный метод расчёта постоянной Маделунга основан на методе Харрисона-Сычёва и использует в качестве исходных данных компактные матрицы, сформированные с помощью новой версии метода компактного матричного описания. Что показывает применимость разработанных подходов и методов для расчётов различных параметров решёток со сложным составом и структурой.

В-седьмых, предложенные модификации метода расчёта постоянной Маделунга позволяют повысить эффективность вычислений. При этом они не снижают точность рассчитываемых значений. Однако повышают сложность самого алгоритма расчёта и трудоёмкость его реализации в виде программного инструмента.

4 КОМПЛЕКС ПРОГРАММ «ОРАНЖЕРЕЯ»

Исследования пространственных структур и реализующих их веществ, как правило, предполагают обработку информации о больших количествах частиц. При этом точность получаемых результатов растёт с увеличением объёма рассматриваемого фрагмента структуры.

Как уже отмечалось, традиционные методы моделирования приводят к формированию больших по объёму описаний таких фрагментов. Получаемые такими способами модели громоздки и быстро увеличиваются вместе с увеличением размеров описываемого фрагмента решётки. Также подобные модели могут содержать числовые значения, которые не могут быть точно представлены средствами вычислительной техники. Что может ухудшать точность результатов расчётов. Методы расчётов структурных и энергетических параметров различных веществ также предполагают последовательную обработку каждого элемента модели исследуемой пространственной решётки.

Предложенные в данной работе методы описания и численных расчётов позволяют эффективно использовать относительно простые, компактные формы описания решёток. Однако даже вычисления, построенные на их основе, всё равно предполагают выполнение точной монотонной обработки больших объёмов исходных данных. Поэтому для эффективного использования разработанных моделей и методов необходимо применение современных средств вычислительной техники. Для чего, в свою очередь, необходимо соответствующее программное обеспечение.

Предложенные в данной работе методы математического описания и численных расчётов, а также полученные матричные модели являются новой разработкой. Поэтому на данный момент не существует готового программного обеспечения, позволяющего непосредственно применять их для выполнения практических расчётов.

Таким образом, необходимо разработать комплекс программ (КП), позволяющий использовать разработанные модели и методы для выполнения рас-

чётов некоторых параметров пространственных решёток и веществ. В частности, расчётов значения коэффициента компактности и величин межъядерных расстояний для веществ с гексагональной плотно упакованной решёткой, а также решёткой структурного типа вюртцит.

4.1 Структура и технические особенности программного комплекса

В ходе диссертационного исследования был разработан комплекс программ «Оранжерея». Данный КП представляет собой программный инструмент, позволяющий эффективно использовать предложенные модели и методы для выполнения практических расчётов. Основными возможностями комплекса «Оранжерея» являются:

1. построение визуальных моделей пространственных решёток;
2. выполнение вычислительных экспериментов, по выявлению кубического периода исследуемой структуры и определению его числового значения;
3. визуализация структуры компактных матриц и кубических координатных слоёв;
4. генерация, удобный просмотр и экспорт в файлы формата *CSV* матричных моделей исследуемой структуры, включая компактные матричные описания всех трёх шагов сжатия;
5. расчёт полного и эффективного количества частиц во фрагменте исследуемой решётки заданного размера с помощью соответствующих компактных матричных описаний и разработанных методов;
6. расчёт значений коэффициентов компактности на основе моделей укладки шаров и укладки кубов Брэгга;
7. расчёт значений межъядерных расстояний веществ на основе полученных значений коэффициентов компактности.

Комплекс программ «Оранжерея» является гибким инструментом, позволяющим использовать предложенные в данной работе модели и методы для исследования для целого ряда структур и веществ. При этом их перечень мо-

жет быть существенно расширен. Ещё одна особенность комплекса «Оранже-рея» заключается в том, что его модули тесно интегрированы между собой. Но для многих из них реализована возможность изолированного использования.

4.1.1 Технологии и инструменты разработки

Детальное проектирование КП «Оранжерея» выявило необходимость решения большого количества разнообразных не математических задач, связанных с реализацией данного программного инструмента. Например, добавление возможности экспорта данных, формирования отчётов, применения трёхмерной компьютерной графики, анаглифической визуализации и ряд других. По этим причинам, а также из-за нацеленности на создание самостоятельного кроссплатформенного программного продукта, обладающего минимальной зависимостью от программной и аппаратной среды, были выбраны следующие инструменты и технологии разработки:

1. язык программирования *Free Pascal*;
2. среда разработки *Lazarus*;
3. библиотека компьютерной графики *BRGA*;
4. технология баз данных *SQLite*;
5. язык структурированных запросов *SQL*;
6. программа управления базами данных *DB Browser for SQLite*.

Free Pascal является современным языком программирования высокого уровня общего назначения. Он поддерживает все современные парадигмы программирования, включая объектно-ориентированное программирование, являющуюся на данный момент наиболее эффективной и широко распространённой при разработке сложных программных продуктов. Для разработки на этом языке существует множество библиотек готового кода, а также подробная постоянно обновляемая документация и сообществ разработчиков. Кроме того, *Free Pascal* имеет свободно распространяемый компилятор, доступный для разных операционных систем и платформ [149–154].

Среда разработки *Lazarus* является профессиональным инструментом для создания компьютерных программ разных типов, назначений и уровней

сложности (системное и прикладное ПО, консольные и оконные приложения, простейшие библиотеки и сложные программные комплексы). *Lazarus* хорошо документирован, постоянно обновляется, имеет в своём составе множество библиотек и шаблонных компонентов, упрощающих разработку. А также графический редактор экранных форм и ряд других полезных возможностей, реализующих технологию *RAD* (быстрой разработки программ). Особенностью данной среды разработки является кроссплатформенность создаваемых компьютерных программ на уровне исходного кода. *Lazarus* также доступен для разных операционных систем и платформ [155–160].

Библиотека готового кода *BRGABitmap* содержит широкий набор инструментов для программирования компьютерной графики, включая *2D*- и *3D*-графику, а также работу с файлами различных графических форматов. Данная библиотека легко интегрируется в проект приложения среды *Lazarus*, имеет открытый исходный код и является свободно распространяемым ПО [160, 161].

Технология *SQLite* предназначена для создания и использования относительно небольших однофайловых, однопользовательских, встраиваемых баз данных. Данная технология предполагает, что вся полезная и служебная информация (включая ключи, схему данных, индексы и прочее) хранится в одном единственном файле. При этом сама система управления базой данных (СУБД) распространяется не в виде отдельного самостоятельно выполняемого приложения, а в виде библиотеки, динамически подключаемой во время выполнения программой, которой нужно взаимодействие с базой данных.

По сравнению с традиционными клиент-серверными СУБД технология *SQLite* является на много более простым инструментом. Реализующая её динамическая библиотека имеет небольшой вес (порядка 2 Мб) и существует в различных редакциях для большинства современных операционных систем и платформ. Для использования *SQLite* не требуется установки никакого дополнительного программного обеспечения [162, 163].

Язык *SQL* является декларативным языком описания структурированных запросов. *SQL* – это первый и единственный язык работы с базами данных,

который получил широкое распространение. Этот язык используется для описания сложных составных команд на создание, изменение и выборку данных в реляционных СУБД. *SQL* является главным средством работы с современными базами данных [164–166].

DB Browser for SQLite представляет собой свободно распространяемое программное обеспечение, предназначенное для управления базами данных. Данная программа является удобным, эффективным, полнофункциональным и малотребовательным к ресурсам инструментом, позволяющим создавать, просматривать и редактировать базы данных формата *SQLite* [166, 167].

Учитывая назначение и возможности, КП «Оранжевая» можно охарактеризовать как научный прикладной однопользовательский программный продукт, использующий технологии баз данных, а также 2D- и 3D-графики. Разработка качественного программного обеспечения такого типа, объёма и уровня сложности возможна только при использовании подходящего шаблона проектирования. Шаблон проектирования – это некоторый способ общей организации и структуризации исходного кода компьютерной программы. Шаблоны различаются по уровню абстракции, на котором применяются.

В основу архитектуры комплекса «Оранжевая» положена общая схема разделения программного кода на три относительно независимые части: «Интерфейс – Ядро – Утилиты». Первая часть кода – «Интерфейс» содержит описания экранных форм, а также алгоритмов поведения программы и её непосредственного взаимодействия с пользователем. Вторая часть кода – «Ядро» содержит основную часть исходного кода, описывающую алгоритмы решения главных задач программы, реализации её основных функций. Третья часть кода – «Утилиты» содержит вспомогательный исходный код, решающий более мелкие и, как правило, простые задачи, возникающие в работе первых двух частей программного кода.

Данный подход позволяет добиться большей прозрачности и простоты программного кода. В частности, шаблон «Интерфейс – Ядро – Утилиты»

предполагает более простые и понятные отношения и правила взаимодействия между частями программного кода.

Также, при разработке комплекса программ «Оранжерея» широко применялся шаблон проектирования «Фасад». Это структурный шаблон проектирования, позволяющий скрыть сложность любой подсистемы. Данный шаблон предполагает сведение множество возможных обращений к большому количеству сложно взаимодействующих друг с другом объектов, собственно, составляющих упрощаемую подсистему, к одному объекту. При этом данный объект предоставляет доступ ко всем возможностям подсистемы, и берёт управление её составными частями на себя [168–175].

Таким образом, выбранные подходы, технологии и инструменты разработки программного обеспечения позволяют спроектировать целевой комплекс программ. При этом они позволяют реализовать все намеченные возможности создаваемого программного обеспечения и обеспечить высокие качество, надёжность, поддерживаемость, расширяемость и модифицируемость его исходного кода. А также повысить эффективность разработки комплекса «Оранжерея» в целом.

4.1.2 Структура программного комплекса «Оранжерея»

С целью реализации всех намеченных возможностей КП «Оранжерея» для него была реализована модульная структура (рис. 4.1). На данный момент разработанное программное обеспечение содержит пять главных модулей:

1. модуль «Построитель структуры»;
2. модуль «Поиск периода»;
3. модуль «Схемы слоёв»;
4. модуль «Матрицы»;
5. модуль «Расчёты».

Каждый из этих модулей представляет собой отдельный инструмент, реализующий те или иные основные функции «Оранжереи». Также в состав ПК входят пять основных служебных модулей, обеспечивающих работу остального программного кода.

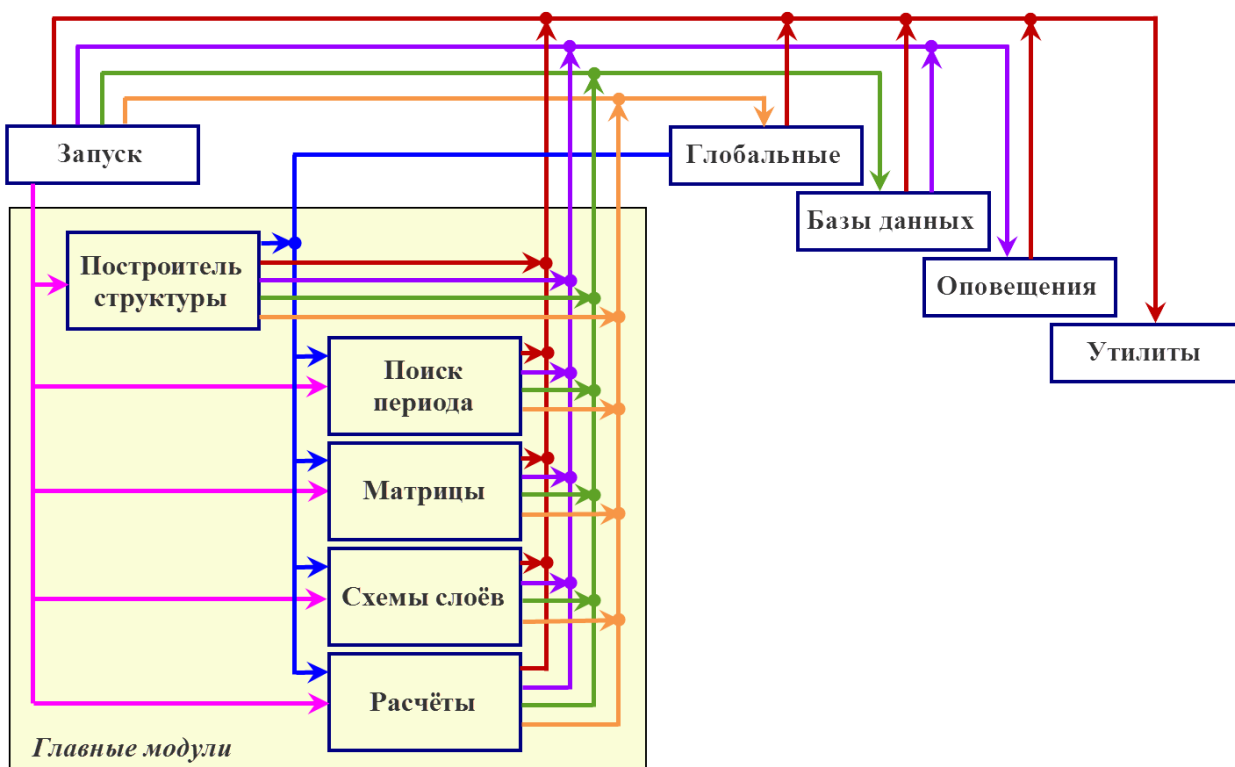


Рисунок 4.1 – Схема взаимодействия модулей комплекса программ «Оранжея»

Здесь нужно отметить, что в ходе проведения данного диссертационного исследования в качестве отдельных, самостоятельных, узкоспециализированных инструментов было разработано несколько компьютерных программ. В последствии они были глубоко переработаны и включены в состав комплекса «Оранжея» в качестве интегрированных программных модулей и их частей (табл. 4.1) [59–66].

Таблица 4.1 – Соответствие программ модулям КП «Оранжея»

Программа	Модуль
Программа визуализации структуры гексагональной кристаллической решётки «Тюльпан»	Построитель структуры
Программа определения периода простейшей гексагональной решётки «Астра»	Поиск периода
Программа визуализации внешней структуры гексагональной кристаллической решётки сложного порядка «Хризантема»	Схемы слоёв
Программа расчёта коэффициента компактности гексагональной кристаллической решётки «Лотос»	Расчёты
Программа расчёта коэффициента компактности гексагональной кристаллической структуры на основе классической матричной модели «Азалия»	Расчёты

Таблица 4.1 – Соответствие программ модулям КП «Оранжерея» (окончание)

Программа	Модуль
Программа расчёта коэффициента компактности гексагональной кристаллической структуры на основе компактной матричной модели «Лилия»	Расчёты
Программа генерации и исследования матричных описаний структуры гексагональной кристаллической решётки «Ирис»	Матричные модели

Модуль «Запуск» выполняет правильные запуск и завершение работы всех остальных модулей комплекса программ. Что обуславливается большим количеством модулей и сложностью их взаимосвязей в составе «Оранжерей».

Модуль «Глобальные» содержит объекты, необходимые для корректной работы многих других модулей комплекса.

Модуль «Базы данных» включает программный код, обеспечивающий использование базы данных и скрывающий особенности взаимодействия с ней.

Модуль «Оповещения» реализует единую систему диалоговых окон стандартных типов (информация, подтверждение, предупреждение, ошибка).

Модуль «Утилиты» содержит вспомогательных программный код. Данный код решает небольшие разнообразные простые технические задачи, возникающие в ходе работы остальных модулей.

Служебные модули, за исключением модуля «Запуск», не имеют графического интерфейса пользователя. Однако каждый модуль комплекса «Оранжерея» построен по схеме ИЯУ. Отличием служебных модулей в данном случае является то, что часть кода «Интерфейс» описывает классы и функции, с помощью которых другие программные модули взаимодействуют с данным.

4.2 Основные возможности комплекса программ

Работа с комплексом программ «Оранжерея» начинается с запуска служебного модуля «Запуск». Он выполняет инициализацию, а также уничтожение окон и ряда глобальных объектов, необходимых для работы комплекса. Информацию о своих действиях и возникающих при этом событиях модуль запуска записывает в отдельный файл – журнал запуска и завершения работы. Это позволяет быстро выявлять и устранять проблемы, которые могут возникать.

кать при запуске и завершении программы. Также данный программный модуль отображает эту свой информацию о происходя событий, прогресс запуска и завершения работы остальной части комплекса программ (рис. 4.2).

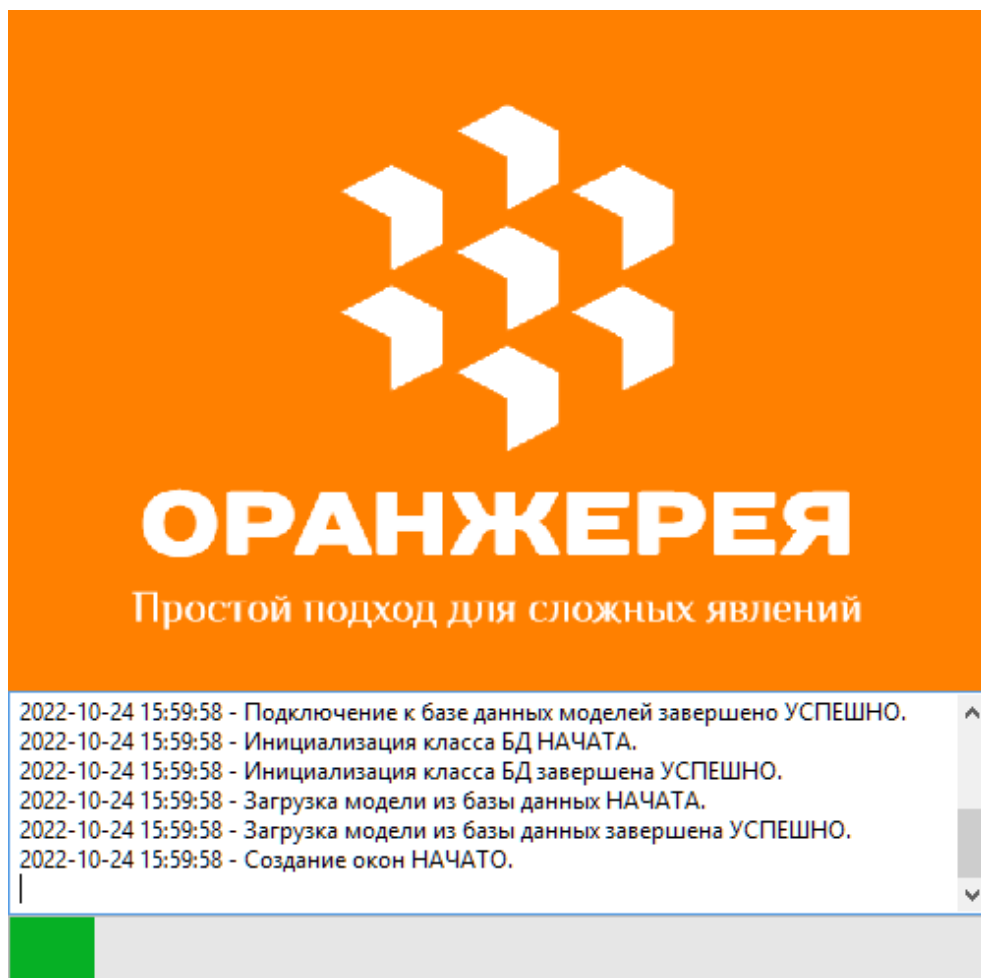


Рисунок 4.2 – Окно модуля запуска

4.2.1 Модуль «Построитель структуры»

После успешной загрузки открывается окно главного программного модуля «Построитель структуры» (рис. 4.3). Данный модуль предназначен для построения стереометрических моделей. Для этого пользователь должен задать пространственную структуру и её модель. После чего настроить дополнительные параметры построения: задать размер моделируемого фрагмента, указать какие компоненты модели нужно отображать, ввести координаты точки обзора и степень масштабирования.

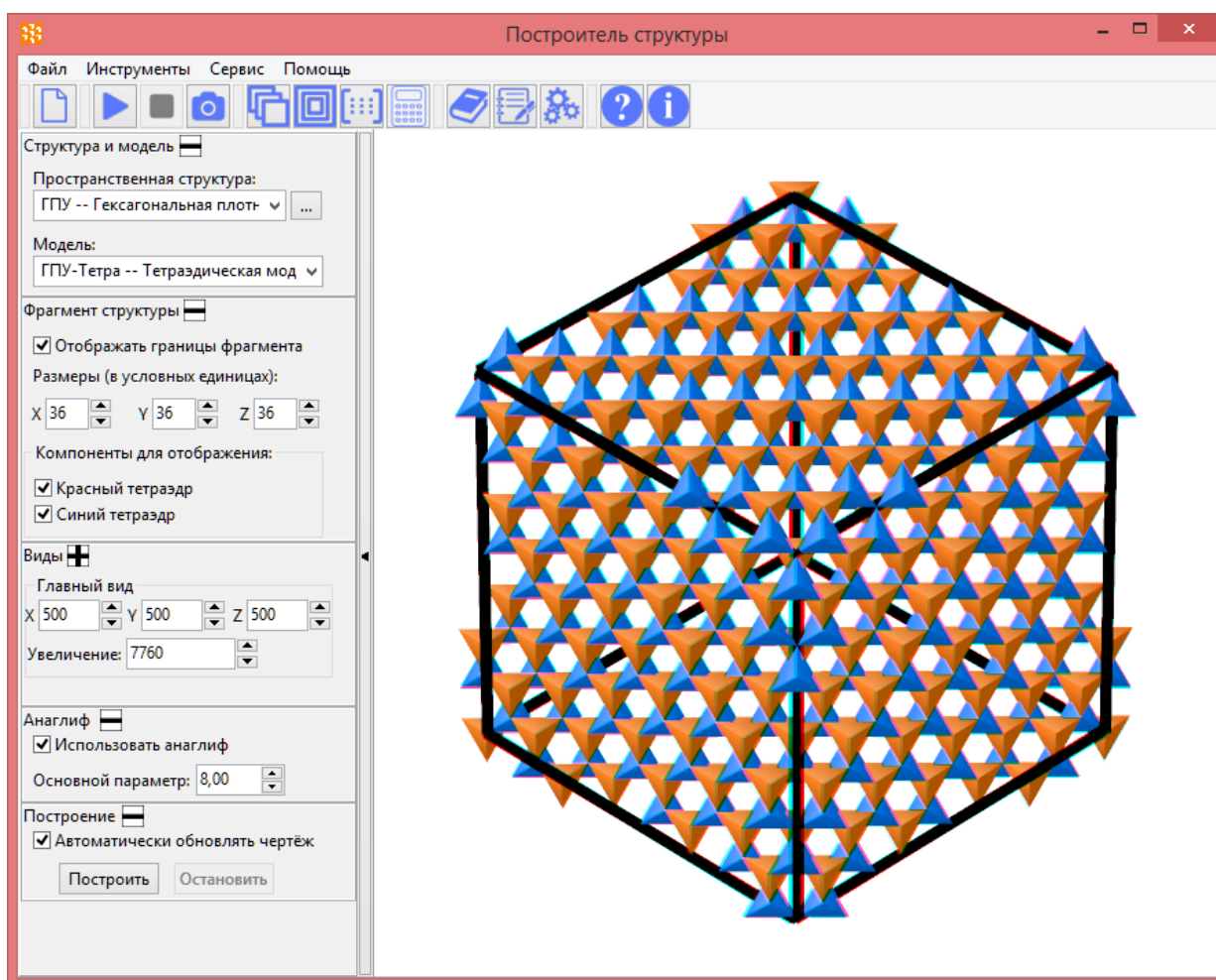


Рисунок 4.3 – Окно модуля трёхмерной визуализации «Построитель структуры»

Стоит отметить, что пространственные структуры и их модели выбираются из выпадающих списков, содержащих информацию о структурах и моделях, хранящихся в базе данных программы. Блок-схема алгоритма построения трёхмерной модели пространственной решётки представлена в приложении Д.

При этом пользователю доступны два варианта визуального представления: обычный и анаглифический. В случае выбора второго варианта программа построит стереоизображение, позволяющее добиться иллюзии объёмности двумерного изображения на экране. Это существенно повышает удобство восприятия и взаимодействия с моделью, но потребует использования специальных очков (рис. 4.4).

Главными параметрами алгоритма формирования анаглифического изображения являются: 1) цветовая схема и 2) расстояние между точками обзора. Два изображения одной и той же трёхмерной сцены, сделанные из двух

точек, образуют стереопару. Первый параметр, цветовая схема определяет какие цветовые компоненты каждого изображения стереопары включаются в состав итогового анаглифического изображения.

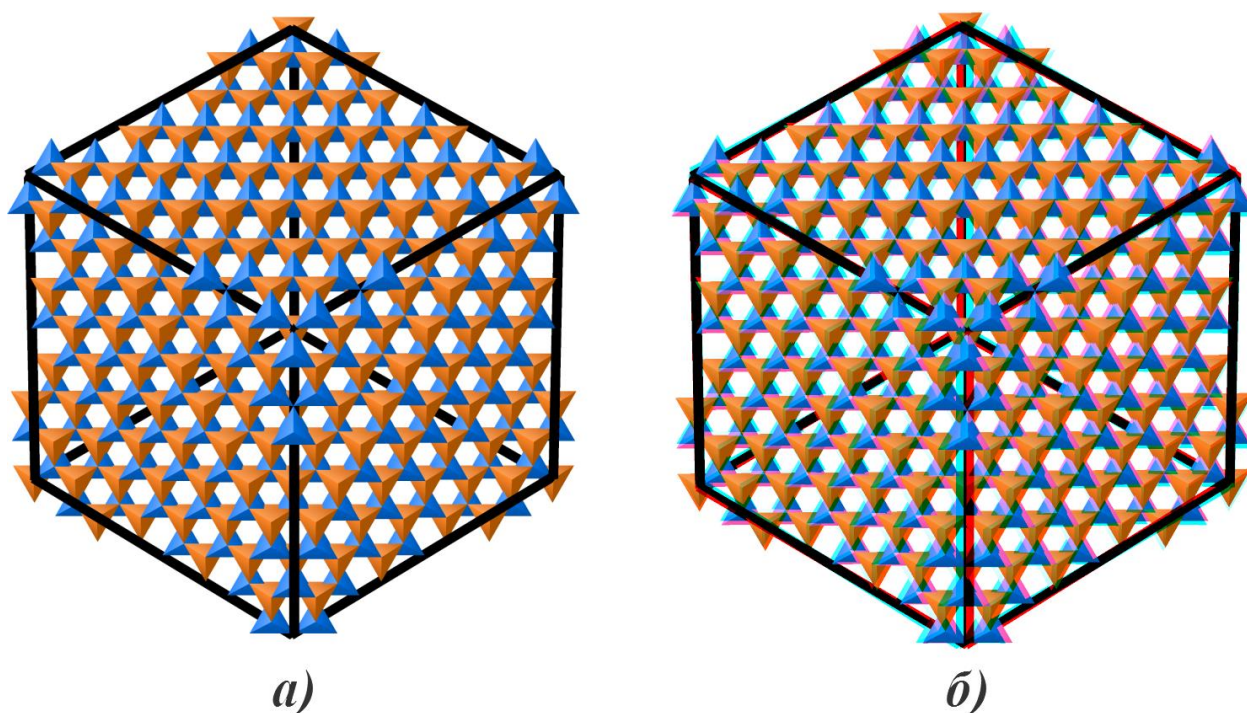


Рисунок 4.4 – Визуализация трёхмерной тетраэдрической модели ГПУ, созданная в модуле «Построитель структуры»: а) обычное представление, б) анаглифическое.

В модуле «Построитель структуры» КП «Оранжевая» реализована цветовая схема «Красный – Голубой» (*red-cyan*). При этом для формирования итогового изображения используется красная цветовая компонента левого изображения стереопары, а также синяя и зелёная компоненты правого изображения. Вторым параметром, расстояние между точками обзора может настраиваться пользователем. Для этого предназначено поле «Основной параметр» в разделе «Анаглиф» (см. рис. 4.3). Блок-схема алгоритма формирования анаглифического представления трёхмерной модели приведена в приложении Д.

Стоит отметить, что анаглиф применяется при решении задач связанных с визуализацией сложных структур в различных областях науки и техники, в качестве примеров можно привести работы [176, 177]. Данный подход имеет ряд преимуществ перед другими методами трёхмерной визуализации: 1) срав-

нительная простота реализации, 2) низкая требовательность к вычислительным и аппаратным ресурсам, 3) сохранение иллюзии трёхмерного отображения модели при цветной распечатке анаглифического изображения на бумаге, 4) простота, низкая стоимость, надёжность и лёгкая доступность очков, необходимы для просмотра такого рода изображений.

Недостатками анаглифа можно назвать ухудшение цветопередачи и наличие короткого периода привыкания, в ходе которого восприятие пользователя подстраивается, чтобы видеть изображение объёмным. А также периода отвыкания после снятия очков, в ходе которого восприятие пользователя возвращается к норме.

4.2.2 Модуль «Поиск периода»

После построения трёхмерной модели заданной структуры становится доступной работа с другими модулями комплекса программ. Модуль «Поиск периода» предназначен для выявления кубического периода заданной трёхмерной пространственной решётки. Данный модуль может работать в двух режимах (рис. 4.5).

Первый режим, расчёт по текущей модели, означает, что все необходимые данные об исследуемой структуре программа берёт из модели, выбранной в главном окне. В этом случае пользователю остаётся задать только диапазоны, в которых во время вычислительного эксперимента будут варьироваться коэффициенты при составлении суммарного вектора трансляции.

Второй режим, расчёт по свободным данным, означает, что всю необходимую информацию об исследуемой структуре программе должен сообщить пользователь. Задача поиска кубического периода решается по относительно простому алгоритму полного перебора в заданном ограниченном диапазоне значений варьируемых параметров. Блок-схема данного алгоритма представлена в приложении Д.

Данный алгоритм поиска просто и лёгок в реализации, а также позволяет выполнить максимально полное и точное исследование, но представляет собой реализацию ресурсоёмкого полного перебора. Стоит отметить, что этот

алгоритм удалось оптимизировать. В частности, представленный алгоритм выполняет трансляцию не всех базовых элементов модели (вернее их точек), а только одной – «стартовой» точки.

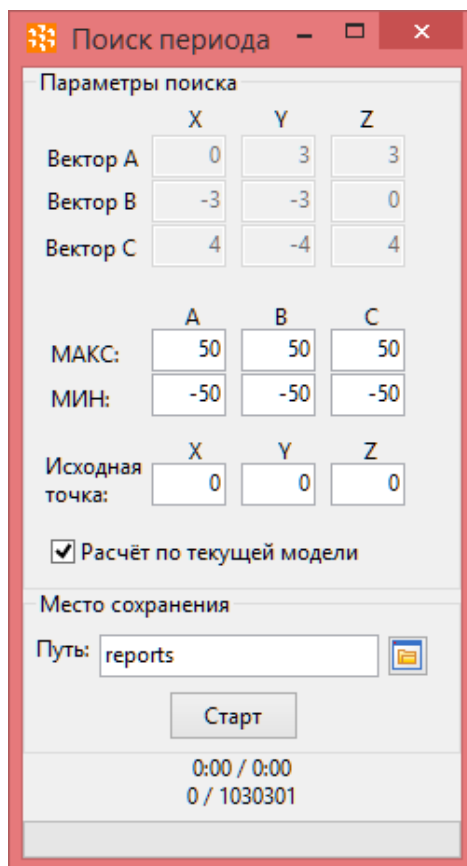


Рисунок 4.5 – Окно модуля «Поиск периода»

Такое упрощение возможно, т. к. все остальные точки исследуемой пространственной структуры могут быть однозначно получены из исходной путём её же трансляции на комбинацию известных векторов. При этом данный приём позволяет многократно сократить объём вычислений, а значит и время проведения исследования сохраняя требуемую точность результатов.

4.2.3 Модуль «Схемы слоёв»

Модуль «Схемы слоёв» предназначен для визуализации срезов трёхмерной кубически слоистой пространственной решётки, а также структуры плоских матриц кубических координационных слоёв. Обязательными входными параметрами для данного модуля являются: 1) номер координационного слоя, для которого требуется построить схему; 2) количество базовых слоёв ком-

пактной матричной модели; 3) тип компактной матрицы. Параметры алгоритма могут быть заданы двумя способами: либо загружены из активной модели, либо введены вручную (рис. 4.6).

Для каждого базового координационного слоя автоматически выбирается цвет, не совпадающий с цветами других базовых слоёв. Реализована возможность изменять цвет любого базового слоя в разделе «Дополнительные параметры». Для удобства пользователя предусмотрена дополнительная панель инструментов, расположенная в области отображения построенной схемы.

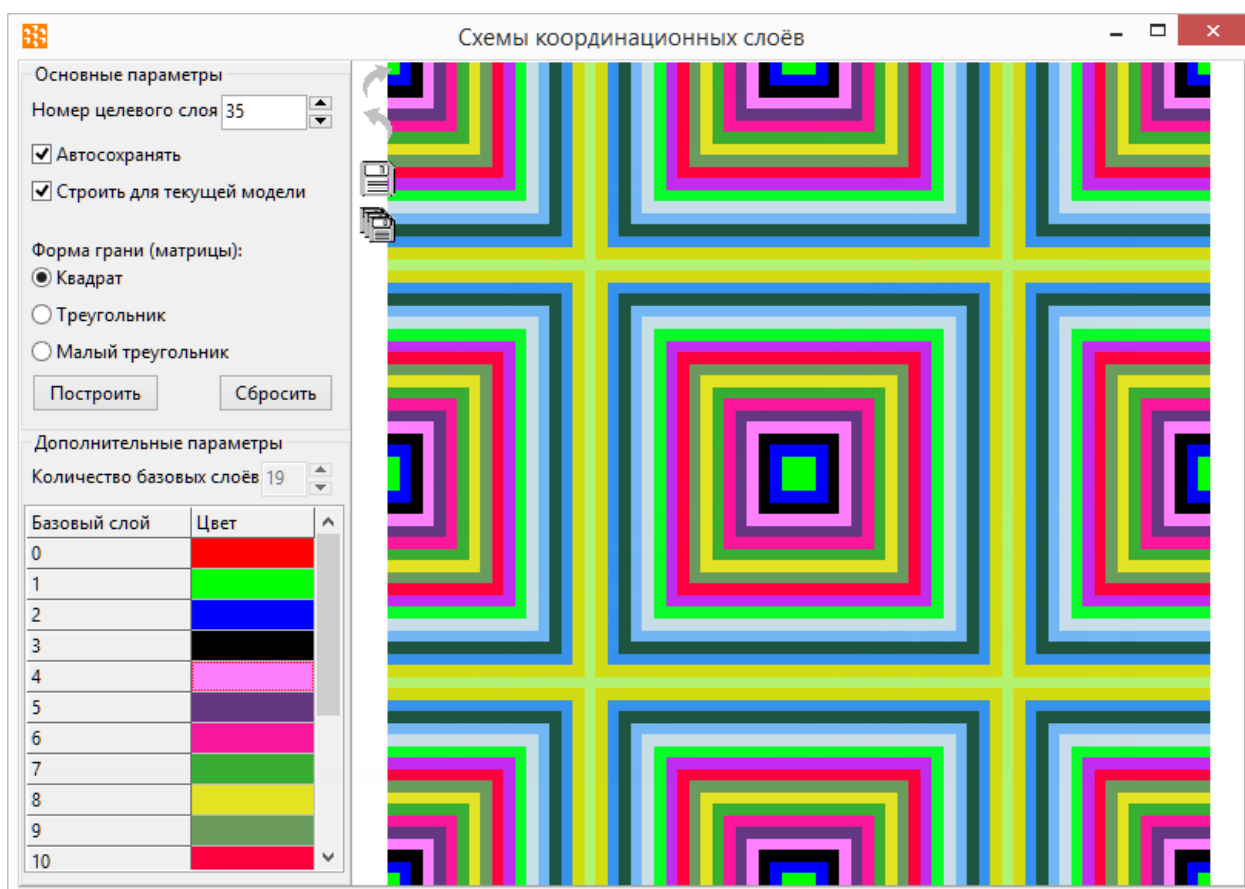


Рисунок 4.6 – Окно модуля «Схемы координационных слоёв»

Также есть возможность свободно изменять номер целевого координационного слоя при сохранении значений всех остальных параметров, что позволяет удобно просматривать и анализировать структуры составных координационных слоёв. Блок-схема алгоритма формирования схемы координационного слоя приведена в приложении Д.

В данном программном модуле реализована возможность сохранения в виде отдельных файлов как текущей схемы выбранного координационного слоя, так и схем всех координационных слоёв с номерами от нулевого до текущего. Все изображения по умолчанию сохраняются в папке *images* каталога с программой в файлах формата *BMP* со следующей маской имени:

$$N\langle\text{Базовых слоёв}\rangle_layer\langle\text{Слой}\rangle.bmp,$$

где $\langle\text{Базовых слоёв}\rangle$ – количество базовых координационных слоёв, а $\langle\text{Слой}\rangle$ – номер координационного слоя, для которого построена данная схема. Например, файл «*N19_layer27.bmp*» содержит схему координационного слоя №27 для структуры, описываемой 19 базовыми слоями.

Указание именно этих двух параметров необходимо для дальнейшего использования схемы слоя. Без информации о количестве базовых координационных слоёв, описывающих выбранную пространственную структуру, и номера слоя, для которого построена эта конкретная схема, сохранённое изображение не несёт никакой полезной информации. Так как схема слоя показывает его взаимосвязь с базовыми кубическими координационными слоями, что напрямую определяется двумя названными параметрами.

Формат растровой графики *BMP* был выбран как наиболее соответствующий содержанию формируемых схем: каждый пиксель на схеме строго соответствует одному элементу компактной матрицы выбранного координационного слоя. Поэтому изображение схемы сохраняется в единственном формате, который, с одной стороны, позволяет без каких-либо искажений записывать информацию с точностью до одного пикселя, а с другой стороны, широко распространён и прост в использовании.

4.2.4 Модуль «Матрицы»

Данный программный модуль предназначен для формирования и исследования матричных описаний. В качестве основных возможностей данного программного компонента можно назвать: 1) формирование матричных описаний; 2) просмотр сформированных матричных описаний; 3) экспорт матричных описаний в файлы формата *CSV* (рис. 4.7).

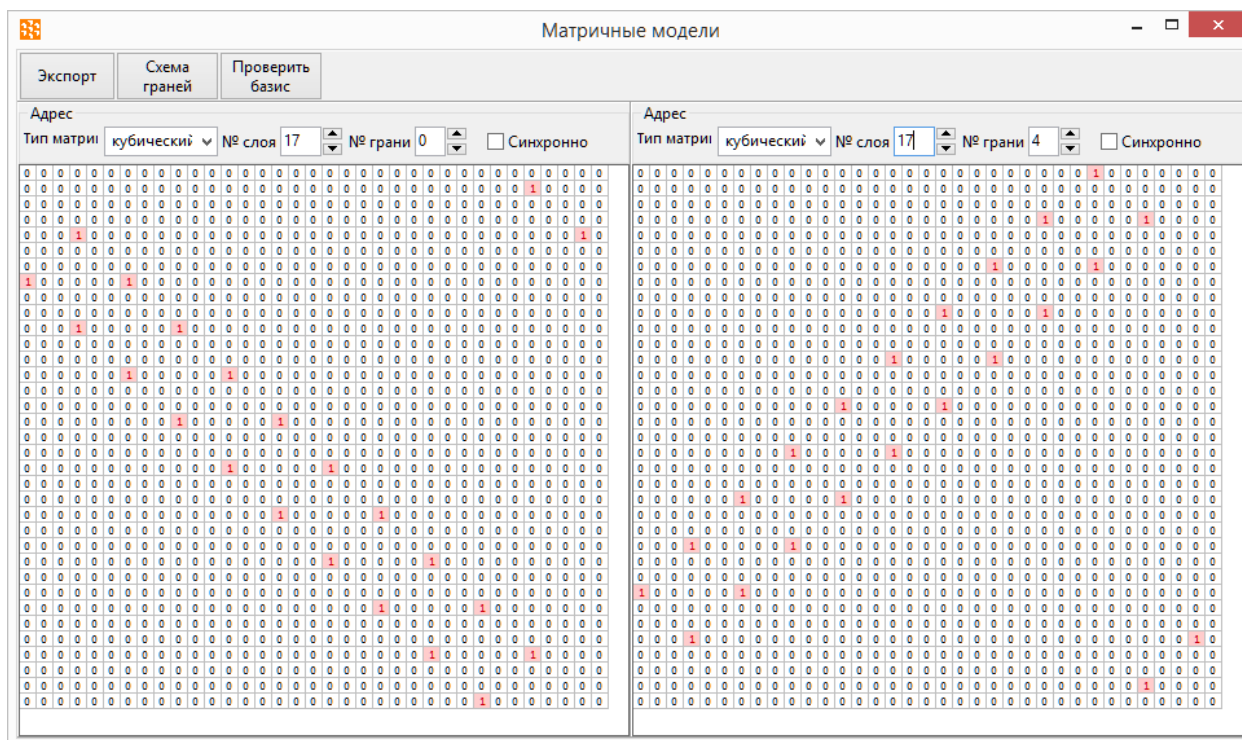


Рисунок 4.7 – Окно модуля «Матрицы»

Формат *CSV* является специальным форматом для простого сохранения табличной информации в виде обычных текстовых файлов. Такие файлы могут быть открыты с помощью множества различных программ, от обычных текстовых редакторов (Блокнот, NotePad++, Kate, GEdit и др.) до табличных процессоров (MS Office Excel, LibreOffice Calc и др.). Многие другие программы поддерживают импорт и экспорт данных в этом формате [178, 179].

Синтезируемые матрицы могут иметь большую размерность и, в основном, заполнены нулями. Также наибольший интерес для исследователя при работе с матричными описаниями представляют значения не нулевых элементов и их расположение в матрицах. При этом находить такие элементы визуально даже в небольших матрицах бывает сложно. А в случае анализа матриц большой размерности появляется высокий шанс пропустить некоторые из не нулевых элементов.

Это становится особенно важным при поиске аномальных появлений элементов такого типа. Для решения названной проблемы реализована подсветка не нулевых элементов. Блок-схемы алгоритмов формирования трёхмерных, а также двумерных компактных матриц приведены в приложении Д.

Особенностью данного модуля является возможность одновременного просмотра и сравнения двух разных матриц одной и той же матричной модели. Это позволяет оценивать правильность формирования компактных матриц, корректность выполнения их свёртывания. А также оценивать корректность построенной трёхмерной матрицы, путём сравнения её противоположных граней. Для облегчения решения последней задачи и повышения точности полученных результатов, в рассматриваемом модуле реализована соответствующая функция «Проверить базис».

4.2.5 Модуль «Расчёты»

Данный программный модуль предназначен для выполнения расчётов значения коэффициента компактности исследуемой пространственной решётки по построенной компактно матричному описанию. А также для расчётов значений межъядерных расстояний конкретных веществ и соединений, реализующих исследуемую пространственную структуру. Окно модуля «Расчёты» разделено на три части: 1) «Информация о текущей структуре», 2) «Расчёты», 3) «Сведения о соединениях» (рис. 4.8).

№	Название соединения	Химическая формула	Mr (a.e.m)	ρ (кг/см ³)	a (нм)	d_0	d_1	d_2	Источник M	Источник ρ	Источник a
1	Кадмий	Cd	224,829	8690	0,29788	0,297880	0,315475	0,310663	Juris Maija, T	CRC Handbc	Martienssen V
2	Магний	Mg	48,610	1740	0,32093	0,320930	0,323653	0,318716	Juris Maija, T	CRC Handbc	Martienssen V
3	Рений	Re	372,414	20800	0,27608	0,276080	0,279046	0,274789	Juris Maija, T	CRC Handbc	Martienssen V
4	Рутений	Ru	202,144	12100	0,27053	0,270530	0,272676	0,268516	Juris Maija, T	CRC Handbc	Martienssen V
5	Таллий	Tl	408,760	11850	0,34563	0,345630	0,347220	0,341923	Juris Maija, T	CRC Handbc	Martienssen V

Рисунок 4.8 – Окно модуля «Расчёты». Расчёт значения коэффициента компактности и величины межъядерного расстояния

В левой части окна отображается информация о выбранных пространственной структуре и её матричном описании. В правой части находятся поля для настройки параметров необходимых для вычислений, а также информация о результатах выполненных расчётов. В нижней части окна располагается таблица с информацией о веществах и соединениях, обладающих исследуемой структурой.

Работа пользователя с этим модулем начинается с указания номера внешнего координационного слоя, который нужно учитывать при численном расчёте коэффициента плотности пространственной упаковки. После этого можно запустить вычислительный процесс, нажатием кнопки «Рассчитать».

По завершению расчётов программа отобразит количество частицы в указанном пользователем фрагменте структуры, а также значения коэффициента компактности, рассчитанные для пространственных моделей укладки шаров и кубов Брэгга. Также теперь становится доступной кнопка формирования и сохранения отчёта.

Далее можно перейти к расчётам величин межъядерных расстояний веществ и соединений, имеющих исследуемую пространственную структуру. Данный расчёт выполняется на основе полученных значений плотности пространственной упаковки, а также информации о молекулярной массе и плотности при нормальных условиях. Эти данные, а также названия соединений, их химические обозначения, а также справочные значения параметра решётки и величины межъядерного расстояния отображаются в таблице в окне программного модуля «Расчёты». Блок-схемы алгоритмов расчёта полного количества частиц и поправки, используемой для определения эффективного количества частиц, представлены в приложении Д.

Стоит отметить, что сведения о перечисленных параметрах соединений предварительно заносятся в базу данных программы из справочников, статей и иных научных источников. Информация о том, из какого источника получено то или иное значение также приводится в таблице.

Как в случае с расчётами значений коэффициента компактности, процесс вычислений запускается нажатием кнопки «Рассчитать». Также стоит отметить, что предусмотрена возможность прерывать по команде пользователя все потенциально длительные и ресурсоёмкие операции. После завершения расчётов программа заносит полученные значения величин межъядерных расстояний в столбцы d_1 и d_2 (см. рис. 4.8).

Также в данном окне доступна вкладка «Тест производительности», позволяющая выполнить оценку эффективности методов расчётов (рис. 4.9). На данной вкладке пользователь должен указать диапазон координационных слоёв, в котором будет проводиться вычислительный эксперимент (поля «Минимальный внешний слой» и «Максимальный внешний слой»). Затем нужно выбрать один из поддерживаемых методов расчётов, и запустить вычислительный процесс. При этом часть интерфейса пользователя станет недоступной до завершения или прерывания эксперимента.

№	Название соединения	Химическая формула	Mr (а.е.м)	ρ (кг/см ³)	a (нм)	d_0	d_1	d_2	Источник M	Источник ρ	Источник a
1	Кадмий	Cd	224,829	8690	0,29788	0,297880	0,315475	0,310663	Juris Maija, T	CRC Handbc	Martienssen V
2	Магний	Mg	48,610	1740	0,32093	0,320930	0,323653	0,318716	Juris Maija, T	CRC Handbc	Martienssen V
3	Рений	Re	372,414	20800	0,27608	0,276080	0,279046	0,274789	Juris Maija, T	CRC Handbc	Martienssen V
4	Рутений	Ru	202,144	12100	0,27053	0,270530	0,272676	0,268516	Juris Maija, T	CRC Handbc	Martienssen V
5	Таллий	Tl	408,760	11850	0,34563	0,345630	0,347220	0,341923	Juris Maija, T	CRC Handbc	Martienssen V

Рисунок 4.9 – Окно модуля «Расчёты». Оценка эффективности численных методов

В правой части вкладки отображаются текущие значения ключевых показателей. В частности, минимальной и максимальное время расчёта, номер

сложения, обрабатываемого в данный момент, общее количество частиц в исследованном фрагменте решётки, значение коэффициента компактности, рассчитанное на основе полученных данных, а также моделей укладки шаров и кубов.

Отчёты о результатах всех расчётов сохраняются в папке «reports» в файле с маской имени:

$\langle \text{Тип} \rangle _ \langle \text{Структура} \rangle _ \langle \text{3d-модель} \rangle _ \langle \text{Метод} \rangle _ \langle \text{Дата и время} \rangle . \text{csv}$,

где $\langle \text{Тип} \rangle$ – тип отчёта (например, отчёт о расчёте коэффициента компактности, о расчёте величины межъядерного расстояния, оценке производительности), $\langle \text{Структура} \rangle$ – название пространственной решётки, для которой выполнен расчёт, $\langle \text{3d-модель} \rangle$ – название использованной трёхмерной модели решётки, $\langle \text{Метод} \rangle$ – применённый метод расчёта, $\langle \text{Дата и время} \rangle$ – дата и время сохранения отчёта.

Например, файл «dst-calc_ГПУ_ГПУ-Тетраэдры_стркт._2023-03-07_18-07-00.csv» содержит отчёт о расчёте межъядерного расстояния для гексагональной плотно упакованной решётки. При этом матричные описания строились на основе тетраэдрической модели решётки, а расчёт выполнялся с помощью структурного метода 7 апреля 2023 года в 18 часов 7 минут. Примеры отчётов, генерируемых модулем «Расчёты», показаны на рис. 4.10–4.12.

	1	2	3	4	5	6
1	Отчёт					
2	о расчёте коэффициента компактности					
3						
4	Дата и время проведения исследования:	2023-03-08 11:21:24.24				
5						
6	Пространственная структура:	Гексагональная плотно упакованная				
7	Модель пространственной структуры:	ГПУ				
8	Количество исследованных слоёв:	50				
9	Метод расчёта коэффициента компактности:	Структурный				
10	Затрачено времени (мс):	2				
11						
12	Общее количество частиц	Поправка общего количества частиц	Эффективное количество частиц	Количество пар частиц	ШУМ	КУМ
13	18973	568,5	18404,5	9202,25	0,735921	0,702753
14						
15						

Рисунок 4.10 – Отчёт о расчёте коэффициента компактности ГПУ.
Просмотр с помощью табличного процессора *LibreOffice Calc*

1	2	3	4	5	6	7	8	
1	Отчёт							
2	о расчёте межъядерного расстояния							
3								
4	Дата и время проведения исследования:	2023-03-07 18:07:00.00						
5								
6	Пространственная структура:	Гексагональная плотно упакованная						
7	Модель пространственной структуры:	ГПУ						
8	Количество исследованных слоёв:	50						
9	Метод расчёта коэф ф ициента компактности:	Структурный						
10	Использованные значения коэф ф ициента компактности	ШУМ: 0,735921 КУМ: 0,702753						
11	Затрачено времени (мс):	1						
12								
13	Хим. формула	Название	Mr	Ro	A	D0	D1	D2
14	Cd	Кадмий	224,829	8690	0,29788	0,29788	0,316207	0,311383
15	Mg	Магний	48,61	1740	0,32093	0,32093	0,324404	0,319455
16	Re	Рений	372,414	20800	0,27608	0,27608	0,279693	0,275426
17	Ru	Рутений	202,144	12100	0,27053	0,27053	0,273308	0,269138
18	Tl	Таллий	408,76	11850	0,34563	0,34563	0,348025	0,342716
19	Zn	Цинк	130,764	7134	0,2665	0,2665	0,281889	0,277589
20	Co	Кобальт	117,866	8860	0,25071	0,25071	0,253325	0,249461

Рисунок 4.11 – Отчёт о расчёте межъядерного расстояния для веществ со структурой ГПУ. Просмотр с помощью табличного процессора *LibreOffice Calc*

1	2	3	4	5	6	7	
1	Отчёт						
2	о вычислительном эксперименте						
3	по исследованию точности и скорости работы численного метода						
4							
5	Дата и время проведения исследования:	2023-03-07 18:06:50.50					
6							
7	Метод расчёта коэф ф ициента компактности:	Структурный					
8	Пространственная структура:	Гексагональная плотно упакованная					
9	Модель пространственной структуры:	ГПУ					
10	Координационный слой	Затраченное на итерацию время (мс)	Общее количество частиц	Эф ф ективное количество частиц	Количество пар частиц	ШУМ	КУМ
11	1	4	1	1	0,5	4,998243	4,77297
12	2	1	1	1	0,5	0,62478	0,596621
13	3	1	10	3,25	1,625	0,60164	0,574524
14	4	1	18	12,5	6,25	0,976219	0,932221
15	5	0	18	18	9	0,719747	0,687308
16	6	0	42	27,375	13,6875	0,633458	0,604908
17	7	1	75	56,25	28,125	0,819683	0,782739
18	8	1	86	79	39,5	0,771213	0,736454
19	9	1	122	101	50,5	0,692486	0,661276
20	10	0	185	151,25	75,625	0,755984	0,721912
21	11	0	227	203	101,5	0,762316	0,727959
22	12	0	283	250,5	125,25	0,724572	0,691915
23	13	0	370	325,75	162,875	0,741091	0,70769

Рисунок 4.12 – Фрагмент отчёта о вычислительном эксперименте по оценке эффективности структурного численного метода. Просмотр с помощью табличного процессора *LibreOffice Calc*

Таким образом, совокупность разработанных программных модулей предоставляет пользователям доступ ко всем намеченным возможностям комплекса «Оранжевая». А именно:

1. модуль «Построитель структуры» позволяет строить визуальные модели пространственных решёток;

2. модуль «Матрицы» позволяет строить матричные описания, включая компактные матричные модели;

3. модуль «Расчёты» позволяет выполнять расчёты значений коэффициента компактности и величин межъядерного расстояния, а также выполнять оценку эффективности рассмотренных численных методов.

В состав комплекса программ входит и ряд других модулей, существенно дополняющих и расширяющих возможности этих трёх. Все программные модули тесно связаны между собой и реализованы в виде единого исполняемого файла. При этом комплекс программ «Оранжерея» для своей работы требует наличия на компьютере пользователя только одного стороннего программного продукта – динамически подключаемой библиотеки *SQLite*, которая может распространяться как часть КП.

Использованные средства, инструменты и технологии разработки делают комплекс «Оранжерея» кроссплатформенным на уровне кода. То есть исполняемый файл комплекса может быть скомпилирован под целевую операционную систему и аппаратную платформу (архитектуру *x86* или *x64*) без необходимости изменения исходного кода.

Для работы комплекса программ достаточно 100 Мб свободного места на постоянных запоминающих устройствах (ПЗУ). А также 40 Мб оперативной памяти (ОЗУ) при расчёте структурным методом и 1500 Мб ОЗУ при расчёте прямым методом. В режиме обычных расчётов «Оранжерея» использует 4% возможностей центрального процессора (ЦП), в режиме оценки эффективности – 14%. Данные об использовании ЦП получены в ходе наблюдений за функционированием КП «Оранжерея» на персональном компьютере, оснащённом процессором *Intel Core i7 CPU 930, 2.80GHz*, под управлением ОС *Microsoft Windows 8.1, Профессиональная x64*. Перечисленные системные требования говорят о возможности использования «Оранжерей» на большинстве современных персональных компьютерах и ноутбуках.

Архитектура созданного КП открывает большие возможности для его дальнейшего расширения и совершенствования. Например, добавление новых

структур, моделей, веществ, соединений и методов расчётов. Также модульный подход к реализации «Оранжея» обеспечивает относительно простую разработку и включение в его состав программных компонентов, добавляющих совершенно новые возможности.

Таким образом, разработанный комплекс программ «Оранжея» является удобным инструментом, позволяющий использовать разработанные модели и методы для выполнения расчётов некоторых параметров пространственных решёток и веществ. В частности, расчётов значения коэффициента компактности и величин межъядерных расстояний для веществ с гексагональной плотно упакованной решёткой, а также решёткой структурного типа вюртцит. При этом данный КП имеет в своём составе инструменты, позволяющие выполнять исследования по выявлению кубического периода и других решёток. Более того, алгоритмы, реализованные в «Оранжее», являются универсальными. Что делает потенциально возможным его полноценное применение к пространственным решёткам любых сингоний и структурных типов

4.3 Выводы по главе

Анализ использованных средств, методов, инструментов и технологий разработки, а также структуры и возможностей комплекса программ «Оранжея» позволяют сформулировать следующие выводы.

Во-первых, разработан комплекс программ «Оранжея», позволяющий на основе разработанных математических описаний и методов выполнять расчёты значений коэффициента компактности и величин межъядерных расстояний для веществ с гексагональной плотно упакованной решёткой, а также решёткой структурного типа вюртцит. При этом расчёты выполняются на основе моделей укладки кубов Брэгга и компактных матричных описаний соответствующих решёток с помощью структурного метода расчёта.

Во-вторых, созданный комплекс программ обладает низкими системными требованиями. Что позволяет использовать его на большинстве современных персональных компьютеров и ноутбуков.

В-третьих, комплекс «Оранжерея» построен на основе платформонезависимых инструментов и технологий, каждый из которых является свободно распространяемым программным обеспечением, либо программным обеспечением с открытым исходным кодом. Что делает возможным простое и быстрое создание версий комплекса под целевые операционную систему и архитектуру без изменения исходного кода. А также снимает зависимость дальнейшей разработки от лицензионных и прочих ограничений, связанных с использованием иностранного коммерческого программного обеспечения.

В-четвёртых, разработанный комплекс программ имеет модульную структуру, реализованные в нём алгоритмы универсальны. Что открывает большие возможности по его дальнейшему развитию и расширению возможностей. В том числе добавления поддержки других пространственных решёток, моделей, веществ, характеристик и методов расчётов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Задачи описания и упаковки различных пространственных структур представляют большой теоретический и практический интерес в различных областях современной науки и техники. В том числе в математической теории групп, кристаллографии, теории телекоммуникации и кодирования информации, физике конденсированного состояния при исследовании структуры и некоторых свойств твёрдых тел.

Однако существующие методы математического описания пространственных структур и расчётов некоторых параметров решёток обладают серьёзными недостатками. В ходе исследования представлены альтернативные методы моделирования, математические описания и методы численных расчётов. Была дана оценка их адекватности и эффективности. Также был разработан комплекс программ, позволяющий использовать эти методы и модели для выполнения практических расчётов. В частности, в рамках представленного диссертационного исследования были получены следующие результаты.

1. Построены модели укладки кубов Брэгга гексагональной плотно упакованной решётки и решётки структурного типа вюртцит. Данные модели позволяют использовать более точные подходы к определению значения коэффициента компактности и расчёту величины межъядерного расстояния соответствующих решёток и веществ.

2. Разработана универсальная версия метода компактного матричного описания, отличающаяся применимостью к пространственным структурам любых сингонии и структурных типов. А также более простой и эффективной структурой формируемой модели по сравнению с оригинальной версией данного метода.

3. Путём аналитических расчётов и построений, а также с помощью вычислительных экспериментов показано наличие свойств кубической симметрии у гексагональной плотно упакованной решётки и решётки структурного типа вюртцит. Что позволяет применить к ним разработанную версию метода компактного матричного описания.

4. С помощью разработанного метода описания построены компактные матричные описания гексагональной плотно упакованной решётки, а также решётки структурного типа вюртцит. Полученные модели позволяющая использовать высокоточные скоростные методы расчётов структурных параметров соответствующих пространственных структур и веществ.

5. Разработан структурный метод расчёта количества частиц в заданном объёме структуры и коэффициента плотности пространственной упаковки. Данный метод позволяет с высокой точностью проводить соответствующие вычисления за фиксированное время для фрагментов пространственных решёток любых размеров.

6. Рассчитаны целочисленные координаты точек и векторов базового фрагмента решётки цеолита *ASO*. Чем показана возможность применения разработанной версии метода компактного матричного описания в отношении пространственных решёток соединений со сложным составом и структурой.

7. Разработан структурный метод расчёта постоянной Маделунга, основанный на методе Харрисона-Сычёва. Данный метод использует в качестве исходных данных компактные матрицы, сформированные с помощью нового метода компактного матричного описания. Что показывает возможность применения развиваемых методов и подходов для расчётов более трудно вычисляемых параметров.

8. Разработан комплекс программ «Оранжевая», позволяющий выполнять построение компактных матричных описаний, расчёты коэффициента компактности и величины межъядерного расстояния для решёток структурных типов вюртцит и магний на основе разработанных методов математического описания и расчёта. Также комплекс «Оранжевая» содержит готовые инструменты и алгоритмы, пригодные для выполнения аналогичных исследований в отношении других пространственных структур и веществ.

9. Комплекс программ «Оранжевая» является модульным кроссплатформенным программным продуктом, построенным с использованием только свободного распространяемого программного обеспечения и программного

обеспечения с открытым исходным кодом. Что делает возможным простое и быстрое создание версий комплекса под целевые операционную систему и архитектуру без изменения исходного кода. А также снимает зависимость дальнейшей разработки от лицензионных и прочих ограничений, связанных с использованием иностранного коммерческого программного обеспечения.

10. Рассчитаны значения коэффициента компактности и величины межъядерного расстояния для гексагональной плотно упакованной решётки и решётки структурного типа вюртцит на основе модели шаровой укладки, а также укладки кубов Брэгга. Данные расчёты были выполнены как с помощью известного прямого численного метода, так и с помощью разработанного структурного метода посредством комплекса «Оранжевая». Полученные расчётные значения обладают высокой степенью соответствия экспериментальным данным, что показывает адекватность разработанных моделей, методов и программного обеспечения.

Разработанное в ходе диссертационного исследования программное обеспечение используется в Институте геологии и природопользования ДВО РАН, в научной и образовательной деятельности ФГБОУ ВО «Амурский государственный университет», а также в ООО «Интеллектуальные системы».

Дальнейшее развитие применённых в данной работе подходов может быть направлено на решение следующих задач: 1) поиск свойств кубической симметрии и выявление кубов-генераторов у пространственных решёток других сингоний и структурных типов; 2) построение компактных матричных описаний более сложных структур; 3) разработка скоростных высокоточных методов расчёта других структурных и энергетических параметров пространственных решёток; 4) соответствующие расширения возможностей представленного комплекса программ «Оранжевая».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ragavendran, K., Computation of Madelung Energies for Ionic Crystals of Variable Stoichiometries and Mixed Valencies and their application in Lithium-ion battery voltage modeling / K. Ragavendran, D. Vasudevan, A. Veluchamy // J. Phys. Chem. B. – 2004. – V. 108 (43). – P. 16899–16903.
2. Бондарева, Т. П. Компьютерное моделирование структуры случайной упаковки систем сферических частиц / Т. П. Бондарева // Научные ведомости Белгородского государственного университета. Серия: Экономика. Информатика. – 2013. – № 1(144). – С. 78–85.
3. Бондарев, В. Г. Имитационное моделирование структуры плотноупакованных систем твердых дисков / В. Г. Бондарев, Л. В. Мигаль, Т. П. Бондарева // Научные ведомости Белгородского государственного университета. Серия: Математика. Физика. – 2008. – № 9(49). – С. 248–260.
4. Дик, И. Г. Моделирование случайной упаковки шаров / И. Г. Дик, Е. Н. Дьяченко, Л. Л. Миньков // Физическая мезомеханика. – 2006. – Т. 9, № 4. – С. 63–70.
5. Чеканин, В. А. Прикладное программное обеспечение для решения задач ортогональной упаковки объектов / В. А. Чеканин, А. В. Чеканин // Объектные системы. – 2016. – № 13. – С. 10–15.
6. Урусов, В. С. Компьютер помогает предвидеть структуру и свойства кристаллов / В. С. Урусов // Вестник РАН. – 1997. – № 2. – С. 113–117.
7. Sabry, A. Simulation of ionic crystals and calculation of electrostatic potentials / A. Sabry, M. Ayadi, A. Chouikh // Computational Materials Science. – 2000. – Vol. 18, No. 3-4. – P. 345–354.
8. Поляков, Д. Н. Синергетика пылевой плазмы и технологические аспекты применения криогенной пылевой плазмы / Д. Н. Поляков, Л. М. Василяк, В. В. Шумова // Электронная обработка материалов. – 2015. – Т. 51, № 2. – С. 41–49.

9. Поляков, Д. Н. Положительный столб тлеющего разряда с пылевыми частицами / Д. Н. Поляков, В. В. Шумова, Л. М. Василяк // Электронная обработка материалов. – 2013. – Т. 49, № 2. – С. 25–35.

10. Еремин, И. Е. моделирование постоянной Маделунга кристаллов кубической сингонии. I / И. Е. Еремин, М. С. Сычев // Вестник Тихоокеанского государственного университета. – 2012. – № 1(24). – С. 43–50.

11. Еремин, И. Е. Эффективная компьютерная реализация метода прямого расчета постоянной Маделунга / И. Е. Ерёмин., М. С. Сычев, Д. С. Щербань // Математические методы в технике и технологиях – ММТТ. – 2010. Т. 9. – С. 132–133.

12. Еремин, И. Е. Современная компьютерная реализация прямого расчета постоянной Маделунга кристаллов типа АВ / И. Е. Еремин, М. С. Сычев // Вестник Саратовского государственного технического университета. – 2011. – Т. 4, № 4(62). – С. 83–87.

13. Еремин, И. Е. Компьютерная реализация прямого расчета постоянной Маделунга сложных решеток кубической сингонии / И. Е. Еремин, М. С. Сычев // В мире научных открытий. – 2012. – № 8(32). – С. 140–151.

14. Еремин, И. Е. Компьютерная реализация прямого расчета постоянной Маделунга сложных решеток кубической сингонии / И. Е. Еремин, М. С. Сычев // В мире научных открытий. – 2012. – № 8(32). – С. 140–151.

15. Förster, W. Mechanical performance of hexagonal close-packed hollow sphere infill structures with shared walls under compression load / W. Förster, T. Pucklitzsch, D. Dietrich, D. Nickel. – DOI: <https://doi.org/10.1016/j.addma.2022.103135> // Additive Manufacturing. – 2022. – Vol. 59. – P. 103135–103135.

16. Упорядоченные плазменно-пылевые структуры в стратах тлеющего разряда / А. И. Эйхвальд, В. Ю. Карасев, Е. С. Дзлиева, А. Ю. Иванов // Вестник Санкт-Петербургского университета. Физика и химия. – 2008. – № 1. – С. 36–41.

17. Об упорядоченных пылевых структурах, формируемых в тлеющем разряде / В. Ю. Карасев, А. Ю. Иванов, Е. С. Дзлиева, А. И. Эйхвальд // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2008. – Т. 133, № 2. – С. 460–465.

18. Об особенностях объёмного строения плазменно-пылевых структур / Е. С. Дзлиева, М. А. Ермоленко, А. Ю. Иванов [и др.] // Вестник Санкт-Петербургского университета. Физика и химия. – 2013. – № 2. – С. 39–45.

19. Упаковка сложных трёхмерных объектов в прямоугольный контейнер на базе дискретно-логического представления информации / М. Верхотуров, Г. Н. Верхотурова, К. В. Данилов, Р. Р. Ягудин // Известия Самарского научного центра Российской академии наук. – 2014. – Т. 16, № 4–2. – С. 378–383.

20. Nanostructured Silicon Thin Films Deposited Under Dusty Plasma Conditions / M. Cavarroc, M. Mikikian, Y. Tessier, L. Boufendi. – DOI 10.1109/TPS.2008.920889 // IEEE Transactions on Plasma Science. – 2008. – Vol. 36, no. 4. – P. 1016–1017.

21. Elementary Physics of Complex Plasmas / V.N. Tsytovich, G.E. Morfill, S.V. Vladimirov, H.M. Thomas. – Berlin: Springer, 2008. – 370 p.

22. Еремин, И.Е. Применение метода векторно-матричного представления структуры кристаллической решетки в расчетах постоянной Маделунга / И. Е. Еремин, М. С. Сычев // Материалы V Общероссийская научно-практическая конференция с международным участием. – Красноярск: Научно-инновационный центр. – 2010. – с. 376.

23. Еремин, И.Е. Метод компактного описания энергетических параметров кристаллической решетки / И. Е. Еремин, М. С. Сычев // V Международная научно-техническая конференция «Аналитические и численные методы 2010». – Пенза. – 2010. – С. 103–111.

24. Еремин, И. Е. Метод компактного описания энергетических параметров кристаллической решетки / И. Е. Еремин, М. С. Сычев // Физико-

математическое моделирование систем. ФММС–7. – Воронеж. – 2010. – С. 103–111.

25. Еремин, И. Е. Эффективный алгоритм расчета постоянной Маделунга и его компьютерная реализация / И. Е. Еремин, М. С. Сычев // В мире научных открытий. – 2010. – № 2–3(8). – С. 38–39.

26. Еремин, И. Е. Метод векторно-матричного представления структуры кристаллической решетки и его применение / И. Е. Еремин, М. С. Сычев // Аналитические и численные методы моделирования естественно-научных и социальных проблем: Сб. ст. V Междунар. науч.-техн. конф. – Пенза: АННОО «Приволжский Дом знаний», 2010. – С. 156–158.

27. Еремин, И. Е. Моделирование постоянной Маделунга кристаллов кубической сингонии. I / И. Е. Еремин, М. С. Сычев // Вестник Тихоокеанского государственного университета. – 2012. – № 1(24). – С. 43–50.

28. Еремин, И. Е. Моделирование постоянной Маделунга кристаллов кубической сингонии. II / И. Е. Еремин, М. С. Сычев // Вестник Тихоокеанского государственного университета. – 2012. – № 2(25). – С. 37–44.

29. Еремин, И. Е. Моделирование коэффициента компактности кристаллической решетки флюорита / И. Е. Еремин, А. А. Остапенко, М. С. Сычев // В мире научных открытий. – 2014. – № 8(56). – С. 69–79.

30. Сычев, М. С. Численный расчет компактности сложных кубических решеток / М. С. Сычев // Информатика и системы управления. – 2012. – № 4(34). – С. 27–33.

31. Еремин, И. Е. Моделирование коэффициента компактности кристаллической решетки куприта / И. Е. Еремин, А. А. Остапенко, М. С. Сычев // В мире научных открытий. – 2014. – № 12(60). – С. 140–150.

32. Эффективные коэффициенты компактности двухкомпонентных кубических кристаллов / И. Е. Еремин, В. В. Еремина, М. С. Сычев, В. Г. Моисеенко // Доклады Академии наук. – 2015. – Т. 461, № 6. – С. 650. – DOI 10.7868/S0869565215120099.

33. The sphere packing problem in dimension 24 / H. Cohn, A. Kumar, S.D. Miller, D. Radchenko // *Annals of mathematics*. – 2017. – no. 185(3). – P. 1017–1033.
34. Conway, J.H. *Sphere Packings, Lattices and Groups* / J.H. Conway, N.J.A. Sloane. – New York: Springer-Verlag, 1999. – 706 p.
35. Engel, P. *Geometric crystallography: an axiomatic introduction to crystallography* / P. Engel. – Dordrecht, Boston, Lancaster, Tokyo: D. Reidel publishing company, 1986. – 266 p.
36. *Fundamentals of Crystallography* / C. Giacovazzo, H. L. Monaco, G. Artioli [et al.]. – Oxford: University Press, 2011. – 864 p.
37. Hales, T.C. A proof of the Kepler conjecture / T. C. Hales // *Annals of Mathematics*. – 2005. – no. 162(3). – P. 1065–1185.
38. Hales, T. C. *Dense Sphere Packings: A Blueprint for Formal Proofs* / T. C. Hales. – Cambridge: University Press, 2012. – 286 p.
39. Hales, T. C. A formulation of the Kepler conjecture / T. C. Hales, S. P. Ferguson // *Discrete & Computational Geometry*. – 2006. – no. 36(1). – P. 21–69.
40. Verma, A. R. *Crystallography applied to solid state physics*. / A. R. Verma, O. N. Srivastava. – New Delhi, Bangalore, Chennai, Cochin, Guwahati, Hyderabad, Jalandhar, Kokata, Luchnow, Mumbai, Ranchi: New age, 1991. – 464 p.
41. Viazovska, M. The sphere packing problem in dimension 8 / M. Viazovska // *Annals of Mathematics*. – 2017. – no.185 (3). – P. 991–1015.
42. Богданов, О. С. О кристаллохимической оценке магнитных, электрических и гравитационных свойств минералов / О. С. Богданов, В. В. Зуев // *Обогащение руд*. – 1991. – № 6. – С. 12–16.
43. Брэгг, У. Л., Кларингбулл Г. Ф. Кристаллическая структура минералов / У. Л. Брэгг, Г. Ф. Кларингбулл. – Москва: Мир, 1967. – 390 с.
44. Зуев, В. В. Кристаллоэнергетика как основа оценки свойств твёрдых материалов / В. В. Зуев, Л. Н. Поцелуева, Ю. Д. Гончаров. – Санкт-Петербург, 2006. – 139 с.

45. Урусов, В. С. Энергетическая кристаллохимия / В. С. Урусов. – Москва: Наука, 1975. – 335 с.
46. Бокий, Г. Б. Кристаллохимия / Г. Б. Бокий. – Москва: Наука, 1971. – 399 с.
47. Пенкаля, Т. Очерки кристаллохимии / Т. Пенкаля. – Ленинград: Химия, 1974. – 495 с.
48. Schwarzenbach, D. Crystallography / D. Schwarzenbach. – Wiley, 1996. – 241 p.
49. Howard, M. Introduction to Crystallography and Mineral Crystal Systems / M. Howard, D. Howard. – Little Rock: Rockhounding Arkansas, 1998. – 127 p.
50. Жданов, Г. С. Физика твердого тела / Г. С. Жданов. – Москва: МГУ, 1960. – 502 с.
51. Томилин, В. И. Физическое материаловедение / В. И. Томилин, Н. П. Томилина, В. А. Бахтина. – Красноярск: СФУ, 2012.
52. Housecroft, C. E. Inorganic Chemistry / C. E. Housecroft, A. G. Sharp. – New York: Pearson Prentice Hall, 2005. – 1256 p.
53. Ellis, A.V. Teaching General Chemistry: A materials science companion / A. V. Ellis, M. J. Geselbracht, J. V. Johnson. – Washington: American Chemical Society, 1993. – 567 p.
54. Слоэн, Н.Дж.А. Упаковка шаров / Н.Дж.А. Слоэн // В мире науки. – 1984. – №3. – С. 72–82.
55. Фомин, Д. В. Расширение применимости метода компактного матричного описания кристаллических структур М. С. Сычева / Д. В. Фомин // Интерактивная наука. – 2016. – № 8. – С. 69–71.
56. Фомин, Д. В. Анализ моделей кристаллической решетки гексагонального алмаза / Д. В. Фомин, И. Е. Еремин // Фундаментальные и прикладные разработки в области технических и физико-математических наук: сб. ст. V междунар. круглого стола. – Казань: ООО «Конверт», 2018. – С. 81–86.

57. Ерёмин, И. Е. Кубическая модель кристаллической решётки гексагонального алмаза / И. Е. Ерёмин, Д. В. Фомин // Cloud of Science. – 2019. – Т. 6. №2. – С. 227–245.

58. Фомин, Д. В. Применимость метода компактного матричного описания к решёткам цеолитов / Д. В. Фомин // Южно-Сибирский научный вестник. – 2024. – №4. – С. 69–75.

59. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2018663888 (РФ). Программа определения периода простейшей гексагональной решётки «Астра» / Амурский государственный университет; Фомин Д. В., Ерёмин И. Е. – Зарегистрировано 06.11.2018, бюллетень № 11.

60. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2019617208 Российская Федерация. Программа визуализации внешней структуры гексагональной кристаллической решётки сложного порядка «Хризантема» № 2019616045: заявл. 27.05.2019: зарег. 04.06.2019 / Фомин Д. В., Ерёмин И. Е. ; заявитель и правообладатель ФГБОУ ВО «АмГУ». – 1 с.

61. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2019665472 Российская Федерация. Программа визуализации структуры гексагональной кристаллической решётки «Тюльпан» №2019664361: заявл. 11.11.2019: зарег. 22.11.2019 / Фомин Д. В., Ерёмин И. Е. ; заявитель и правообладатель ФГБОУ ВО «АмГУ». – 1 с.

62. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2019665276 Российская Федерация. Программа расчёта коэффициента компактности гексагональной кристаллической решётки «Лотос» №2019664344: заявл. 11.11.2019: зарег. 21.11.2019 / Фомин Д. В., Ерёмин И. Е. ; заявитель и правообладатель ФГБОУ ВО «АмГУ». – 1 с.

63. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2019665277 Российская Федерация. Программа генерации и исследования матричных описаний структуры гексагональной кристаллической решётки «Ирис» №2019664345: заявл. 11.11.2019: зарег. 21.11.2019 / Фомин Д. В., Ерёмин И. Е. ; заявитель и правообладатель ФГБОУ ВО «АмГУ». – 1 с.

64. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2020662975 Российская Федерация. Программа расчёта коэффициента компактности гексагональной кристаллической структуры на основе классической матричной модели «Азалия» №2020661955: заявл. 09.10.2020: зарег. 21.10.2020 / Фомин Д. В., Еремин И. Е. ; заявитель и правообладатель ФГБОУ ВО «АмГУ». – 1 с.

65. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2020662936 Российская Федерация. Программа расчёта коэффициента компактности гексагональной кристаллической структуры на основе компактной матричной модели «Лилия» №2020661954: заявл. 09.10.2020: зарег. 21.10.2020 / Фомин Д. В., Еремин И. Е. ; заявитель и правообладатель ФГБОУ ВО «АмГУ». – 1 с.

66. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2023617122 Российская Федерация. Программа моделирования структурных параметров пространственных решёток «Оранжевая» №2023616168: заявл. 30.03.2023: зарег. 05.04.2023 / Фомин Д. В., Еремин И. Е. ; заявитель и правообладатель ФГБОУ ВО «АмГУ». – 1 с.

67. Еремин, И. Е. Вычислительный эксперимент по выявлению кубического периода гексагонального алмаза / И. Е. Еремин, Д. В. Фомин // Математические заметки СВФУ. – 2019. – Т. 26, № 2. – С. 80–93.

68. Фомин, Д. В. Методика вычислительного эксперимента по выявлению кубического периода гексагонального алмаза / Д. В. Фомин, И. Е. Еремин // Сборник методических рекомендаций по вопросам развития технических и естественных наук. – Нижний Новгород: Профессиональная наука, 2019. – С. 152–157.

69. Фомин, Д. В. Методика вычислительного эксперимента по выявлению кубического периода гексагонального алмаза / Д. В. Фомин, И. Е. Еремин // Новые направления в междисциплинарных исследованиях и практике: сборник научных трудов по материалам XXIV Международного

междисциплинарного форума молодых ученых, 15 января 2019 г., Екатеринбург: Профессиональная наука, 2019. – С. 66–71.

70. Eremin, I.E. Computation Experiment for Identifying of Cubic Period of Hexagonal Diamond / I. E. Eremin, D. V. Fomin // *Mathematical notes of NEFU*. – 2019. – Vol. 26. – P. 80–93.

71. Fomin, D.V. Developing the way of designing of cubic model of hexagonal diamond / D. V. Fomin, I. E. Eremin // *Themed collection of papers from International scientific conference "Science. Research. Practice" by HNRI «National development»*. October 2018. – Saint Petersburg: HNRI «National development», 2018. – P. 61–67.

72. Фомин, Д. В. Мыслительный эксперимент по выявлению кубического периода гексагонального алмаза / Д. В. Фомин, И. Е. Еремин // *Фундаментальные и прикладные разработки в области технических и физико-математических наук : Сборник научных статей по итогам работы шестого международного круглого стола, Казань, 31 октября 2018 года*. – Казань: Общество с ограниченной ответственностью "КОНВЕРТ", 2018. – С. 99–103.

73. Фомин, Д. В. Программа определения периода простейшей гексагональной решётки "Астра" / Д. В. Фомин, И. Е. Еремин // *Сборник избранных статей по материалам научных конференций ГНИИ "Нацразвитие"*, Санкт-Петербург, 28–30 января 2019 года. – Санкт-Петербург: ГНИИ «Нацразвитие», 2019. – С. 93–100.

74. Fomin, D.V. Building the matrix of cube-generator of the simplest hexagonal crystal lattice / D. V. Fomin, I. E. Eremin // *Materials of the International Conference "Scientific research of the SCO countries: synergy and integration"*. August 31, 2019. – Vol. 3. – Beijing: Scientific publishing house Infinity. – P.184–190.

75. Фомин, Д. В. Базовый алгоритм заполнения параллелепипеда элементами гексагональной тетраэдрической модели / Д. В. Фомин, И. Е. Еремин // *Интеллектуальный капитал и инновационное развитие общества, науки и образования : сборник статей II Всероссийской научно-практической*

конференции, Пенза, 10 марта 2020 года. – Пенза: "Наука и Просвещение" (ИП Гуляев Г. Ю.), 2020. – С. 8–14.

76. Фомин, Д. В. Улучшенный алгоритм заполнения параллелепипеда элементами гексагональной тетраэдрической модели / Д. В. Фомин, И. Е. Еремин // European Scientific Conference : Сборник статей XXI Международной научно-практической конференции, Пенза, 07 июля 2020 года. – Пенза: "Наука и Просвещение" (ИП Гуляев Г. Ю.), 2020. – С. 13–19.

77. Fomin, D. V. The final algorithm for filling a parallelepiped with elements of the hexagonal tetrahedral model / D. V. Fomin, I. E. Eremin // Materials of the International Conference "Scientific research of the SCO countries: synergy and integration". August 05, 2020. – Vol. 2. – Beijing: Scientific publishing house Infinity. – P.135–142.

78. Еремин, И. Е. Оценка эффективности структурного компактно-матричного метода расчета коэффициента компактности / И. Е. Еремин, Д. В. Фомин // Информатика и системы управления. – 2021. – № 1(67). – С. 44–54.

79. Фомин, Д. В. Структурный компактно-матричный метод расчета коэффициента компактности / Д. В. Фомин, Е. В. Дегтярев // Информатика и системы управления. – 2021. – № 3(69). – С. 25–38.

80. Фомин, Д. В. Моделирование плотности упаковки простейшей гексагональной решетки. II / Д. В. Фомин, Е. В. Дегтярев // Информатика и системы управления. – 2022. – № 1(71). – С. 62–77.

81. Кеплер И. О шестиугольных снежинках / И. Кеплер. – Москва: Наука, 1982. – 192 с.

82. Шаскольская, М. П. Кристаллография / М. П. Шаскольская. – Москва: Высшая школа, 1984. – 386 с.

83. Шаскольская, М. П. Очерки о свойствах кристаллов / М. П. Шаскольская. – Москва: Наука, 1978. – 189 с.

84. Шаскольская, М. П. Кристаллы / М. П. Шаскольская. – Москва: Наука, 1978. – 209 с.

85. Васильев, Д. М. Физическая кристаллография / Д. М. Васильев. – Москва: Металлургия, 1972. – 280 с.
86. William, D. C. Jr. Materials Science and Engineering: An Introduction / D. C. Jr. William, D. G. Rethwisch. – Willey, 2018. – 992 p.
87. Еремин, Н. Н. Атомистическое моделирование и предсказание структуры, энергетики точечных дефектов, термодинамических и упругих свойств простых и сложных оксидов бериллия / Н. Н. Еремин, Н. А. Громалова, В. С. Урусов // Физика и химия стекла. – 2009. – Т. 35, № 6. – С. 812.
88. Горяева, А. М. Атомистическое компьютерное моделирование полиморфных модификаций ZrO₂ и HfO₂ / А. М. Горяева, Н. Н. Еремин, В. С. Урусов // Минералы: строение, свойства, методы исследования. – 2010. – № 2. – С. 147–148.
89. Стюарт, И. Величайшие математические задачи / И. Стюарт. – Москва: Альпина нон-фикшн, 2015. – 460 с.
90. Урусов, В. С. Теоретическая кристаллохимия / В. С. Урусов. – Москва: МГУ, 1987. – 275 с.
91. Brian, S. M. An introduction to materials engineering and science for chemical and materials engineers / S. M. Brian. – New Jersey: Wiley, 2004. – 954 p.
92. Бойко, С. В., Кристаллография и минералогия. Основные понятия. / С. В. Бойко. – Красноярск: СФУ, 2015. – 212 с.
93. Солодовников, С. Ф. Основные термины и понятия структурной кристаллографии и кристаллохимии / С. Ф. Солодовников. – Новосибирск: ИНХ СО РАН, 2005. – 113 с.
94. Подольская, Е. А. Описание геометрии кристаллов с гексагональной плотноупакованной структурой на основе парных потенциалов взаимодействия / Е. А. Подольская, А. М. Кривцов // Физика твердого тела. – 2012. – Т. 54, № 7. – С. 1327–1334.
95. Белов, Н. В. Структура ионных кристаллов и металлических фаз / Н. В. Белов. – Москва: Издательство Академии наук СССР, 1941. – 237с.

96. Егоров-Тисменко, Ю. К. Кристаллография и кристаллохимия: учебник / Ю. К. Егоров-Тисленко. – Москва: КДУ, 2005. – 592 с.
97. Сиротин, Ю. И., Основы кристаллофизики. / Ю. И. Сиротин, М. П. Шаскольская. – Москва: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1979. – 640 с.
98. Жданов, Г. С. Лекции по физике твёрдого тела: принципы строения, реальная структура, фазовые превращения / Г. С. Жданов, А. Г. Хунджуа. – Москва: МГУ, 1988. – 231 с.
99. Sanat, K. C. Crystallography and the world of symmetry / K. C. Sanat. – Springer, 2008. – 152 p.
100. Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия / Я. С. Уманский, Ю. А. Скаков, А. Н. Иванов, Л. Н. Расторгуев. – Москва: Металлургия, 1982. – 632 с.
101. Ladd, M., Structure determination by X-ray crystallography: analysis by X-rays and Neutrons / M. Ladd, R. Palmer. – New York, Heidelberg, Dordrecht, London: Springer, 2013. 784 p.
102. Симонов, В. И. Рентгеновский структурный анализ / В. И. Симонов // Большая советская энциклопедия. – Москва: Советская энциклопедия, 1975. – Т. 22. – С. 23–27.
103. Зуев, В. В. Основно-электронная кристаллохимия и свойства минералов / В. В. Зуев. – Санкт-Петербург: Наука, 2009. – 270 с.
104. Atomic weights of the elements 2013 (IUPAC Technical Report) / J. Maija, T. B. Coplen, M. Berglund [et al.] // Pure and Applied Chemistry. – 2016. – no. 88(3). – P. 265-291.
105. Meija, J. Standard Atomic Weights of 14 Chemical Elements Revised / J. Meija, T. Prohaska, J. Irrgeher // Chemistry International. – 2018. – Vol. 40, no. 4. – P. 23–24.
106. Meija, J. Standard atomic weight of Hafnium revised / J. Meija ; IUPAC Announcements, 2019. – URL: <https://iupac.org/standard-atomic-weight-of-hafnium-revised/> (access: 11.11.2020).

107. Kemsley, J. Ytterbium gets a new atomic weight. Periodic Table: IUPAC lowers the element's vital stat / J. Kemsley // Chem. Eng. News. – 2015. – Vol. 93, no. 37.
108. Haynes, W. M. CRC Handbook of chemistry and physics / W. M. Haynes. – London, New York: CRC Press, 2017. – 2643 p.
109. Martienssen, W. Springer handbook of condensed Matter and Materials Data / W. Martienssen, H. Warlimont. – Berlin, Heidelberg: Springer, 2005. – 1120 p.
110. Wyckoff, R. W. G. Crystal Structures / R. W. G. Wyckoff. – New York: Wiley, 1963.
111. Еремин, И. Е. Оптимизированный алгоритм прямого расчета постоянной Маделунга / И. Е. Еремин, М. С. Сычев, Д. С. Щербань // Труды 52-й научной конференции МФТИ. – Москва–Долгопрудный: МФТИ, 2009. – с. 47–49.
112. Harrison, W. A. Simple calculation of Madelung constant / W. A. Harrison // Physical Review B. – 2006. – Vol. 73. – P. 212103.
113. Zemin, Y. Structure and electrochemical properties of LiMn₂O₄ / Y. Zemin, Z. Liancheng // Transaction of Nonferrous Metals Society of China. – 2007. – Vol. 7. – P. 659-664.
114. Еремин, И. Е. Модифицированный алгоритм расчета постоянной Маделунга / И. Е. Еремин, М. С. Сычев // Информатика и системы управления. – 2010. – № 3(25). – С. 27–34.
115. Сычёв, М. С. Моделирование структурных параметров кубических кристаллических решёток: специальность 05.13.18 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» : дис. ... канд. техн. Наук / Сычёв Михаил Сергеевич ; Амурский государственный университет. – Благовещенск, 2015. – 130 с.
116. Еремин, И. Е. Модифицированный алгоритм улучшения сходимости решеточных сумм / И. Е. Еремин, М. С. Сычев // Информатика и системы управления. – 2010. – № 4(26). – С. 13–22.

117. Фазовые превращения в оксидах железа под действием микроволнового излучения / О. Н. Каньгина, В. Л. Бердинский, М. М. Филяк, [и др.] // Журнал технической физики. – 2020. – Т. 90, № 8. – С. 1311–1317.

118. Макаров, В. Н. Расчет постоянной Маделунга для оксидов железа, алюминия и калия с кубической сингонией / В. Н. Макаров, О. Н. Каньгина // Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры : Материалы Всероссийской научно-методической конференции, Оренбург, 23–25 января 2019 года. – Оренбург: Оренбургский государственный университет, 2019. – С. 2916–2923.

119. Макаров, В. Н. К вопросу о разрыве ковалентных связей элементарной ячейки каолинита в СВЧ-поле / В. Н. Макаров, М. М. Серегин, О. Н. Каньгина // Инженерный вестник Дона. – 2020. – № 4(64). – С. 2.

120. Макаров, В. Н. Расчет постоянных Маделунга для оценки энергии ионной связи в кристаллах оксидов с кубической, тетрагональной и ромбической сингониями / В. Н. Макаров // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2020. – № 4(56). – С. 119–131.

121. Madelung, E. Das elektrische feld in systemen von regelmaessig angeordneten punktladungen / E. Madelung // Phys. Zs. – 1918. – Vol. 19. – P. 524–533.

122. Tosi, M. P. Cohesion of ionic solids in the Born model / M. P. Tosi // Solid State Physics. – 1964. – Vol. 16. – P. 1–120.

123. Evjen, H. M. On the stability of certain heteropolar crystals / H. M. Evjen // Phys. Rev. – 1932. – Vol. 39(4). – P. 675–687.

124. Ewald, P. Die Berechnung optischer und elektrostatischer Gitterpotentiale / P. Ewald // Annalen der Physik. – 1921. – Vol. 369(3). – P. 253–287.

125. Авилов, В. В. О вычислении постоянной Маделунга кристаллов / В. В. Авилов // ФТТ. – 1972. – Т. 14(9). – С. 2550–2554.

126. Zhao, Q. Harmonic surface mapping algorithm for fast electrostatic sums / Q. Zhao, J. Liang, Z. Xu // *The Journal of Chemical Physics*. – 2018. – Vol. 149. – P. 84111–84120.
127. Crandall, R. E., Elementary function expansions for Madelung constants / R. E. Crandall, J. P. Buhler // *J. Phys. A: Math. Gen.* – 1987. – Vol. 20(16). – P. 5497–5510.
128. Lamba, S. Dipolar interaction energy for a system of magnetic nanoparticles / S. Lamba // *Phys. Stat. Sol. B*. – 2004. – Vol. 241(13). – P. 3022–3028.
129. Фомин, Д. В. Детерминированное моделирование кристаллической структуры гексагонального алмаза. II / Д. В. Фомин // *Информатика и системы управления*. – 2019. – № 3(61). – С. 32–41.
130. Фомин, Д. В. Детерминированное моделирование кристаллической структуры гексагонального алмаза. III / Д. В. Фомин // *Информатика и системы управления*. – 2019. – № 4(62). – С. 45–57.
131. Фомин, Д. В. Моделирование плотности упаковки простейшей гексагональной решетки. I / Д. В. Фомин // *Информатика и системы управления*. – 2021. – № 4(70). – С. 39–52.
132. Фомин, Д. В. Моделирование плотности упаковки простейшей гексагональной решетки. III / Д. В. Фомин // *Информатика и системы управления*. – 2022. – № 4(74). – С. 42–53.
133. Фомин, Д. В. Детерминированное моделирование кристаллической структуры гексагонального алмаза. I / Д. В. Фомин // *Информатика и системы управления*. – 2019. – № 2(60). – С. 48–56.
134. Адсорбция органических веществ с применением цеолитов / И. И. Меньшова, Е. Заболотная, В. В. Челноков, А. В. Гарабаджиу // *Известия высших учебных заведений. Серия: Химия и химическая технология*. – 2021. – Т. 64, № 8. – С. 131–138.
135. Никулина, Е. Г. Неспецифическая профилактика осложнений стресса природными цеолитами / Е. Г. Никулина // *Вестник ЮУрГУ*.

Образование, здравоохранение, физическая культура. – 2010. – №24 (200). – С. 113–116.

136. Каталитические превращения н-гексана на модифицированном высококремнистом цеолите / А. А. Афонин, Т. В. Аниськова, Т. К. Ветрова [и др.] // Известия ВУЗов. Химия и химическая технология. – 2012. – Т. 55, №5. – С. 101–104.

137. Синтез высококремнеземных цеолитов с использованием глубоких эвтектических растворителей / Л. Л. Коробицына, В. В. Козлов, М. Р. Шолитодов // Известия ВУЗов. Химия и химическая технология. – 2023. – Т. 66, №11. – С. 76–84.

138. Гордина, Н. Е. Механохимическая активация как способ интенсификации процессов синтеза низкомодульных цеолитов / Н. Е. Гордина // Известия ВУЗов. Химия и химическая технология. – 2018. – Т. 61, №7. – С. 4–22.

139. Милинский, А. Ю. Диэлектрические свойства композитов нанокристаллическая целлюлоза – иодат калия / А. Ю. Милинский // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. – 2017. – №1. – С. 93–99.

140. Мамедова, Г. А. Гидротермальный синтез цеолита ZSM-10 / Г. А. Мамедова // Вестник МГТУ им. Н. Э. Баумана. Сер. Естественные науки. – 2018. – №5 (80). – С. 125–133.

141. Взаимодействие в системе бром-цеолит NaX / Г. Н. Амелина, В. В. Гордиенко, И. И. Жерин // Известия ТПУ. – 2002. – №3. – С. 151–157.

142. Лобанов, Д. А. Анализ синтетических цеолитов / Д. А. Лобанов, В. О. Лукин, И. И. Фатыхов // Вестник Казанского технологического университета. – 2013. – №5. – С. 199–201.

143. Пожидаев, Ю. Н. Регенерация природных цеолитов / Ю. Н. Пожидаев, Е. Г. Филатова, О. И. Помазкина // МНИЖ. – 2014. – №12–1 (31). – С. 88–89.

144. Цеолиты Амурской области / В. В. Юрков, Л. И. Рогулина, С. В. Ланкин // Вестник ДВО РАН. – 2004. – №1. – С. 69–79.
145. Еранская, Т. Ю. Получение цеолита с использованием ультразвука / Т. Ю. Еранская // Вестник Амурского государственного университета. Серия: Естественные и экономические науки. – 2023. – №103. – С. 80–82.
146. Zeolite Structures // Database of Zeolite Structures of Structure Commission of the International Zeolite Association (IZA–SC). – URL : <https://www.iza-structure.org/databases/>. (access: 14.05.2024).
147. Эффективный расчет плотности упаковки кристаллической решетки перовскита / И. Е. Еремин, В. В. Еремина, М. С. Сычев, В. Г. Моисеенко // Доклады Академии наук. – 2016. – Т. 469, № 4. – С. 419–421.
148. Фомин, Д. В. Анализ программного обеспечения для создания и исследования модели кристаллической решётки лонсдейлита / Д. В. Фомин // Естественные и математические науки в современном мире. – 2016. – № 10(45). – С. 37–44.
149. Canneyt, M. V. Run-Time Library (RTL): Reference guide / M. V. Canneyt // FreePascal.ORG, 2017. – 2034 с. – URL : <ftp://ftp.freepascal.org/pub/fpc/docs-pdf/rtl.pdf>. (access: 12.03.2020).
150. Azeem, M. A. Start programming using Object Pascal / M. A. Azeem. – Code.Sd, 2013. – P 150.
151. Michaël Van Canneyt Free Pascal: Reference guide [Электронный ресурс] / FreePascal.ORG, 2017. – 212 с. – Режим доступа: <ftp://ftp.freepascal.org/pub/fpc/docs-pdf/ref.pdf>.
152. Canneyt, M. V. Run-Time Library (RTL): Reference guide / M. V. Canneyt // FreePascal.ORG, 2017. – 2034 с. – URL : <ftp://ftp.freepascal.org/pub/fpc/docs-pdf/flc.pdf>. (access: 12.03.2020).
153. Ачкасов, В. Ю. Программирование в Lazarus / В. Ю. Ачкасов. – Москва: Интуит, 2016. – 520 с.
154. Мансуров, К. Т. Основы программирования в среде Lazarus / К. Т. Мансуров. – Москва: Электронная книга, 2010. – 772 с.

155. Ефлов, В. Б. Программирование на языке Pascal в среде Lazarus / В. Б. Ефлов, Ю. В. Никонова. – Петрозаводск: ПетрГУ, 2013. – 53 с.
156. Lazarus IDE: The professional Free Pascal RAD IDE // Lazarus and Free Pascal Team. – URL : <http://www.lazarus-ide.org>. (access 13.03.2020).
157. Алексеев, Е. Р. Free Pascal и Lazarus: Учебник по программированию / Е. Р. Алексеев, О. В. Чеснокова, Т. В. Кучер. – Москва: АЛЬТ Линукс, ДМК Пресс, 2010. – 438 с.
158. BGRA Bitmap // FreePascalOrg. – URL : <https://wiki.freepascal.org/BGRABitmap>. (access 13.03.2020).
159. BGRA Bitmap Tutorial // FreePascalOrg. – URL : https://wiki.freepascal.org/BGRABitmap_tutorial. (access 13.03.2020).
160. Lazarus component Library (LCL): Reference guide Lazarus and Free Pascal Team. – URL : <https://lazarus-ccr.sourceforge.io/docs/lcl/index.html>. (access 17.04.2021).
161. SQLite Home Page // SQLite Consortium, 2023. – URL : <https://www.sqlite.org/index.html>. (access 17.04.2021).
162. Полянин, М. SQLite – самая простая база данных, которая работает везде / М. Полянин // КОД. – 2022. – URL : <https://thecode.media/sqlite/>. (дата обращения: 21.12.2023).
163. Database Concepts // Oracle Help Center. – URL: <https://docs.oracle.com/en/database/oracle/oracle-database/21/cncpt/sql.html>. (access: 20.12.2023).
164. Кара-Ушанов, В. Ю. SQL – язык реляционных баз данных: учебное пособие / В. Ю. Кара-Ушанов. – Екатеринбург: Уральский Университет, 2016. – 156 с.
165. Грофф, Д. Р. SQL. Полное руководство / Д. Р. Грофф, Э. Д. Оппель, П. Н. Вайнберг. – Москва: Диалектика, 2019. – 960 с.
166. DB Browser for SQLite // The Official site of the DB Browser for SQLite project. – URL : <https://sqlitebrowser.org/>. (access: 11.07.2023).

167. Froebel, F. DB Browser for SQLite wiki / F. Froebel // DB Browser for SQLite Info Center. – URL : <https://github.com/sqlitebrowser/sqlitebrowser/wiki>. (access: 15.07.2023).
168. Паттерны объектно-ориентированного проектирования / Э. Гамма, Р. Хелм, Р. Джонсон, Дж. Влссидес. – Санк-Петербург: Питер, 2021. – 448 с.
169. Мартин, Р. Чистый код: создание, анализ и рефакторинг / Р. Мартин. – Сант-Петербург: Питер, 2018. – 464 с.
170. Орлов, С. А. Технологии разработки программного обеспечения / С. А. Орлов, Б. Я. Цилькер. – Сант-Петербург: Питер, 2012. – 608 с.
171. Маклафлин, Б. Объектно-ориентированный анализ и проектирование / Б. Маклафлин, Г. Поллайс, Д. Уэст. – Санкт-Петербург: Питер, 2013. – 608 с.
172. Zullighoven, H. Object-oriented construction handbook. Developing Application-oriented software with the tools and materials approach / H. Zullighoven. – San Francisco: Elsevier, 2005. – 545 p.
173. Семакин, И. Г. Основы алгоритмизации и программирования / И. Г. Семакин, А. П. Шестакова. – Москва: Издательский центр «Академия», 2012. – 400 с.
174. Brown, S. Software architecture for developers / S. Brown. – Lean Publishing, 2014. – 322p.
175. Мартин, Р. Чистая архитектура. Искусство разработки программного обеспечения / Р. Мартин. – Санкт-Петербург: Питер, 2018. – 352 с.
176. Михайлюк, М. В. Методы стереовизуализации результатов моделирования неустойчивого вытеснения нефти из пористых сред / М. В. Михайлюк, А. В. Мальцев, П. Ю. Тимохин // Труды НИИСИ РАН. – 2018. – Т. 8, В. 2. – С. 125–129.
177. Stereoscopic three-dimensional visualization applied to multimodal brain images: clinical applications and a functional connectivity atlas / G. M. Rojas, M. Gálvez, P. N. Vega // Frontiers in Neuroscience. – 2014. – Vol. 8:328 – P. 1–14.

178. LibreOffice Documentation // The Document Foundation Wiki. – URL : [http://wiki.documentfoundation.org/ Documentation/ru](http://wiki.documentfoundation.org/Documentation/ru). (access: 03.05.2018).

179. MS Office: Home page // Microsoft Office. – URL : <http://products.office.com>. (access: 03.05.2018).

ПРИЛОЖЕНИЕ А.

АКТЫ О ВНЕДРЕНИИ РЕЗУЛЬТАТОВ ДИССЕРТАЦИИ

«УТВЕРЖДАЮ»
Ректор ФГБОУ ВО «Амурский
государственный университет»
д.т.н., профессор

А.Д. Плутенко
«16» ноября 2023г.



АКТ

о внедрении результатов диссертации

Мы, нижеподписавшиеся, – исполняющий обязанности директора института компьютерных и инженерных наук, д.ф.-м.н., доцент Нешименко В.В., исполняющая обязанности заведующего кафедрой информационной безопасности, к.т.н., доцент Никифорова Л.В., заместитель заведующего кафедрой стартовые и технические ракетные комплексы, к.т.н., доцент Соловьёв В.В., составили настоящий акт о том, что основные научно-практические результаты диссертационной работы **Фомина Дениса Васильевича**, выполненной на соискание учёной степени кандидата технических наук по специальности 1.2.2 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ, практически используются в рамках выполнения госбюджетной НИР «Компьютерное моделирование характеристик природных и технических систем» № АААА-А21-121012190029-8 (план 2021-2025).

А также о том, что основные результаты данной диссертационной работы внедрены в образовательный процесс, реализуемый в ФГБОУ ВО «Амурский государственный университет» по направлениям подготовки 18.03.01 «Химическая технология», 20.03.01 «Техносферная безопасность», 24.03.01 «Ракетные комплексы и космонавтика», 24.05.01 «Проектирование, производство и эксплуатация ракет и ракетно-космических комплексов» при проведении лабораторных работ по дисциплине «Материаловедение».


Объект внедрения: программа визуализации внешней структуры гексагональной кристаллической решётки сложного порядка «Хризантема» / Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2019617208 (РФ); программа расчёта коэффициента компактности гексагональной кристаллической решётки «Лотос» / Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2019665276 (РФ); программа генерации и исследования матричных описаний структуры гексагональной кристаллической решётки «Ирис» / Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2019665277 (РФ).

Область внедрения: моделирование регулярных пространственных структур сложных соединений гексагональной сингонии с целью изучения происходящих в них структурных превращений.

И.о. директора института компьютерных и инженерных наук, д.ф.-м.н., доцент


Нешименко В.В.

И.о. зав. кафедрой информационной безопасности, к.т.н., доцент


Никифорова Л.В.

Зам. зав. кафедрой стартовые и технические ракетные комплексы, к.т.н., доцент


Соловьёв В.В.

«УТВЕРЖДАЮ»

Директор ФГБУН «Институт геологии
и природопользования ДВО РАН»
член-корреспондент РАН,

доктор геолого-минералогических наук

А.А. Сорокин

«14» октября 2023г.



**АКТ
о внедрении результатов диссертации**

Мы, нижеподписавшиеся, – руководитель лаборатории керамического материаловедения ИГиП ДВО РАН, к.ф.-м.н. Демчук В.А., научный сотрудник лаборатории, к.ф.-м.н. Лукичев А.А., научный сотрудник лаборатории, к.т.н., Калиниченко Б.Б., составили настоящий акт о том, что основные научно-практические результаты диссертационной работы **Фомина Дениса Васильевича**, выполненной на соискание учёной степени кандидата технических наук по специальности 1.2.2 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ, практически используется в рамках выполнения госбюджетной НИР «Разработка научных основ процессов глубокого обогащения минерального сырья Приамурья и создания инновационных методов комплексного извлечения высокочистых компонентов».

Объект внедрения: программа определения периода простейшей гексагональной решётки «Астра» / Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2018663888 (РФ); программа визуализации структуры гексагональной кристаллической решётки «Тюльпан» / Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2019665472 (РФ).

Область использования: пространственное моделирование кристаллической структуры гексагональной сингонии, характерной для минеральных оксидов алюминия и кремния, с целью разработки теоретических и технологических основ создания композиционных материалов с заданными свойствами на основе местного сырья.

Руководитель лаборатории
керамического материаловедения,
старший научный сотрудник, к.ф.-
м.н.

В.А. Демчук

научный сотрудник лаборатории
керамического материаловедения,
к.ф.-м.н.

А.А. Лукичев

Научный сотрудник лаборатории
керамического материаловедения,
к.т.н.

Б.Б. Калиниченко

«УТВЕРЖДАЮ»

Директор федерального
государственного бюджетного
научного учреждения
«Дальневосточный научный центр
физиологии и патологии дыхания»,



к.м.н.
Е.В. Полянская

19 сентября 2023 г.

АКТ

о внедрении результатов диссертации

Я, нижеподписавшийся, заведующий лабораторией функциональных методов исследования дыхательной системы федерального государственного бюджетного научного учреждения «Дальневосточный научный центр физиологии и патологии дыхания» (ДНЦ ФПД), член-корреспондент РАН, доктор медицинских наук, профессор Перельман Юлий Михайлович, составил настоящий акт о том, что основные научно-практические результаты диссертационной работы **Фомина Дениса Васильевича**, выполненной на соискание учёной степени кандидата технических наук по специальности 1.2.2 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ, практически используются в исследованиях воздействия экстремальных факторов окружающей среды, включая загрязнения воздуха мелкими частицами, на состояние дыхательной системы.

Объект внедрения: программа моделирования структурных параметров пространственных решёток «Оранжевая» / Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2023617122 (РФ).

Область использования: системный анализ и моделирование функционального состояния дыхательной системы при действии экстремальных факторов окружающей среды, а также разработка информационно-аналитических моделей комплексного, многоуровневого воздействия климато-экологических условий на формирование респираторной патологии.

Заведующий лабораторией
функциональных методов
исследования дыхательной системы
ДНЦ ФПД, член-корреспондент
РАН, д.м.н., профессор

Ю.М. Перельман

ТУСУР

Министерство науки и высшего образования РФ
Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ СИСТЕМ УПРАВЛЕНИЯ
И РАДИОЭЛЕКТРОНИКИ»

ОКПО 02069326, ОГРН 1027000867068,
ИНН 7021000043, КПП 701701001

пр. Ленина, 40, г. Томск, 634050

тел: (382 2) 510-530
факс: (382 2) 513-262, 526-365
e-mail: office@tusur.ru
https:// www.tusur.ru



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по научной работе и инновациям,
кандидат технических наук, доцент

_____ А.Г. Лоцилов

«02» 06 2024 г.

АКТ

о внедрении (использовании) результатов диссертации

Выдан для предоставления в диссертационный Совет, свидетельствующий о том, что основные научно-практические результаты диссертационной работы **Фомина Дениса Васильевича**, выполненной на соискание учёной степени кандидата технических наук по специальности 1.2.2 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ, практически используются в научно-исследовательской работе магистрантов и аспирантов в лаборатории радиационного и космического материаловедения (РКМ) ТУСУР:

1. Программа для ЭВМ № 2023617122 (РФ). Программа моделирования структурных параметров пространственных решёток «Оранжевая» / Амурский государственный университет; Фомин Д.В., Еремин И.Е. – Зарегистрировано 05.04.2023, бюллетень № 04.
2. Программа для ЭВМ № 2019665276 (РФ). Программа расчёта коэффициента компактности гексагональной кристаллической решётки «Лотос» / Амурский государственный университет; Фомин Д.В., Еремин И.Е. – Зарегистрировано 21.11.2019, бюллетень № 12.

Заведующий лабораторией РКМ,
д.ф.-м.н., профессор

М.М. Михайлов

«17» 06 2024 г.

«УТВЕРЖДАЮ»
Директор ООО «Интеллектуальные системы»
Д. В. Буйницкий
«23» октября 2023 г.



**АКТ
о внедрении результатов диссертации**

Мы, нижеподписавшиеся, – генеральный директор ООО «Интеллектуальные системы» Буйницкий Даниил Валерьевич, ведущий программист Бахматов Андрей Сергеевич, составили настоящий акт о том, что основные научно-практические результаты диссертационной работы **Фомина Дениса Васильевича**, выполненной на соискание учёной степени кандидата технических наук по специальности 1.2.2 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ, практически используются при тестировании аппаратных комплексов различных поколений и архитектур для оценки и сравнения производительности.

Объект внедрения: программа моделирования структурных параметров пространственных решёток «Оранжевая» / Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2023617122 (РФ).

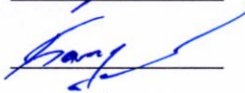
Область использования: Нагрузочное тестирование аппаратных комплексов различных архитектур для определения закономерностей между энергопотреблением и производительностью при использовании различных типов алгоритмов.

Генеральный директор



Д. В. Буйницкий

Ведущий программист



А. С. Бахматов

Инженер-программист



Р. А. Алексанов

ПРИЛОЖЕНИЕ Б.

СВИДЕТЕЛЬСТВА О РЕГИСТРАЦИИ ПРОГРАММ ДЛЯ ЭВМ

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2018663888

Программа определения периода простейшей
гексагональной решётки «Астра»

Правообладатель: *Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования «Амурский
государственный университет» (ФГБОУ ВО «АмГУ») (RU)*

Авторы: *Фомин Денис Васильевич (RU),
Ерёмин Илья Евгеньевич (RU)*




Заявка № 2018661396

Дата поступления 19 октября 2018 г.

Дата государственной регистрации

в Реестре программ для ЭВМ 06 ноября 2018 г.

Руководитель Федеральной службы
по интеллектуальной собственности

 Г.П. Илев

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2019617208

**Программа визуализации внешней структуры
гексагональной кристаллической решётки сложного
порядка «Хризантема»**

Правообладатель: **Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования «Амурский
государственный университет» (ФГБОУ ВО «АмГУ») (RU)**

Авторы: **Фомин Денис Васильевич (RU),
Ерёмин Илья Евгеньевич (RU)**




Заявка № **2019616045**

Дата поступления **27 мая 2019 г.**

Дата государственной регистрации

в Реестре программ для ЭВМ **04 июня 2019 г.**

Руководитель Федеральной службы
по интеллектуальной собственности

 **Г.П. Ивлиев**

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2019665472

**Программа визуализации структуры гексагональной
кристаллической решётки «Тюльпан»**

Правообладатель: **Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования «Амурский
государственный университет», (ФГБОУ ВО «АмГУ») (RU)**

Авторы: **Фомин Денис Васильевич (RU),
Ерёмин Илья Евгеньевич (RU)**



Заявка № **2019664361**

Дата поступления **11 ноября 2019 г.**

Дата государственной регистрации

в Реестре программ для ЭВМ **22 ноября 2019 г.**

Руководитель Федеральной службы
по интеллектуальной собственности

Г.П. Ивлиев

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2019665277

**Программа генерации и исследования матричных описаний
структуры гексагональной кристаллической решётки
«Ирис»**

Правообладатель: **Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования «Амурский
государственный университет» (ФГБОУ ВО «АмГУ») (RU)**

Авторы: **Фомин Денис Васильевич (RU),
Ерёмин Илья Евгеньевич (RU)**

Заявка № **2019664345**

Дата поступления **11 ноября 2019 г.**

Дата государственной регистрации

в Реестре программ для ЭВМ **21 ноября 2019 г.**

Руководитель Федеральной службы
по интеллектуальной собственности

 **Г.П. Ивлиев**



РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2019665276

**Программа расчёта коэффициента компактности
гексагональной кристаллической решётки «Лотос»**

Правообладатель: **Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования «Амурский
государственный университет» (ФГБОУ ВО «АмГУ») (RU)**

Авторы: **Фомин Денис Васильевич (RU),
Ерёмин Илья Евгеньевич (RU)**

Заявка № **2019664344**

Дата поступления **11 ноября 2019 г.**

Дата государственной регистрации

в Реестре программ для ЭВМ **21 ноября 2019 г.**

Руководитель Федеральной службы
по интеллектуальной собственности

Г.П. Ивлиев



РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2020662975

**Программа расчёта коэффициента компактности
гексагональной кристаллической структуры на основе
классической матричной модели «Азалия»**

Правообладатель: *Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования «Амурский
государственный университет» (ФГБОУ ВО «АмГУ») (RU)*

Авторы: *Фомин Денис Васильевич (RU),
Ерёмин Илья Евгеньевич (RU)*


Заявка № 2020661955

Дата поступления 09 октября 2020 г.

Дата государственной регистрации

в Реестре программ для ЭВМ 21 октября 2020 г.

*Руководитель Федеральной службы
по интеллектуальной собственности*

 Г.П. Ивлиев



РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2020662936

**Программа расчёта коэффициента компактности
гексагональной кристаллической структуры на основе
компактной матричной модели «Лилия»**

Правообладатель: **Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования «Амурский
государственный университет» (ФГБОУ ВО «АмГУ») (RU)**

Авторы: **Фомин Денис Васильевич (RU),
Ерёмин Илья Евгеньевич (RU)**




Заявка № **2020661954**

Дата поступления **09 октября 2020 г.**

Дата государственной регистрации

в Реестре программ для ЭВМ **21 октября 2020 г.**

Руководитель Федеральной службы
по интеллектуальной собственности

 **Г.П. Ивлиев**

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2023617122

**Программа моделирования структурных параметров
пространственных решёток «Оранжерея»**

Правообладатель: **Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
"Амурский государственный университет" (RU)**

Авторы: **Фомин Денис Васильевич (RU), Ерёмин Илья
Евгеньевич (RU)**

Заявка № **2023616168**

Дата поступления **30 марта 2023 г.**

Дата государственной регистрации

в Реестре программ для ЭВМ **05 апреля 2023 г.**



*Руководитель Федеральной службы
по интеллектуальной собственности*

ДОКУМЕНТ ПОДПИСАН ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДПИСЬЮ
Сертификат 68b80977e14e4010a94edbd24145d5c7
Владелец: **Зубов Юрий Сергеевич**
Действителен с 26.05.2022 по 26.05.2023

Ю.С. Зубов

ПРИЛОЖЕНИЕ В.

КОМПАКТНАЯ МАТРИЧНАЯ МОДЕЛЬ РЕШЁТКИ ГПУ

Матрица 0

$$\begin{vmatrix} 1 \end{vmatrix}$$

Матрица 2

$$\begin{vmatrix} 0 & & \\ 0 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}$$

Матрица 4

$$\begin{vmatrix} 0 & & & & \\ 0 & 3 & & & \\ 0 & 0 & 0 & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & 3 & 0 & 2 \end{vmatrix}$$

Матрица 6

$$\begin{vmatrix} 3 & & & & & & \\ 0 & 0 & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 12 & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \\ 6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 \end{vmatrix}$$

Матрица 8

$$\begin{vmatrix} 0 & & & & & & & & \\ 0 & 0 & & & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & \\ 0 & 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \end{vmatrix}$$

Матрица 1

$$\begin{vmatrix} 0 & \\ 0 & 0 \end{vmatrix}$$

Матрица 3

$$\begin{vmatrix} 0 & & & \\ 0 & 0 & & \\ 0 & 0 & 0 & \\ 9 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}$$

Матрица 5

$$\begin{vmatrix} 0 & & & & & \\ 0 & 0 & & & & \\ 0 & 0 & 0 & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}$$

Матрица 7

$$\begin{vmatrix} 0 & & & & & & & \\ 0 & 0 & & & & & & \\ 0 & 6 & 0 & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & & & & \\ 0 & 12 & 0 & 0 & 0 & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 6 & 0 & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & 6 & 0 & 3 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}$$

Матрица 9

$$\begin{vmatrix} 0 & & & & & & & & \\ 0 & 0 & & & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & & & & & & \\ 6 & 0 & 0 & 0 & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & & \\ 0 & 0 & 0 & 18 & 0 & 0 & 0 & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 6 & 0 & 0 \end{vmatrix}$$

Матрица 10

0												
0	6											
0	0	3										
0	0	0	0									
0	0	12	0	3								
0	6	0	0	0	0							
0	0	0	0	0	0	0						
0	6	0	0	0	12	0	0					
0	0	0	0	0	6	0	0	0				
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
0	0	3	0	0	0	0	0	0	6	0	0	

Матрица 11

0												
0	0											
0	0	0										
0	0	0	0									
0	0	0	0	0								
0	0	6	0	0	0							
0	0	0	0	0	0	0						
0	0	0	0	0	0	0	0					
0	6	0	0	0	12	0	0	0				
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
0	0	0	0	0	0	0	6	0	0	0		
0	0	6	0	3	0	0	0	0	3	0	0	0

Матрица 12

0												
0	0											
0	0	0										
0	0	0	3									
0	0	0	0	0								
0	0	0	0	0	0							
6	0	0	0	0	0	6						
0	0	0	0	0	0	0	0					
0	0	0	0	0	0	0	0	0				
0	0	0	18	0	0	0	0	0	6			
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
6	0	0	0	0	0	9	0	0	0	0	0	2

Матрица 13

0														
0	0													
0	12	0												
0	0	0	0											
0	6	0	0	0										
0	0	6	0	12	0									
0	0	0	0	0	0	0								
0	0	6	0	0	0	0	0							
0	6	0	0	0	0	0	0	12	0					
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0				
0	0	0	0	0	6	0	0	0	0	0	0			
0	0	0	0	6	0	0	0	0	0	0	12	0		
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
0	0	0	0	0	0	0	0	3	0	0	0	0	0	0

Матрица 14

0														
0	0													
0	0	3												
0	0	0	0											
0	0	0	0	0										
0	6	0	0	0	6									
0	0	0	0	0	0	0								
0	0	0	0	0	0	0	0							
0	0	12	0	6	0	0	0	3						
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0					
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	3				
0	12	0	0	0	6	0	6	0	0	0	0			
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
0	0	0	0	0	0	0	6	0	0	0	0	0	6	
0	0	3	0	6	0	0	0	0	0	3	0	0	0	0

Матрица 15

0														
0	0													
0	0	0												
0	0	0	0											
0	0	0	0	0										
0	0	0	6	0	0	0								
0	0	0	0	0	0	0	0							
0	0	0	0	0	0	0	0	0						
6	0	0	0	0	0	18	0	0	0					
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0				
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
0	0	0	24	0	0	0	0	0	18	0	0	0		
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
9	0	0	0	0	0	12	0	0	0	0	0	3	0	0

Матрица 16

0																			
0	3																		
0	0	6																	
0	0	0	0																
0	0	6	0	0															
0	12	0	0	0	3														
0	0	0	0	0	0	0													
0	0	0	0	0	6	0	0												
0	0	6	0	12	0	0	0	0											
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0										
0	0	0	0	0	0	0	0	6	0	0									
0	6	0	0	0	0	0	12	0	0	0	0								
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0							
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	6	0	3					
0	0	0	0	6	0	0	0	0	0	12	0	0	0	0	0				
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	3	0	0	0	3	0	2		

Матрица 17

0																			
0	0																		
0	6	0																	
0	0	0	0																
0	0	0	0	0															
0	0	12	0	6	0														
0	0	0	0	0	0	0													
0	0	0	0	0	0	0	0												
0	12	0	0	0	6	0	6	0											
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0										
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0									
0	0	6	0	12	0	0	0	0	0	6	0								
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0							
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	6	0	0	0						
0	6	0	0	0	0	0	12	0	0	0	0	0	6	0					
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0				
0	0	0	0	0	0	0	6	0	0	0	0	0	4	0	0	0			
0	0	0	0	3	0	0	0	0	0	6	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Матрица 18

0																			
0	0																		
0	0	0																	
0	0	0	0																
0	0	0	0	0															
0	0	0	0	0	0														
0	0	0	0	0	0	0													
0	0	0	0	0	0	0	6												
0	0	0	0	0	0	0	0	0											
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0										
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0									
0	0	0	12	0	0	0	0	0	0	0	12								
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0							
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0						
12	0	0	0	0	0	0	24	0	0	0	0	0	0	6					
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0				
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
0	0	0	36	0	0	0	0	0	0	0	12	0	0	0	0	0	0		
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
12	0	0	0	0	0	12	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

ПРИЛОЖЕНИЕ Г.

КОМПАКТНАЯ МАТРИЧНАЯ МОДЕЛЬ РЕШЁТКИ ТИПА ВЮРЦИТ

Матрица 0

$$\begin{vmatrix} 1 \end{vmatrix}$$

Матрица 2

$$\begin{vmatrix} 0 & & \\ 0 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}$$

Матрица 4

$$\begin{vmatrix} 0 & & & & \\ 0 & 0 & & & \\ 0 & 0 & 0 & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}$$

Матрица 6

$$\begin{vmatrix} 0 & & & & & & \\ 0 & 0 & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \\ 9 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}$$

Матрица 8

$$\begin{vmatrix} 0 & & & & & & & & \\ 0 & 0 & & & & & & & \\ 0 & 0 & 3 & & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 2 \end{vmatrix}$$

Матрица 1

$$\begin{vmatrix} 0 & \\ 0 & 0 \end{vmatrix}$$

Матрица 3

$$\begin{vmatrix} 0 & & & \\ 0 & 0 & & \\ 0 & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & 4 \end{vmatrix}$$

Матрица 5

$$\begin{vmatrix} 0 & & & & & \\ 0 & 0 & & & & \\ 0 & 0 & 0 & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$$

Матрица 7

$$\begin{vmatrix} 0 & & & & & & & & \\ 0 & 0 & & & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}$$

Матрица 9

$$\begin{vmatrix} 0 & & & & & & & & & & \\ 0 & 0 & & & & & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & & & & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 9 & & & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & \\ 0 & 0 & 0 & 6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 \end{vmatrix}$$

Матрица 10

0												
0	0											
0	0	0										
0	0	0	0									
0	0	0	0	0								
0	0	0	0	0	0							
0	0	0	0	0	0	0						
0	0	0	0	0	0	0	0					
0	0	0	0	0	0	0	0	0				
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Матрица 11

0												
0	0											
0	0	0										
0	0	0	0									
0	0	0	0	0								
0	6	0	0	0	3							
0	0	0	0	0	0	0						
0	0	0	0	0	0	0	0					
0	0	0	0	0	0	0	0	0				
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
0	3	0	0	0	3	0	3	0	0	0	0	1

Матрица 12

3												
0	0											
0	0	0										
0	0	0	0									
0	0	0	0	0								
0	0	0	0	0	0							
0	0	0	0	0	0	12						
0	0	0	0	0	0	0	0					
0	0	0	0	0	0	0	0	0				
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	3

Матрица 13

0																
0	0															
0	0	0														
0	0	0	0													
0	0	0	0	0												
0	0	0	0	0	0											
0	0	0	0	0	0	0										
0	0	0	0	0	0	0	0									
0	0	0	0	0	0	0	0	0								
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0							
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0						
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0					
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0				
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1

Матрица 14

0																	
0	0																
0	0	0															
0	0	0	0														
0	0	6	0	0													
0	0	0	0	0	0												
0	0	0	0	0	0	0											
0	0	0	0	0	0	0	0										
0	0	12	0	0	0	0	0	0									
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0								
0	0	0	0	0	0	0	0	0	6	0	0						
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0					
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0				
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
0	0	0	0	6	0	0	0	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0

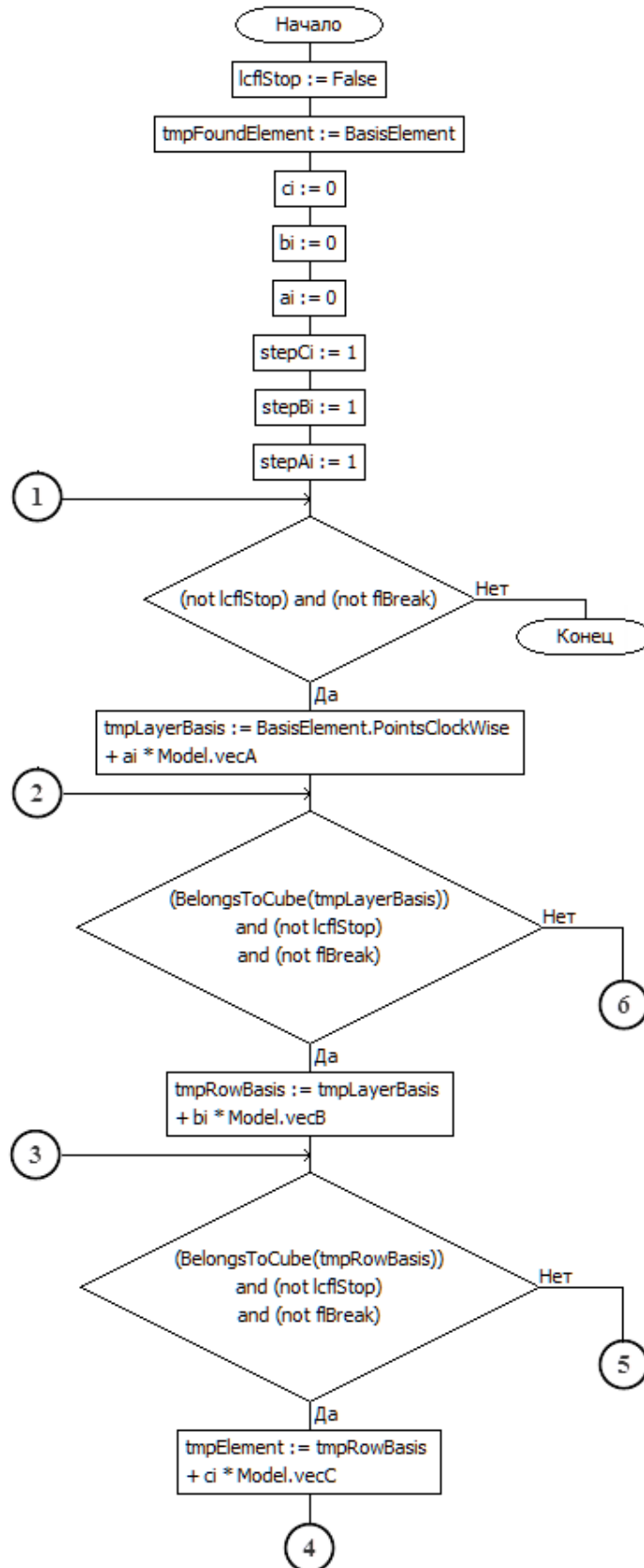
Матрица 15

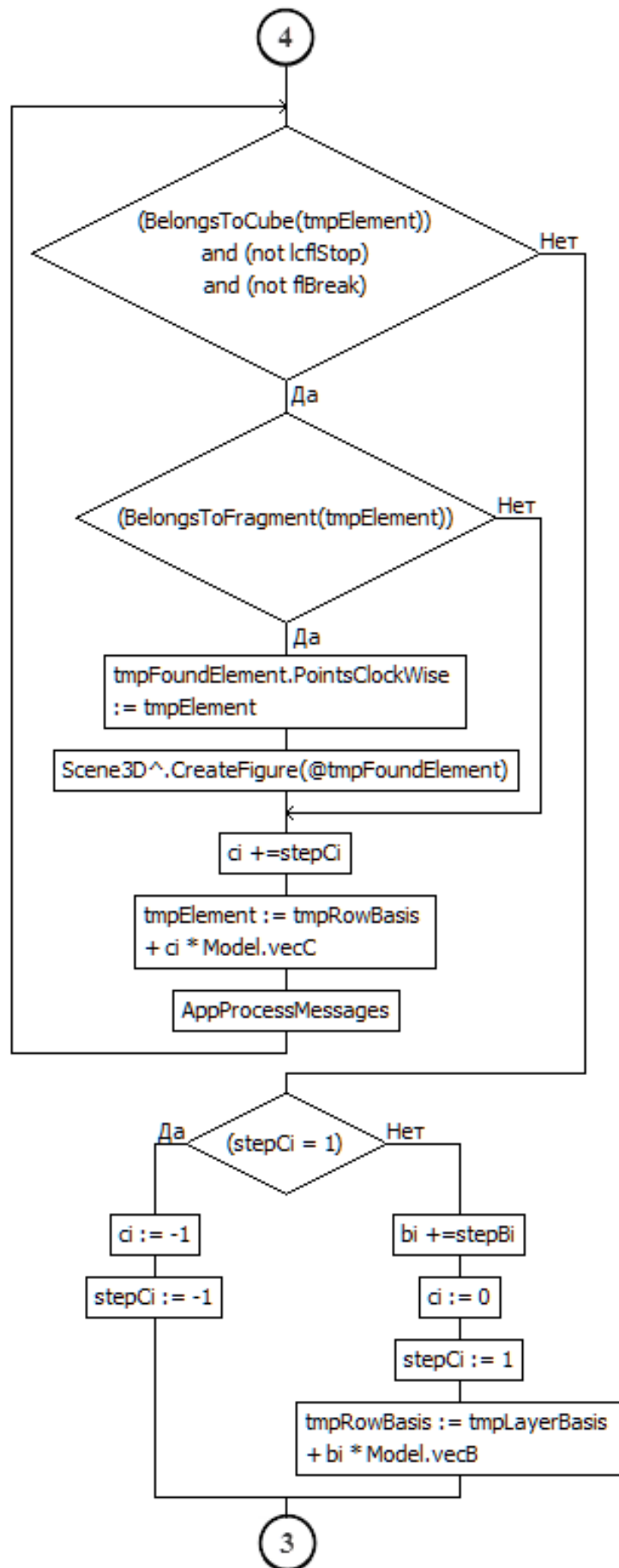
0																		
0	0																	
0	0	0																
0	0	0	3															
0	0	0	0	0														
0	0	0	0	0	0													
0	0	0	0	0	0	0												
0	0	0	0	0	0	0	0											
0	0	0	0	0	0	0	0	0										
0	0	0	12	0	0	0	0	0	3									
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0								
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0							
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0						
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0					
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0				
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
0	0	0	6	0	0	0	0	0	6	0	0	0	0	0	0	0	0	0

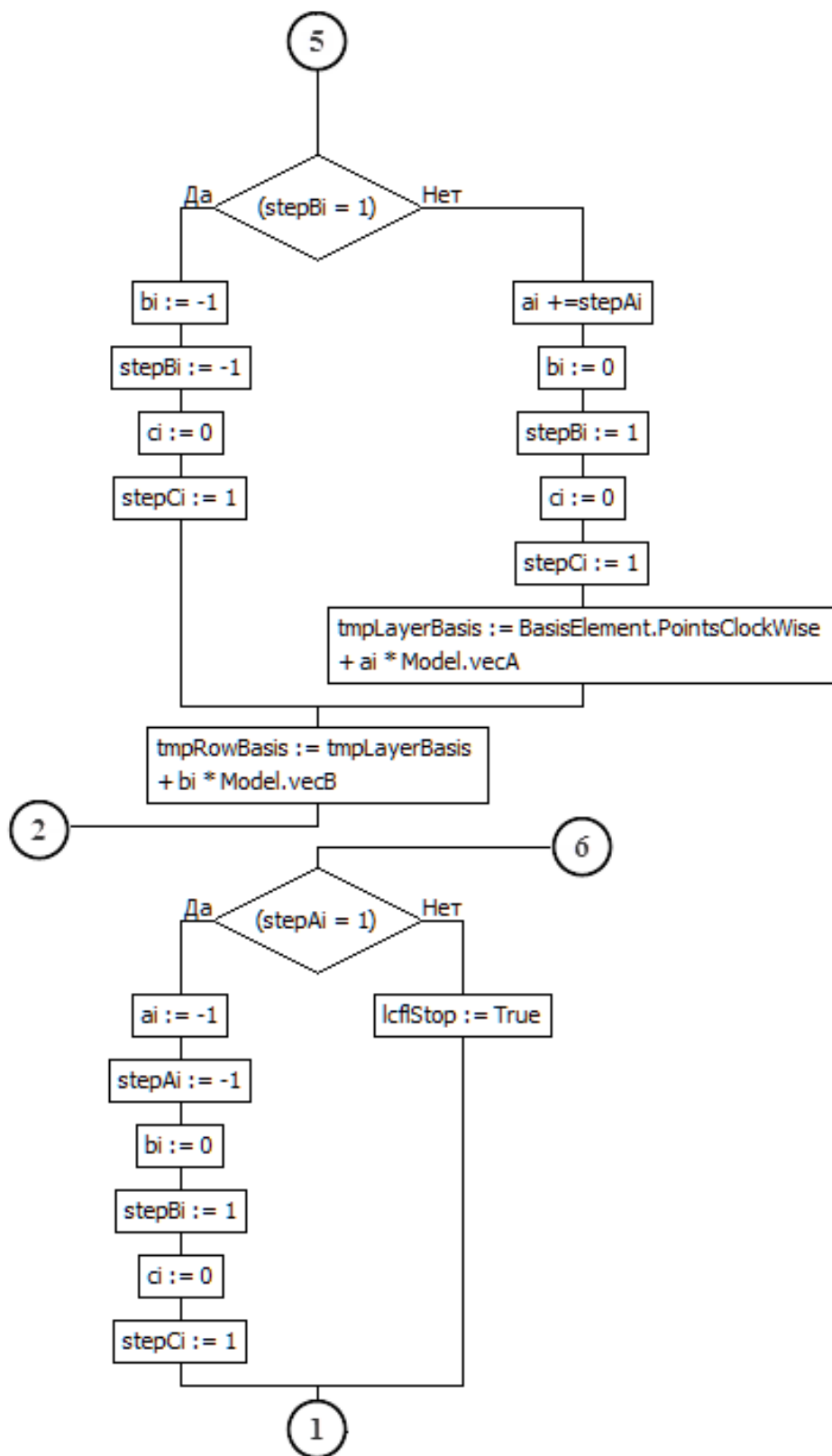
ПРИЛОЖЕНИЕ Д.

БЛОК-СХЕМЫ ОСНОВНЫХ АЛГОРИТМОВ

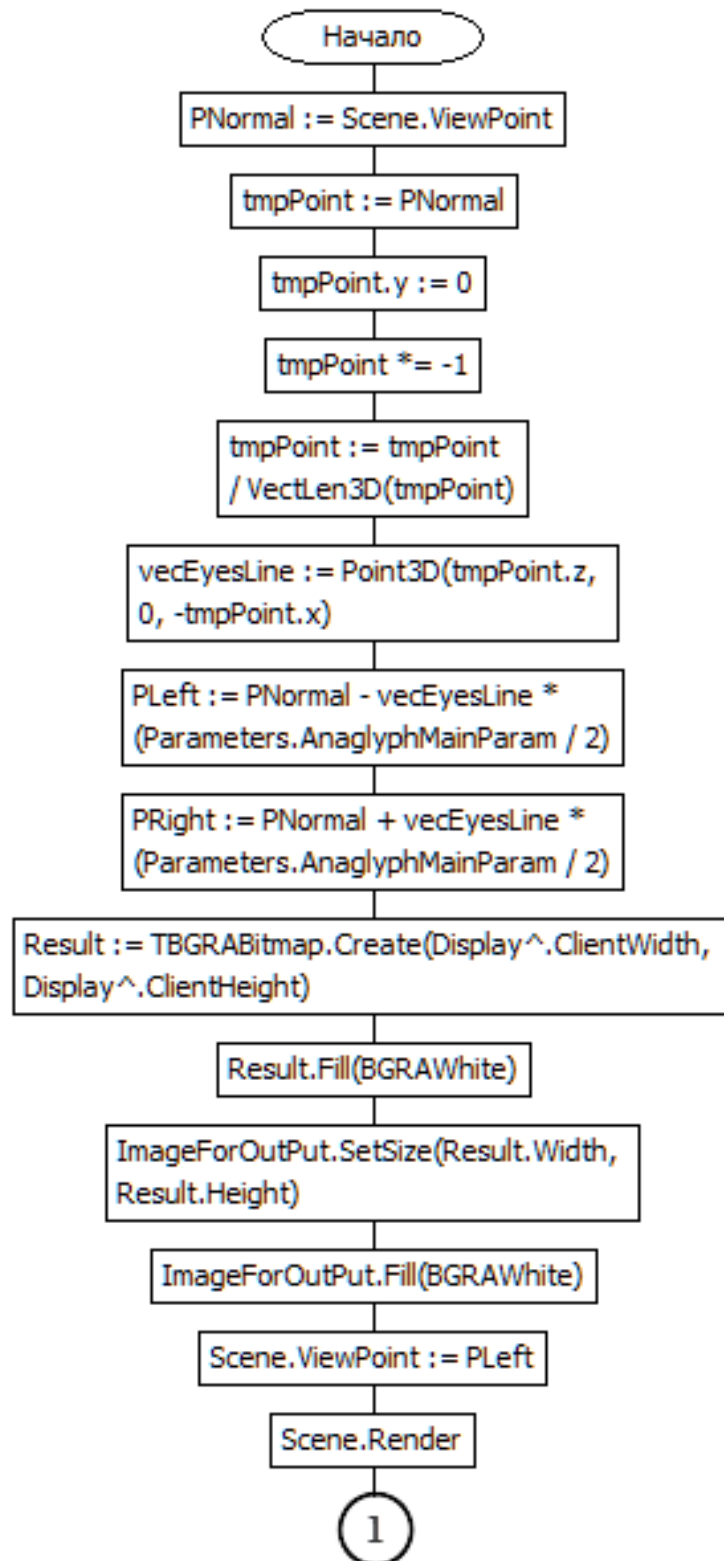
Алгоритм построения трёхмерной модели пространственной решётки

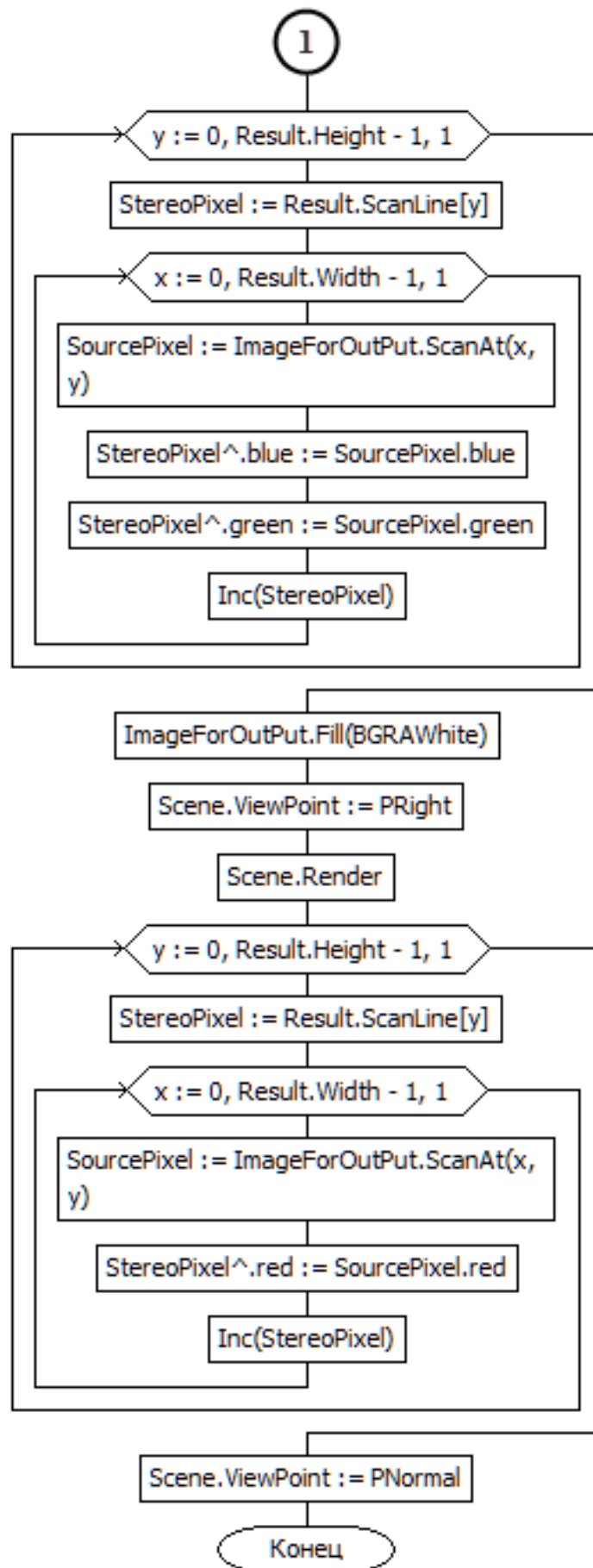




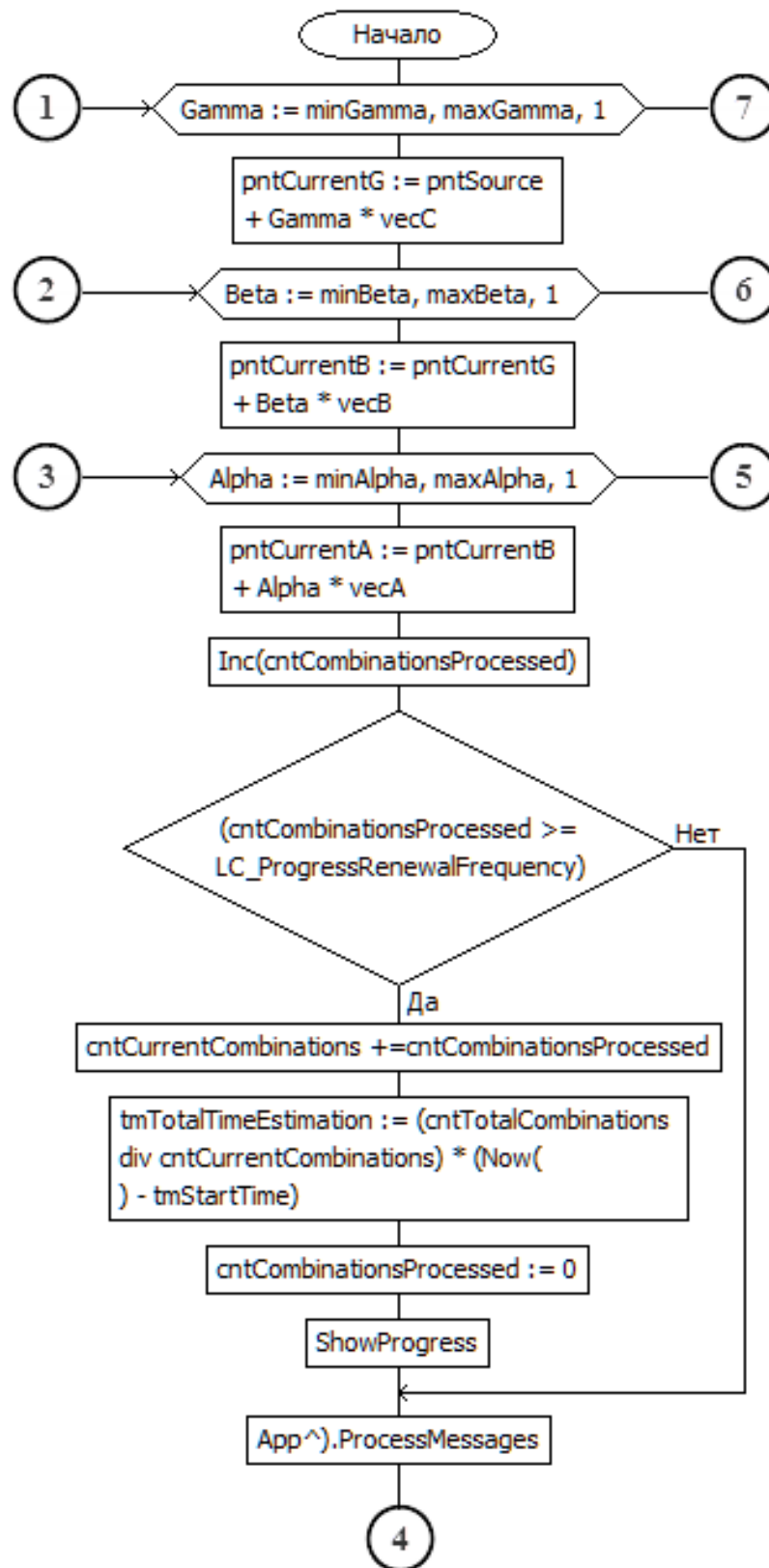


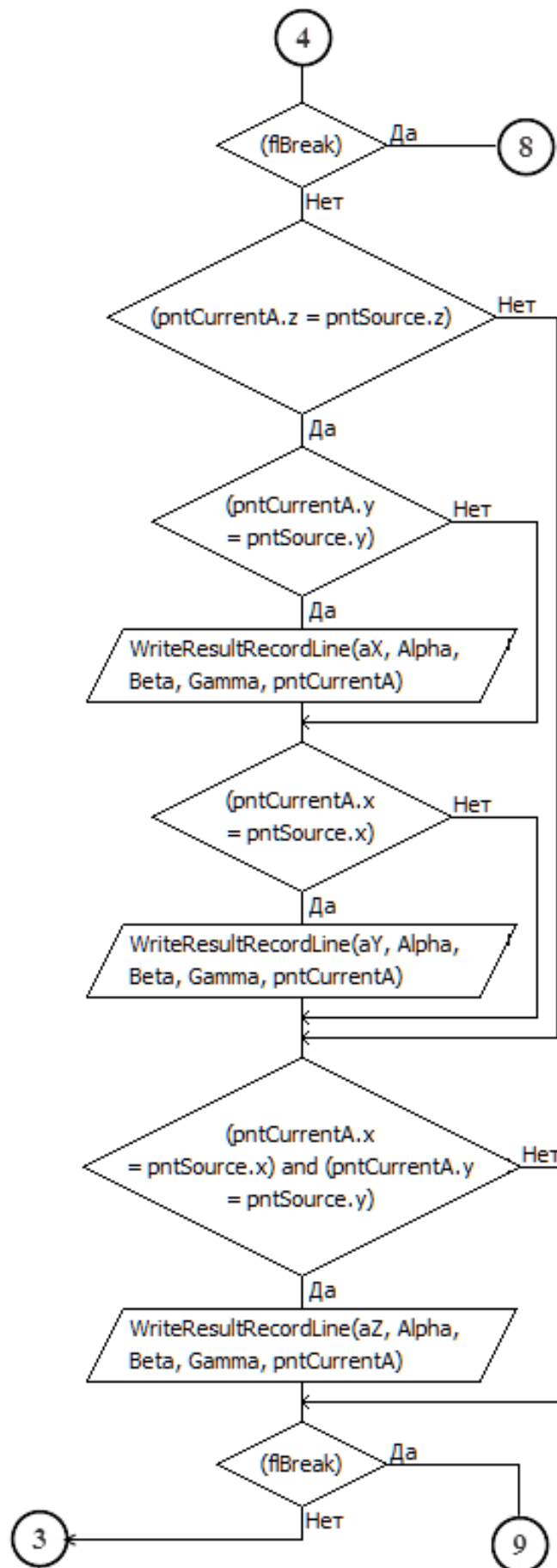
Алгоритм построения анаглифического представления.

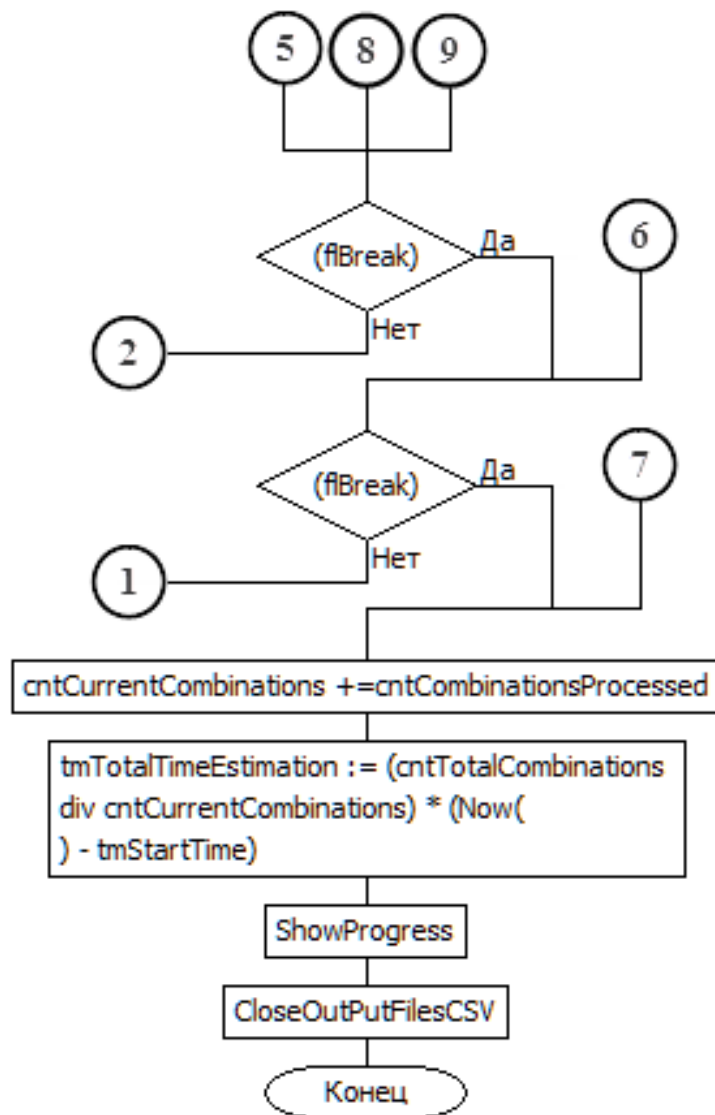




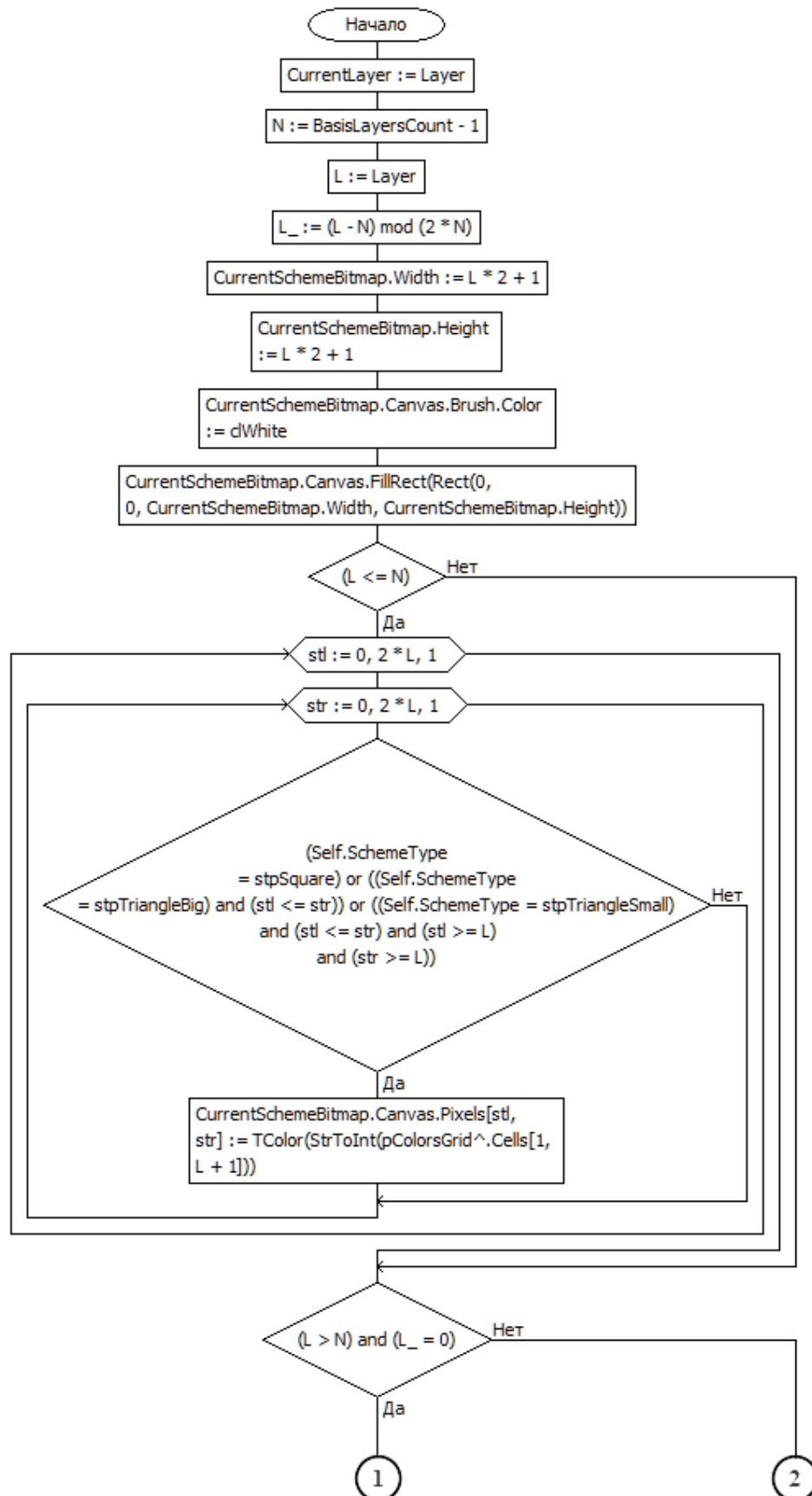
Алгоритм поиска кубического периода.

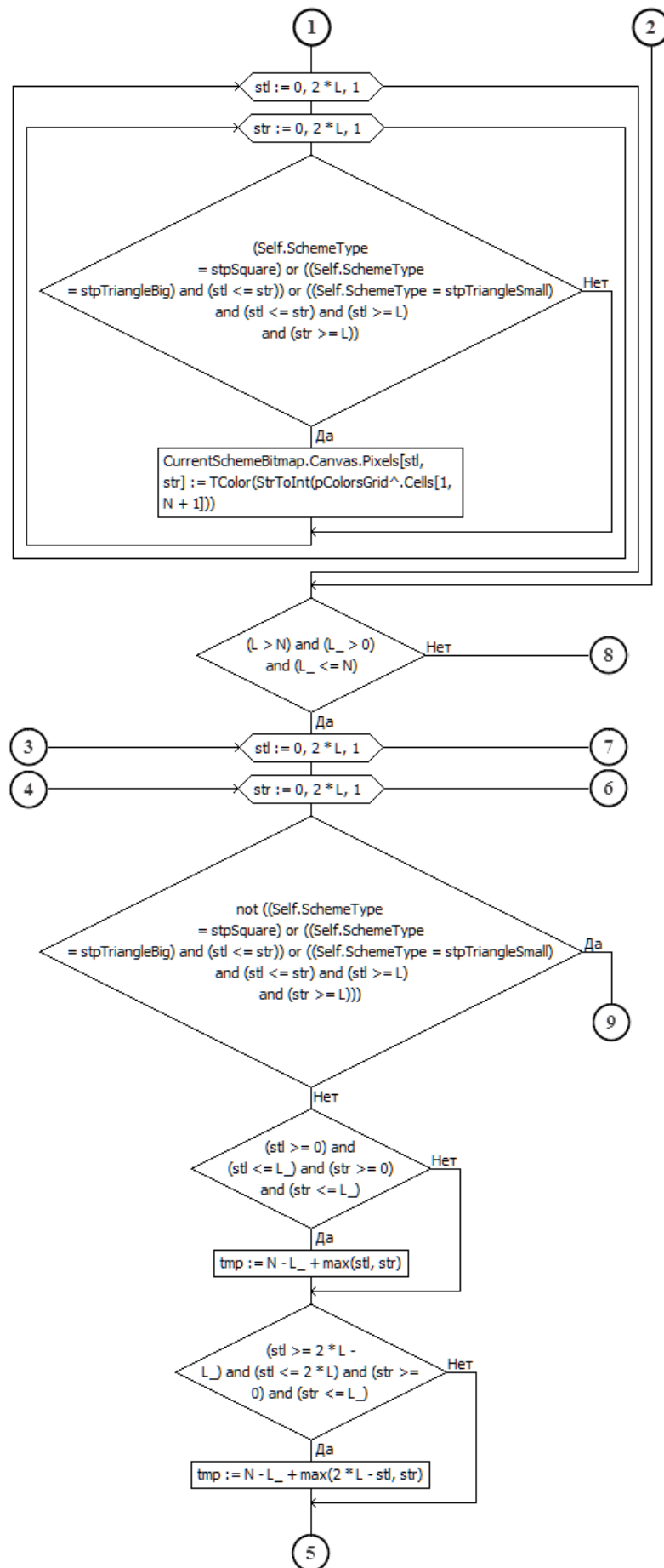


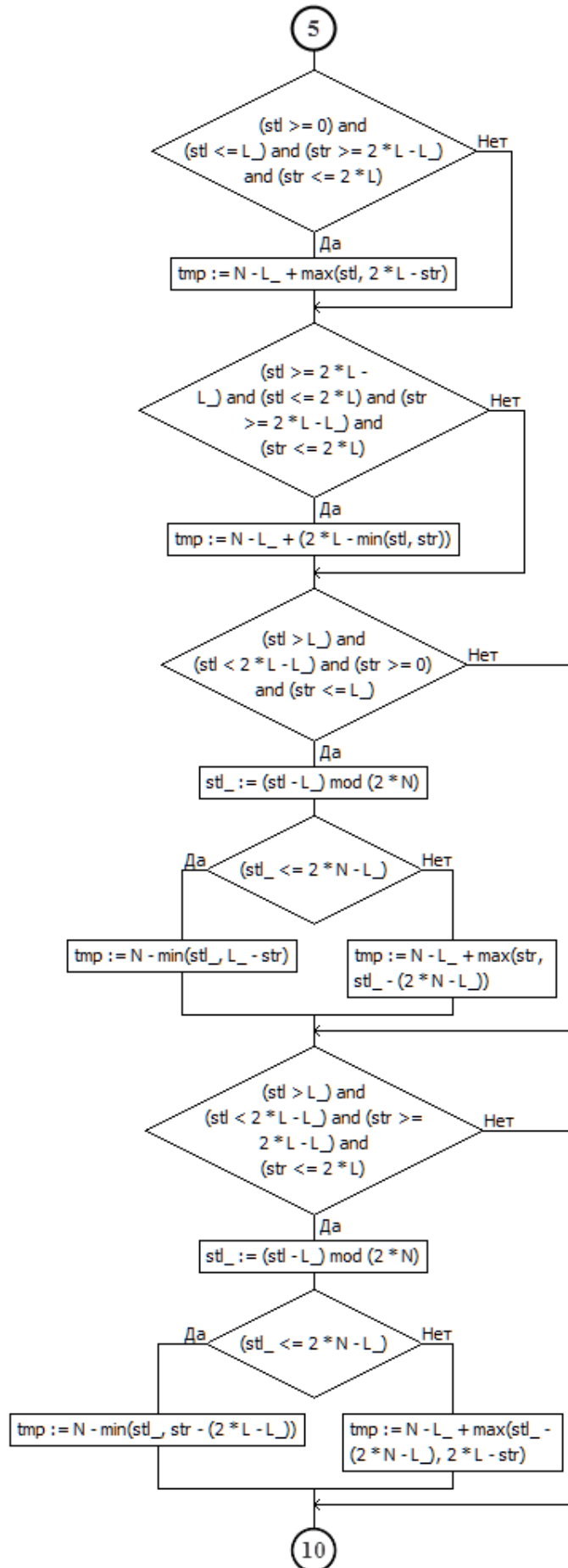


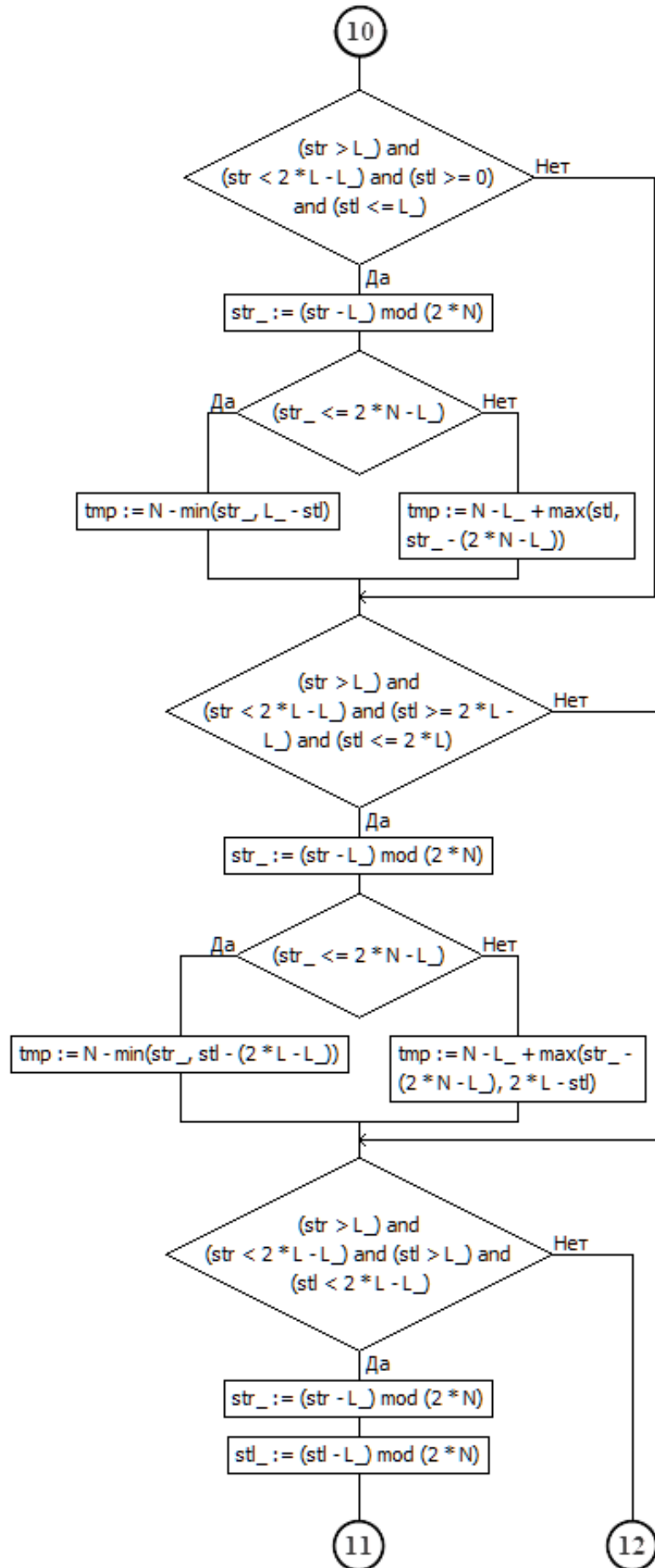


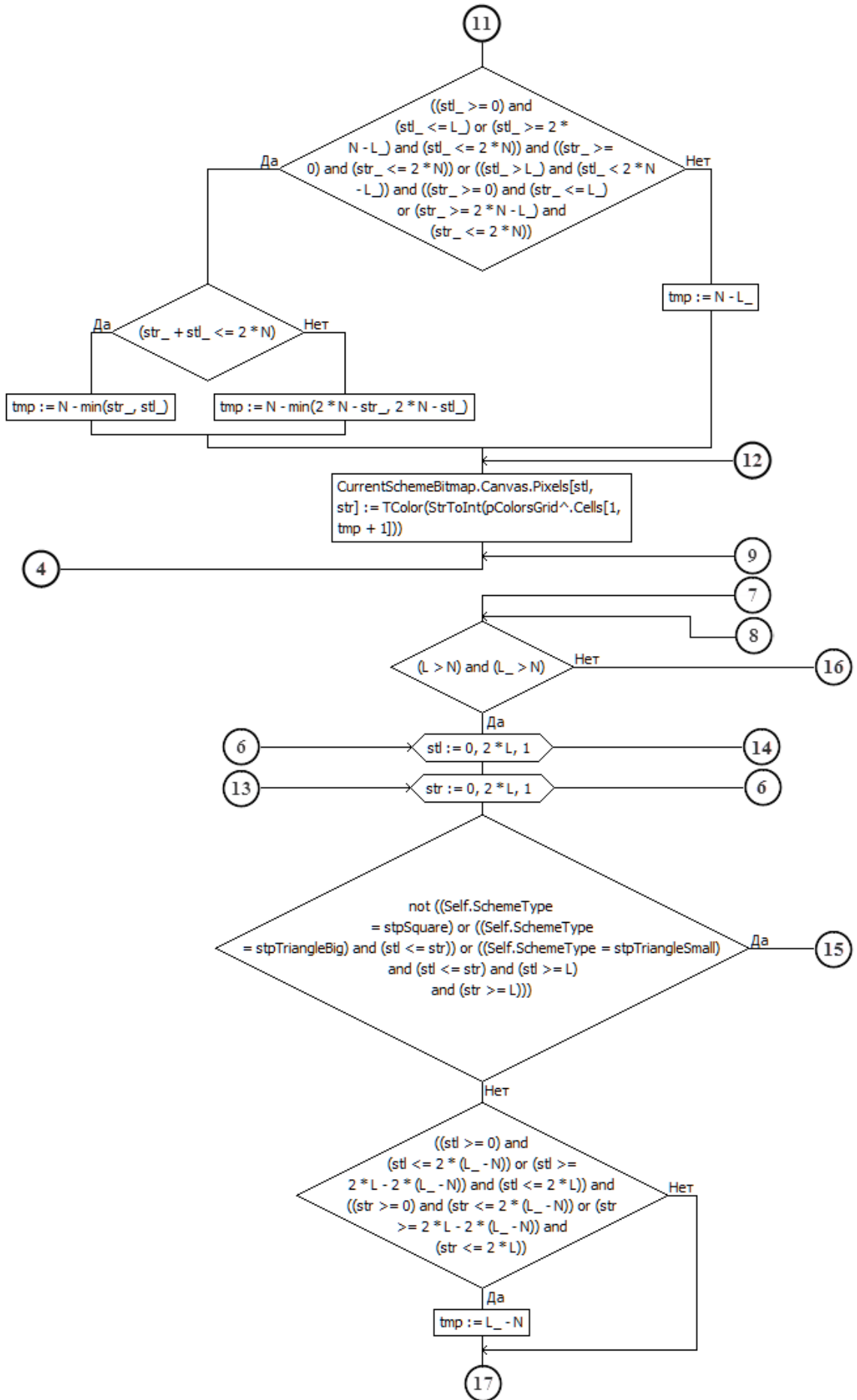
Алгоритм формирования схемы координационного слоя.

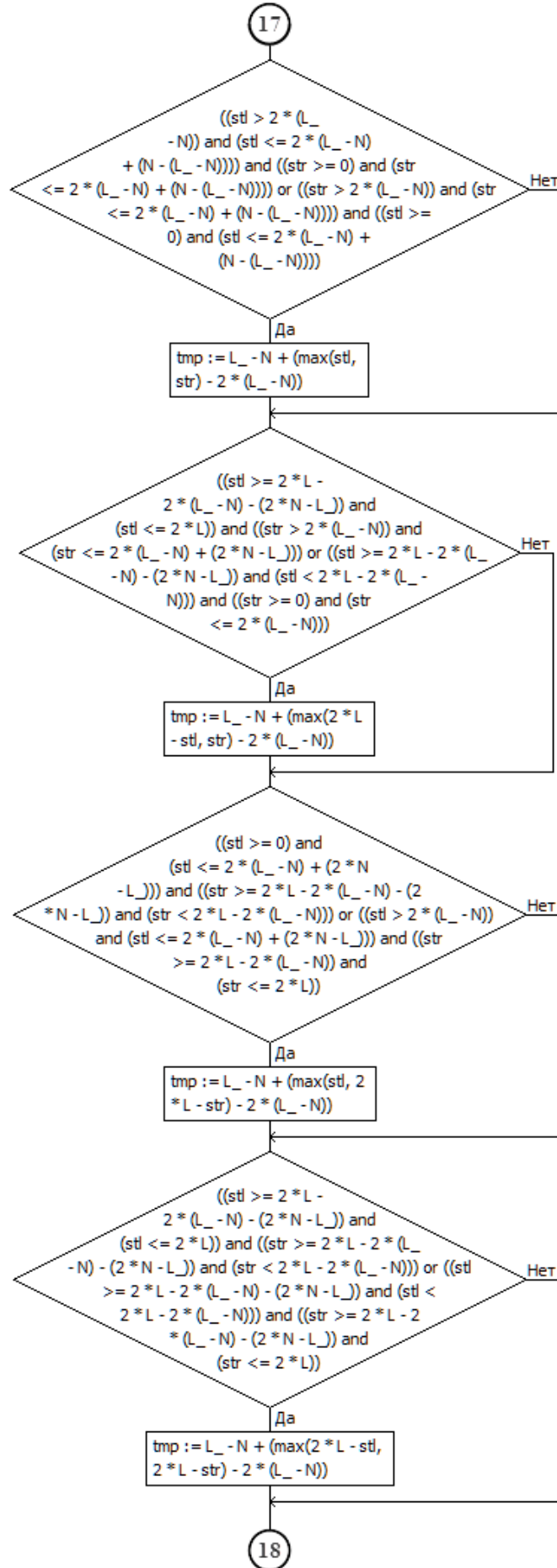


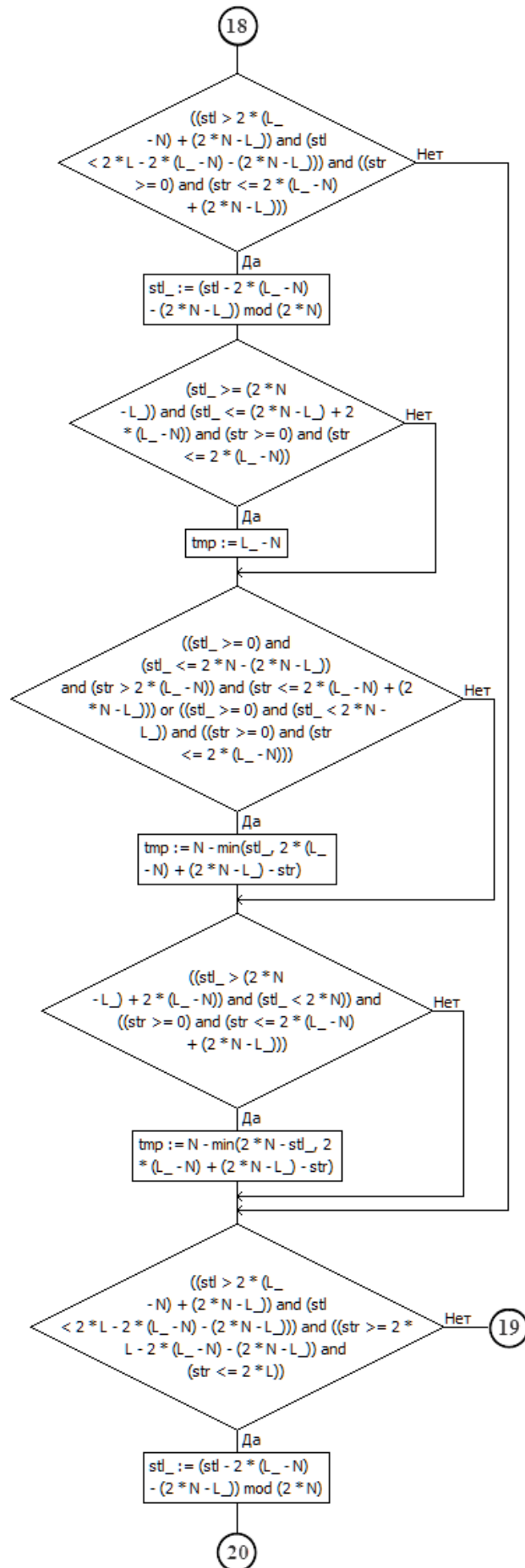


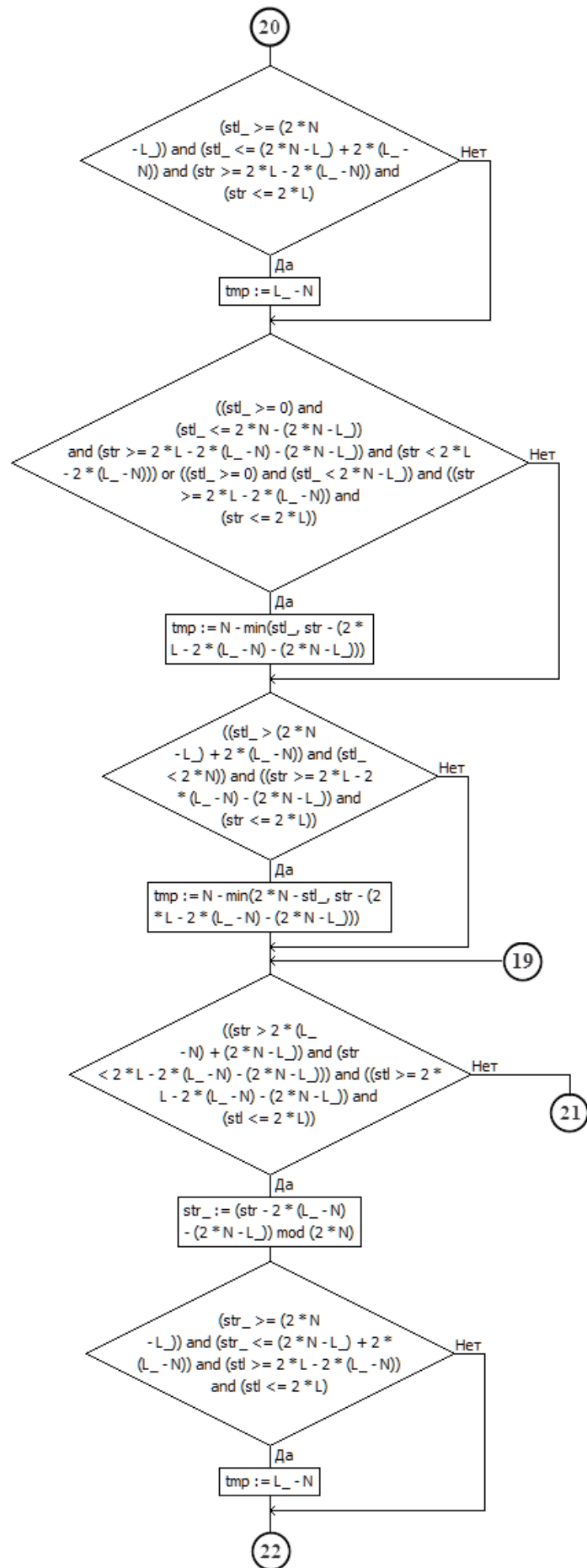


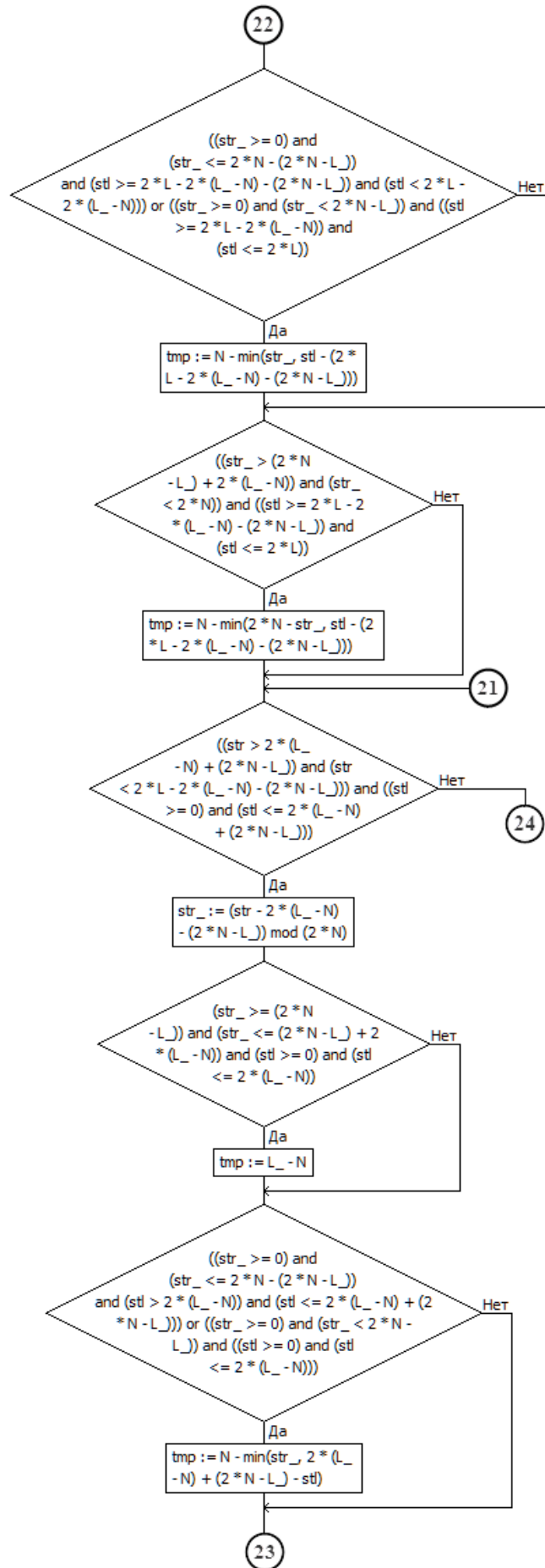


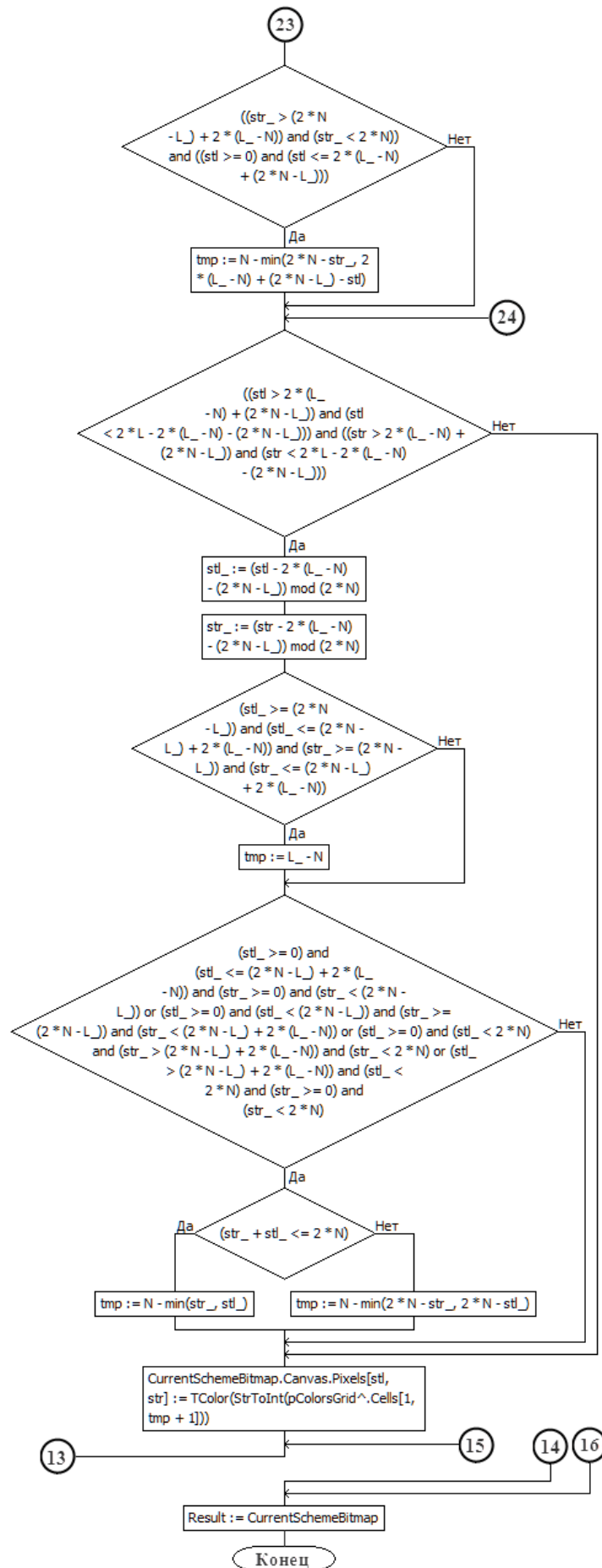




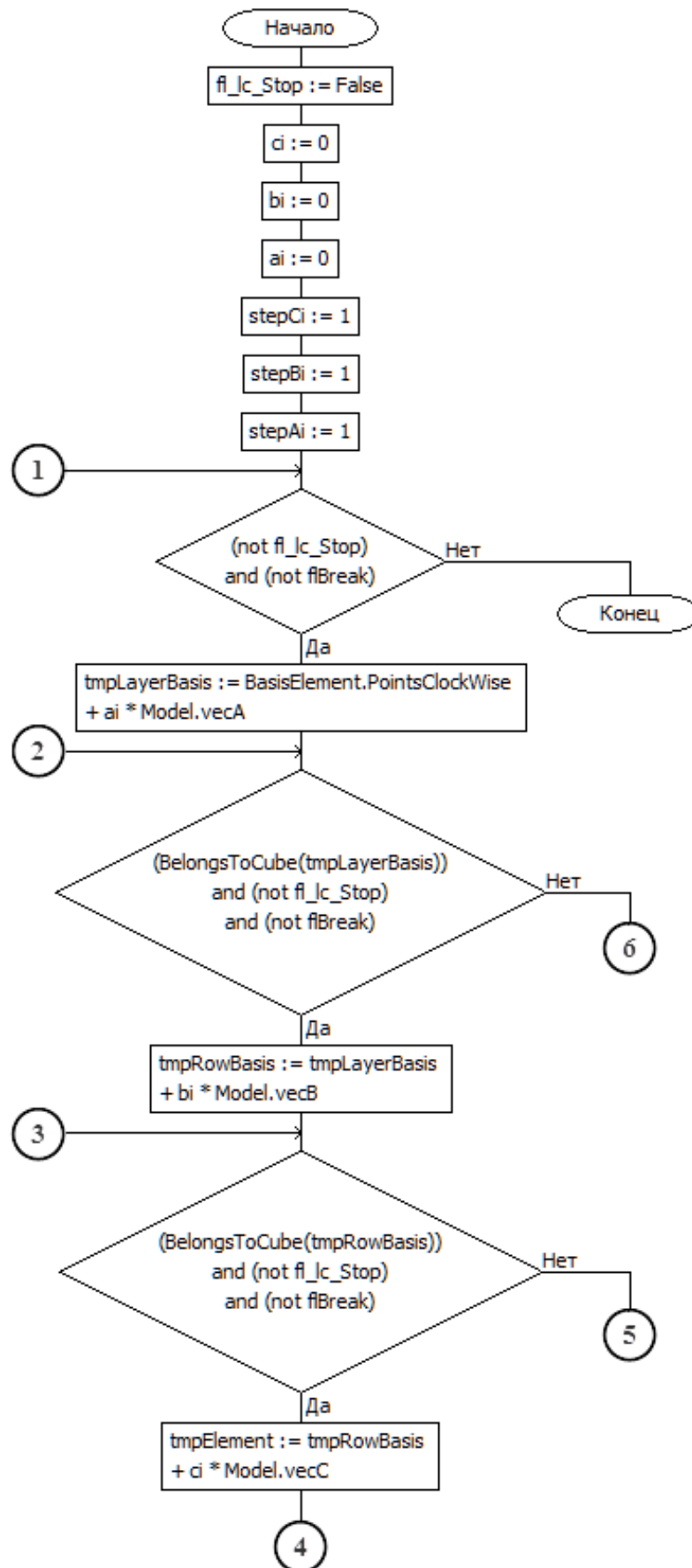


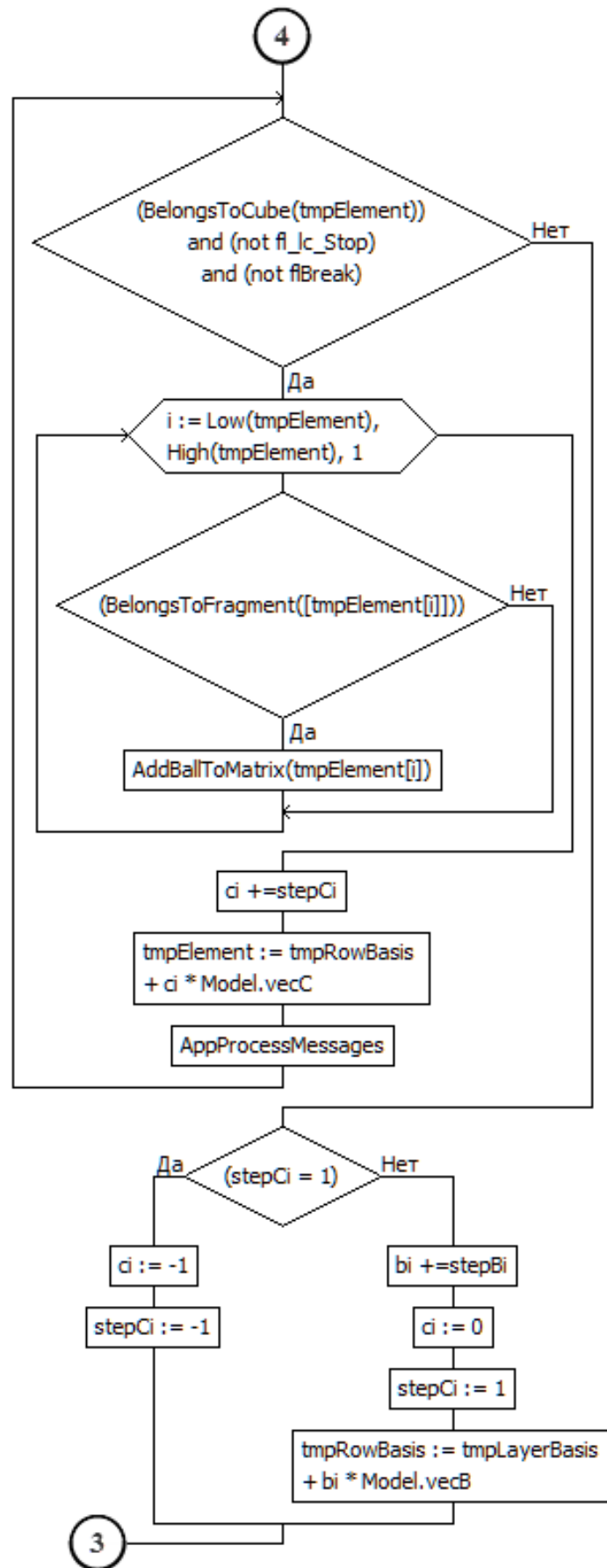


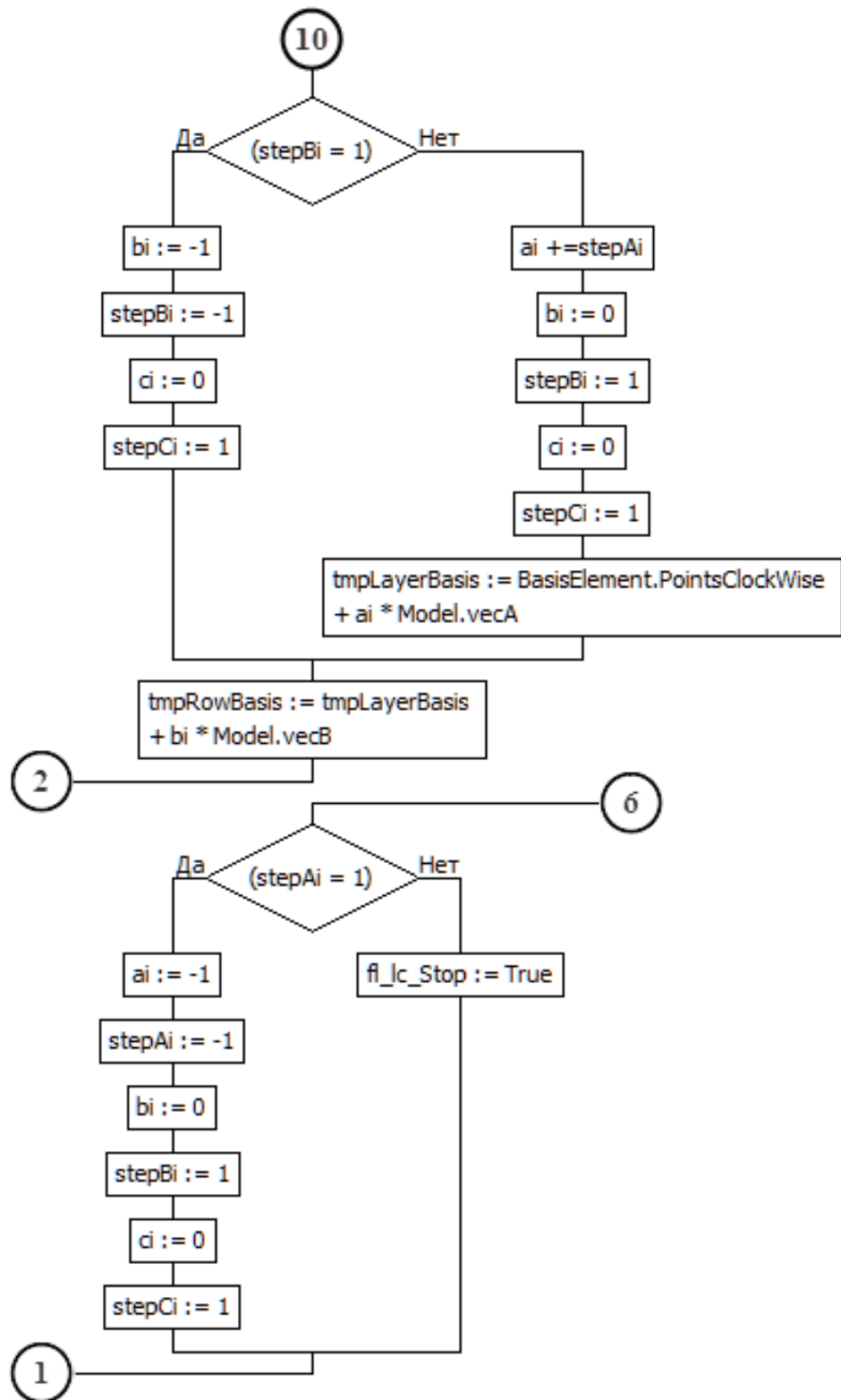




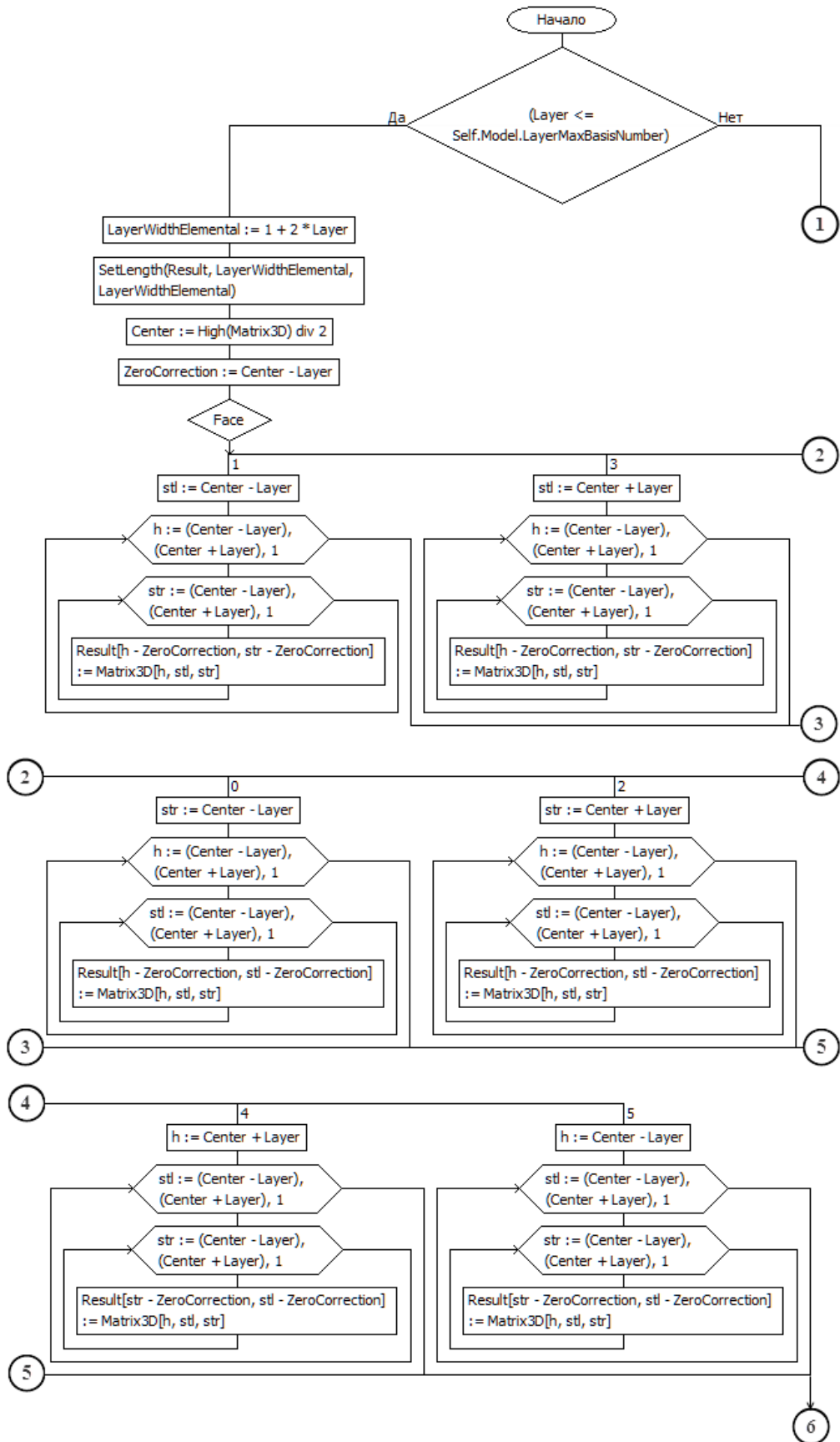
Алгоритм формирования трёхмерной матрицы куба-генератора.

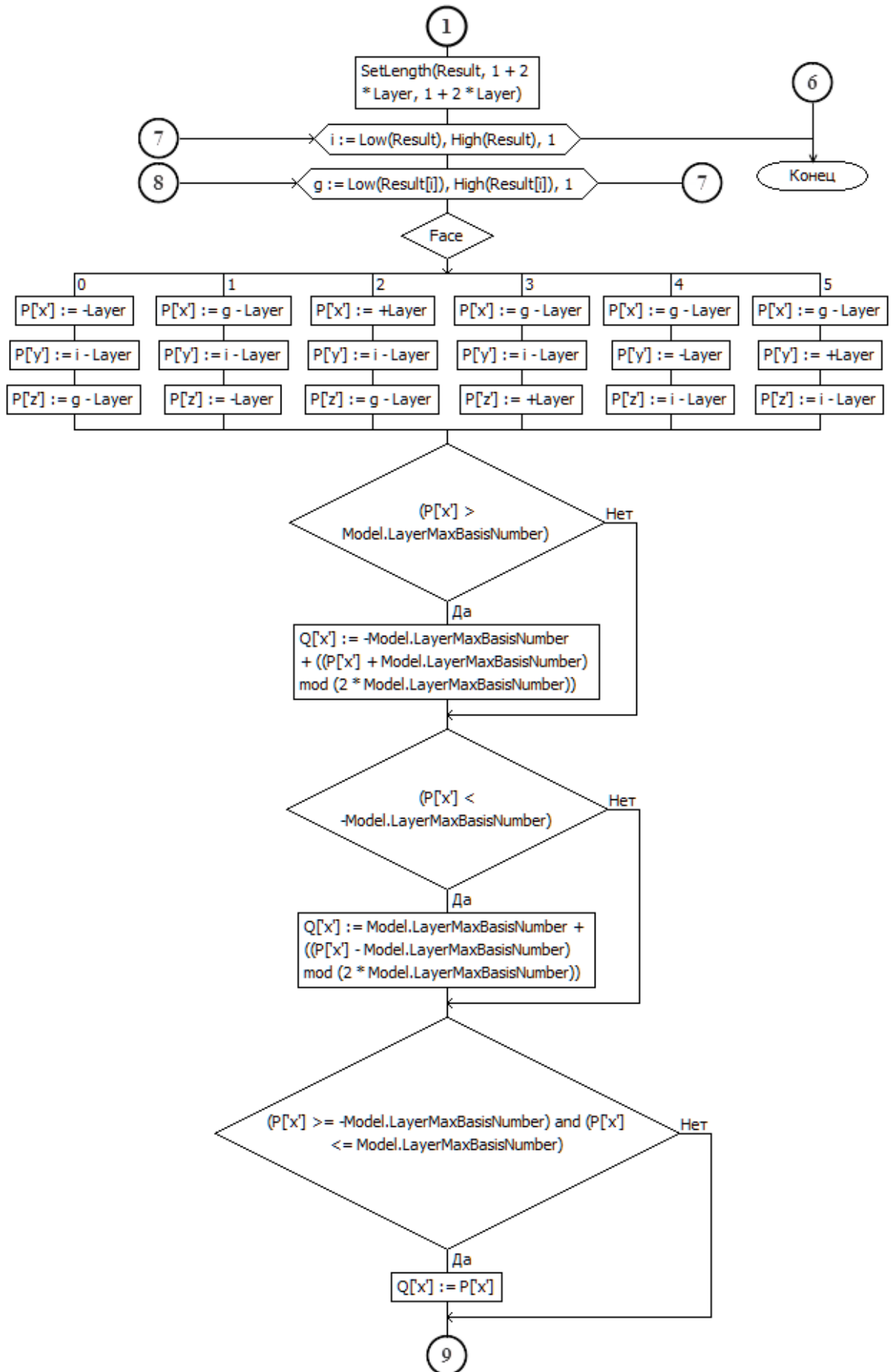


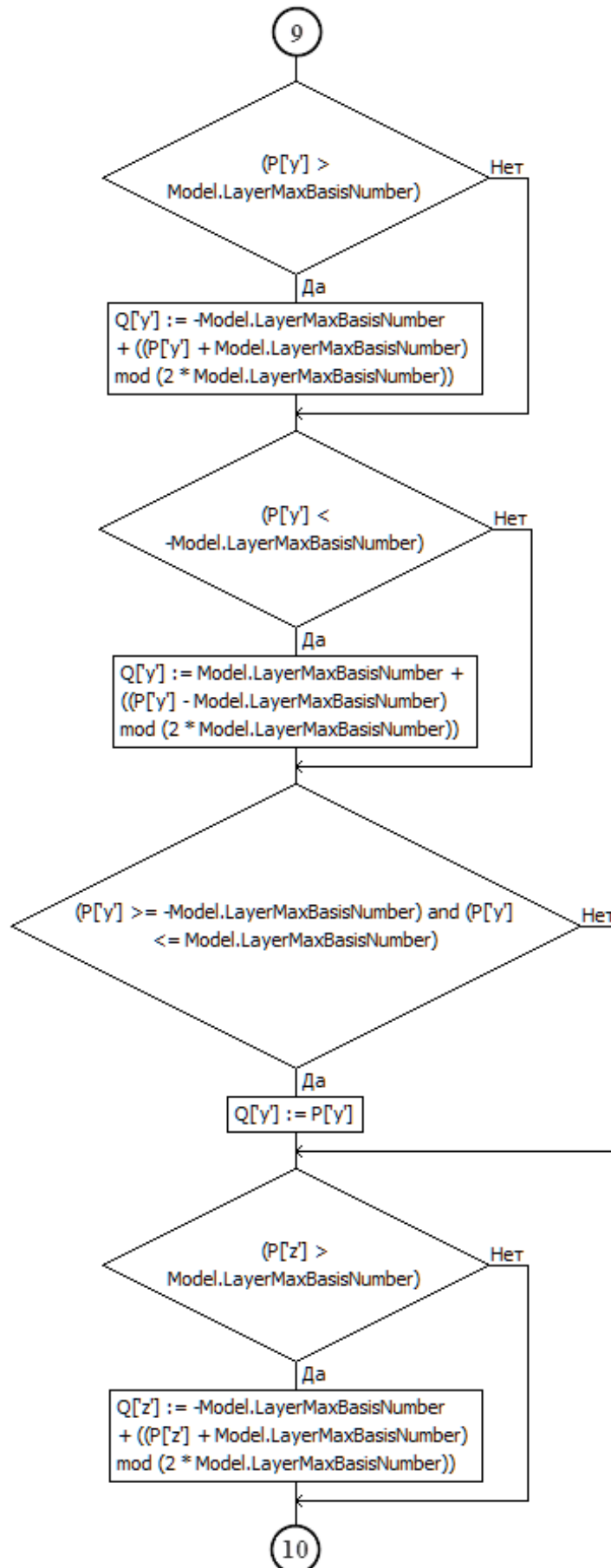


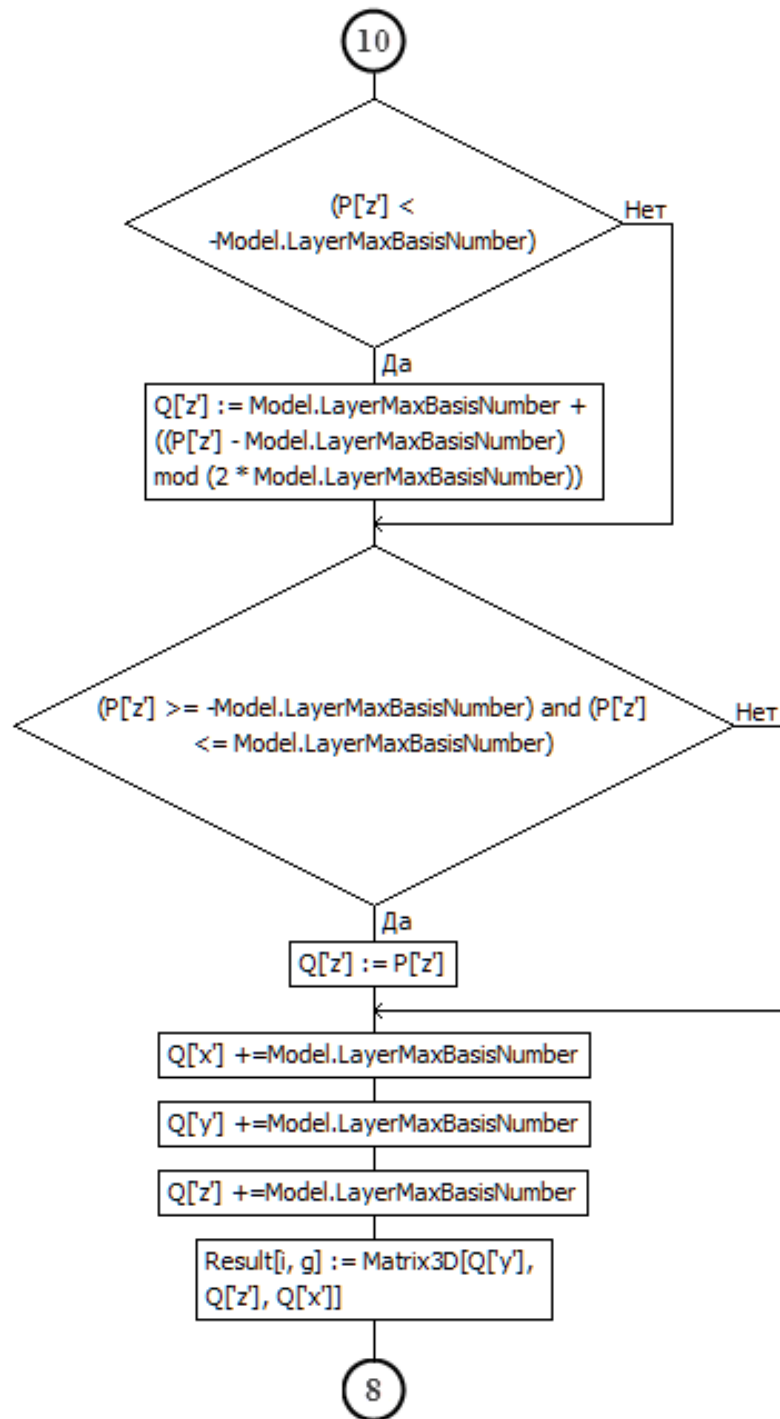


Алгоритм формирования грани трёхмерной матрицы слоя.

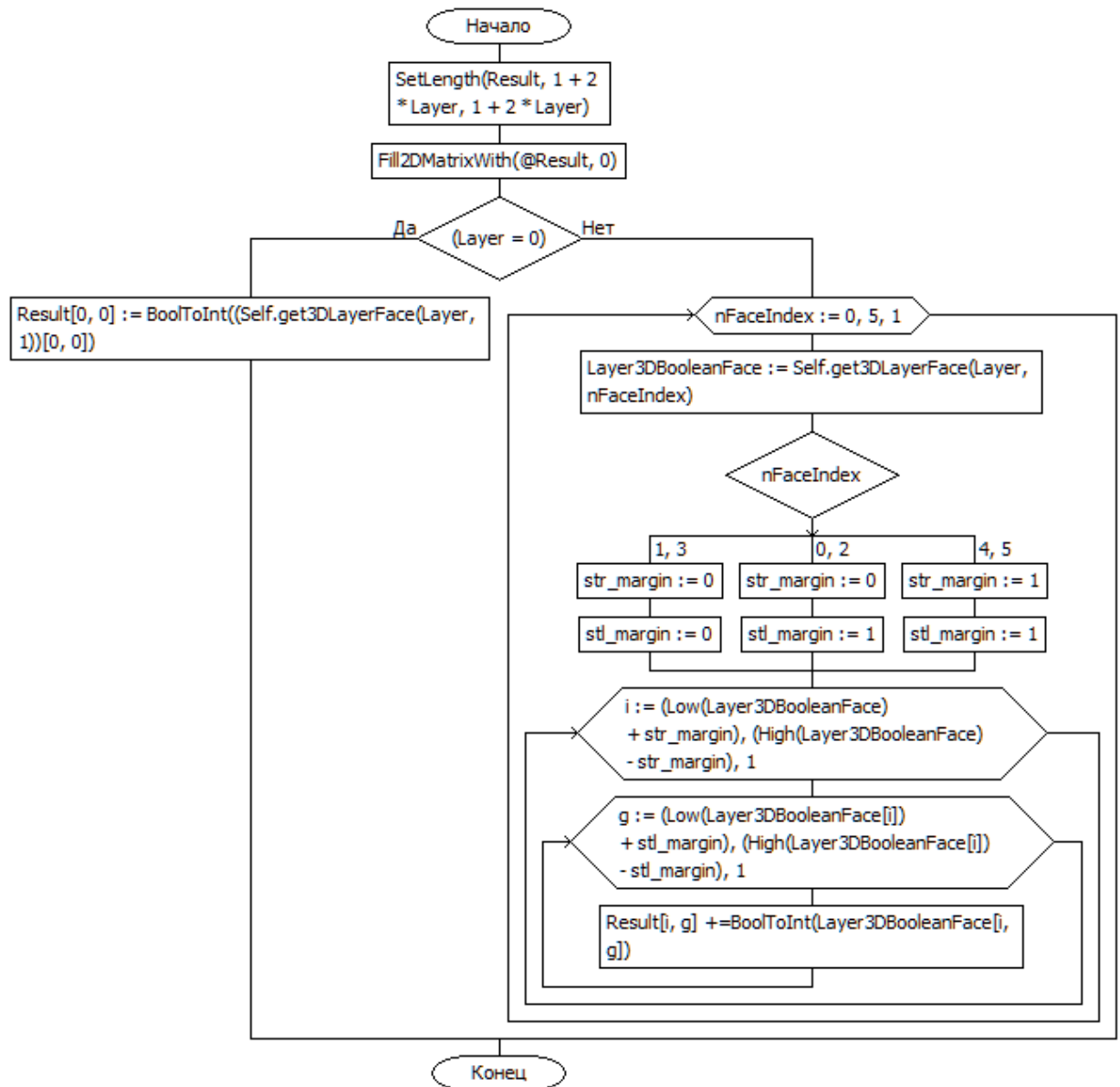




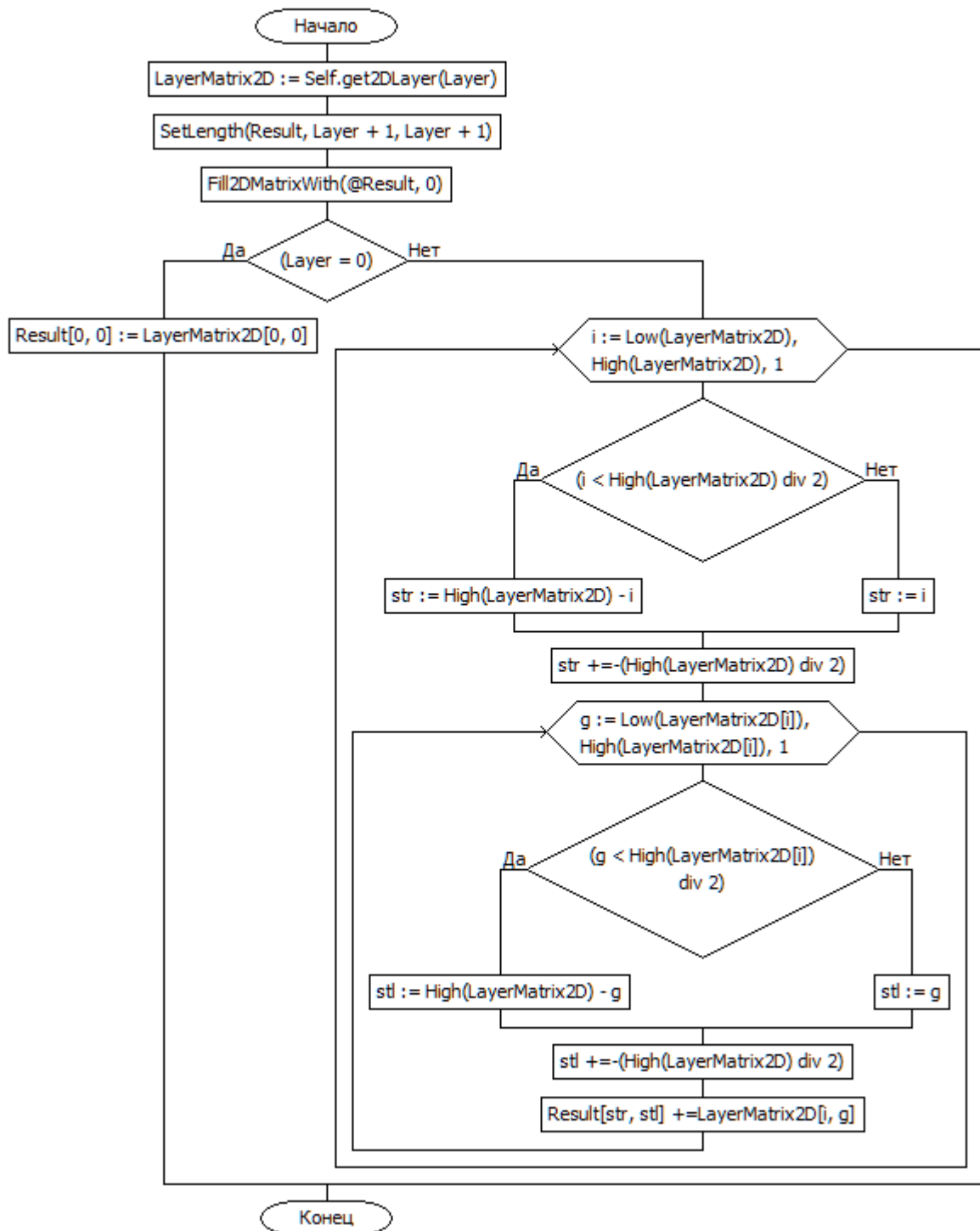




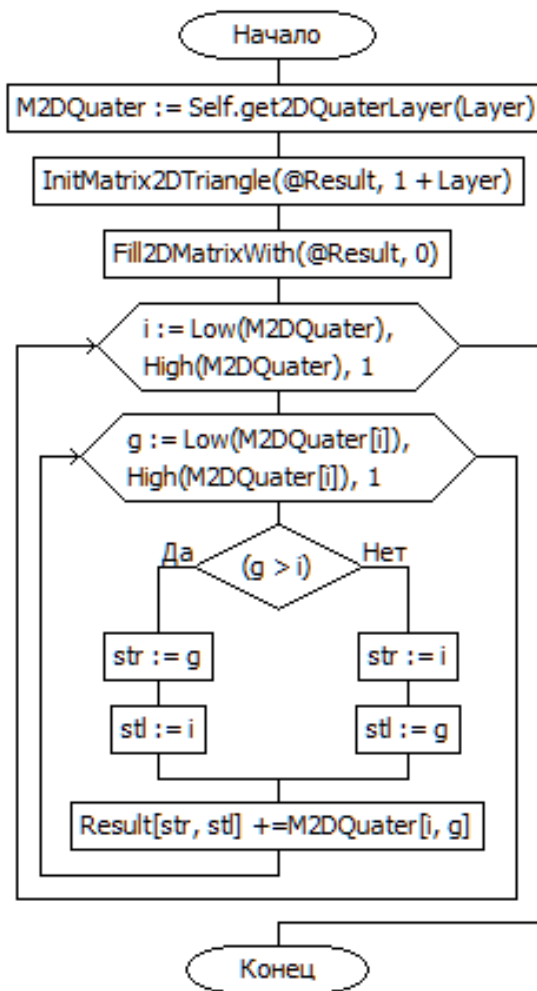
Алгоритм формирования матрицы первого шага сжатия.



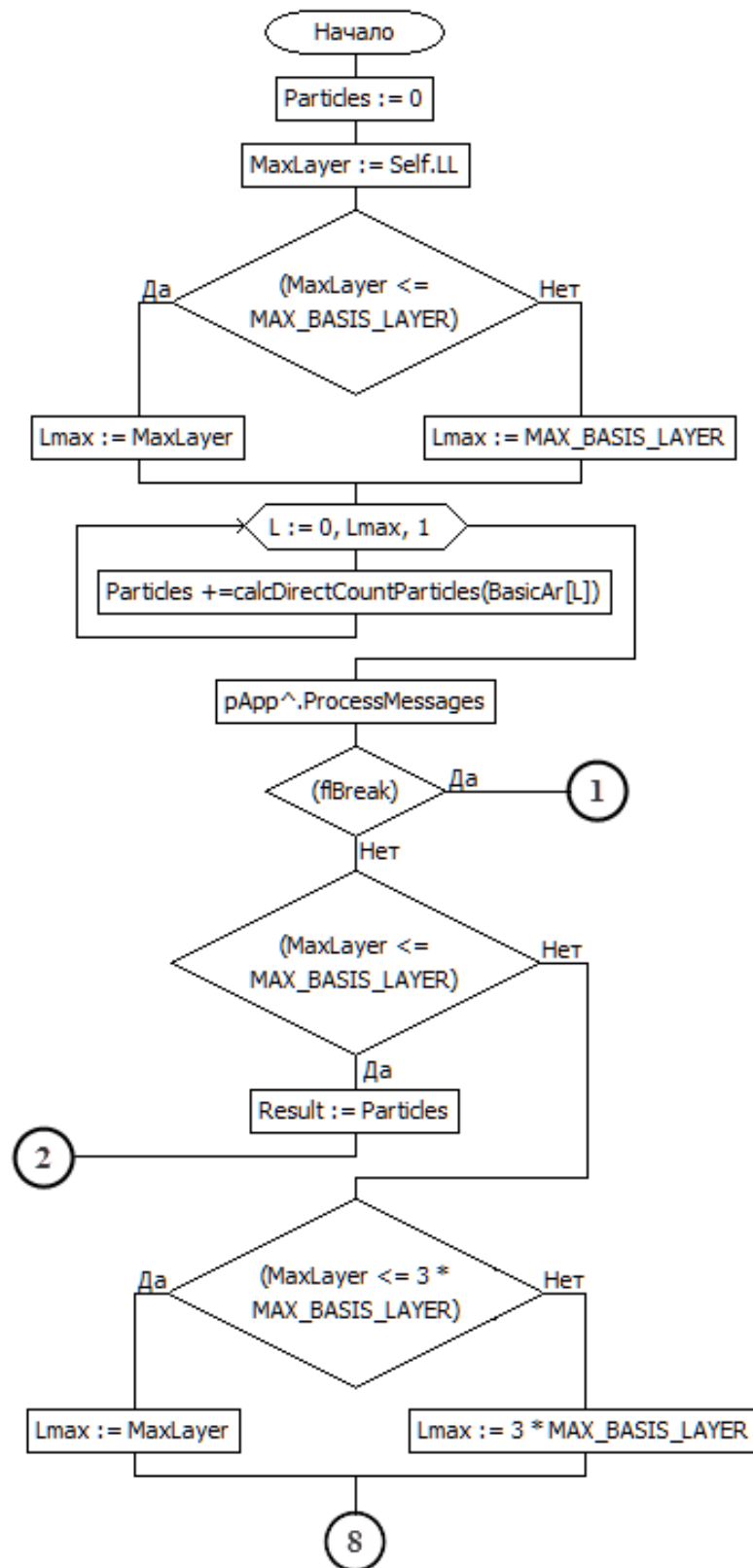
Алгоритм формирования матрицы второго шага сжатия.

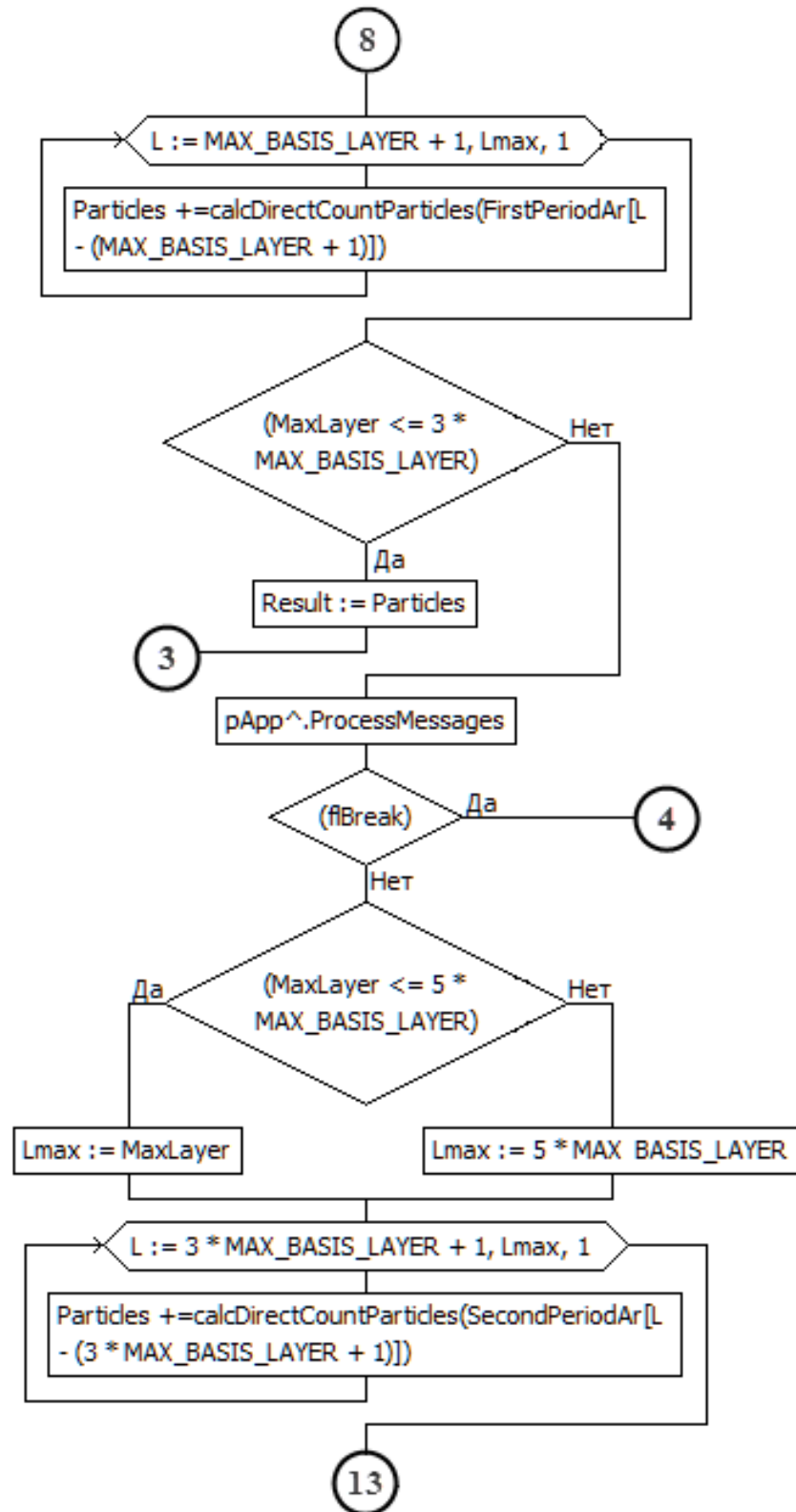


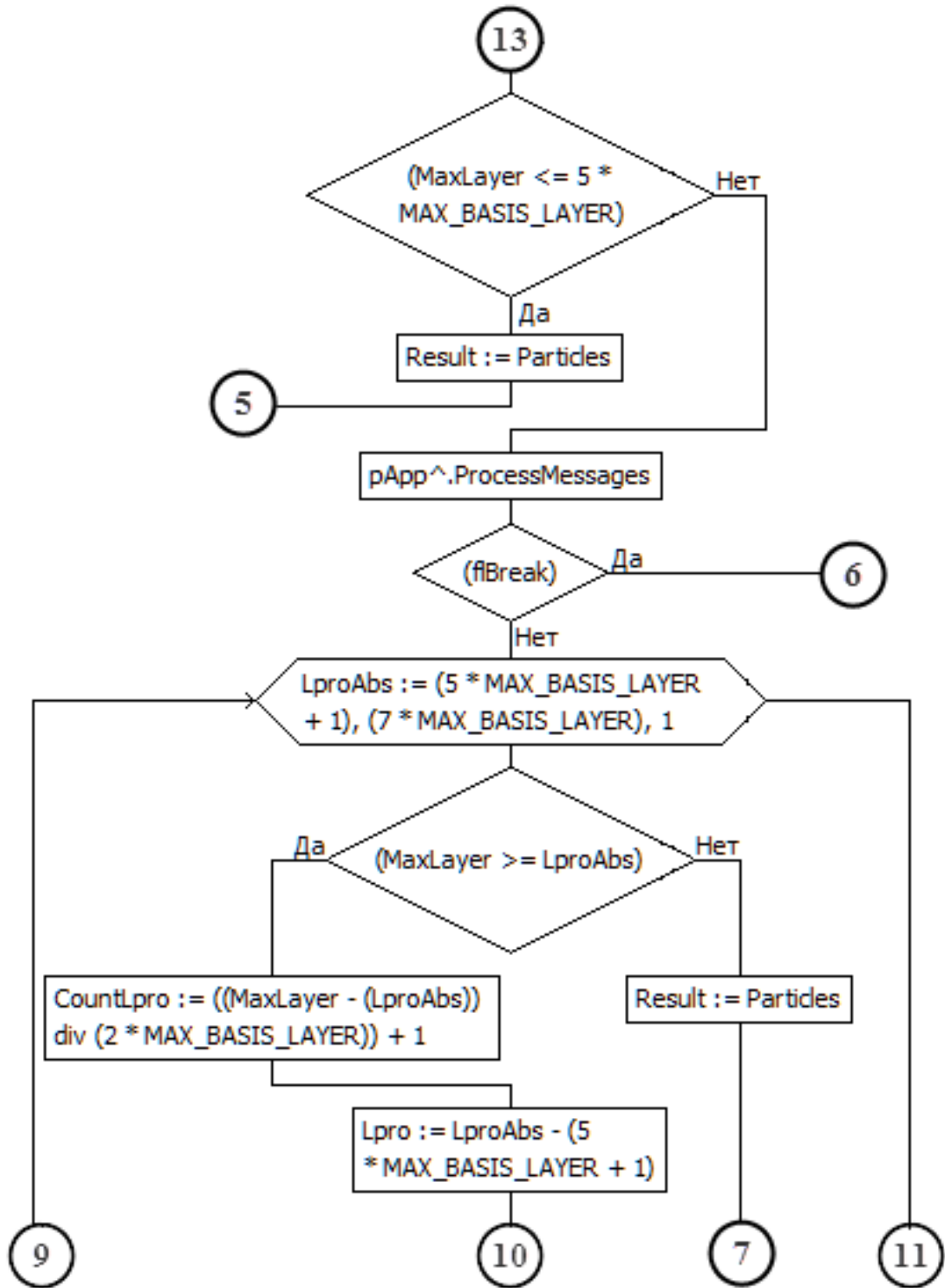
Алгоритм формирования компактной матрицы третьего шага сжатия.

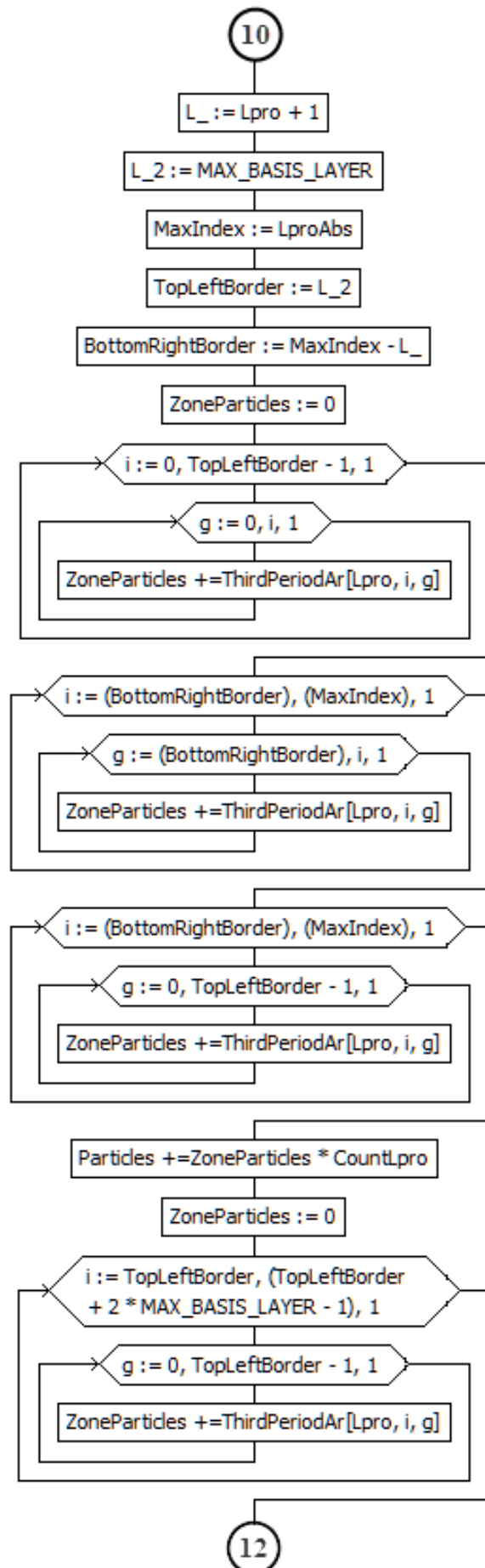


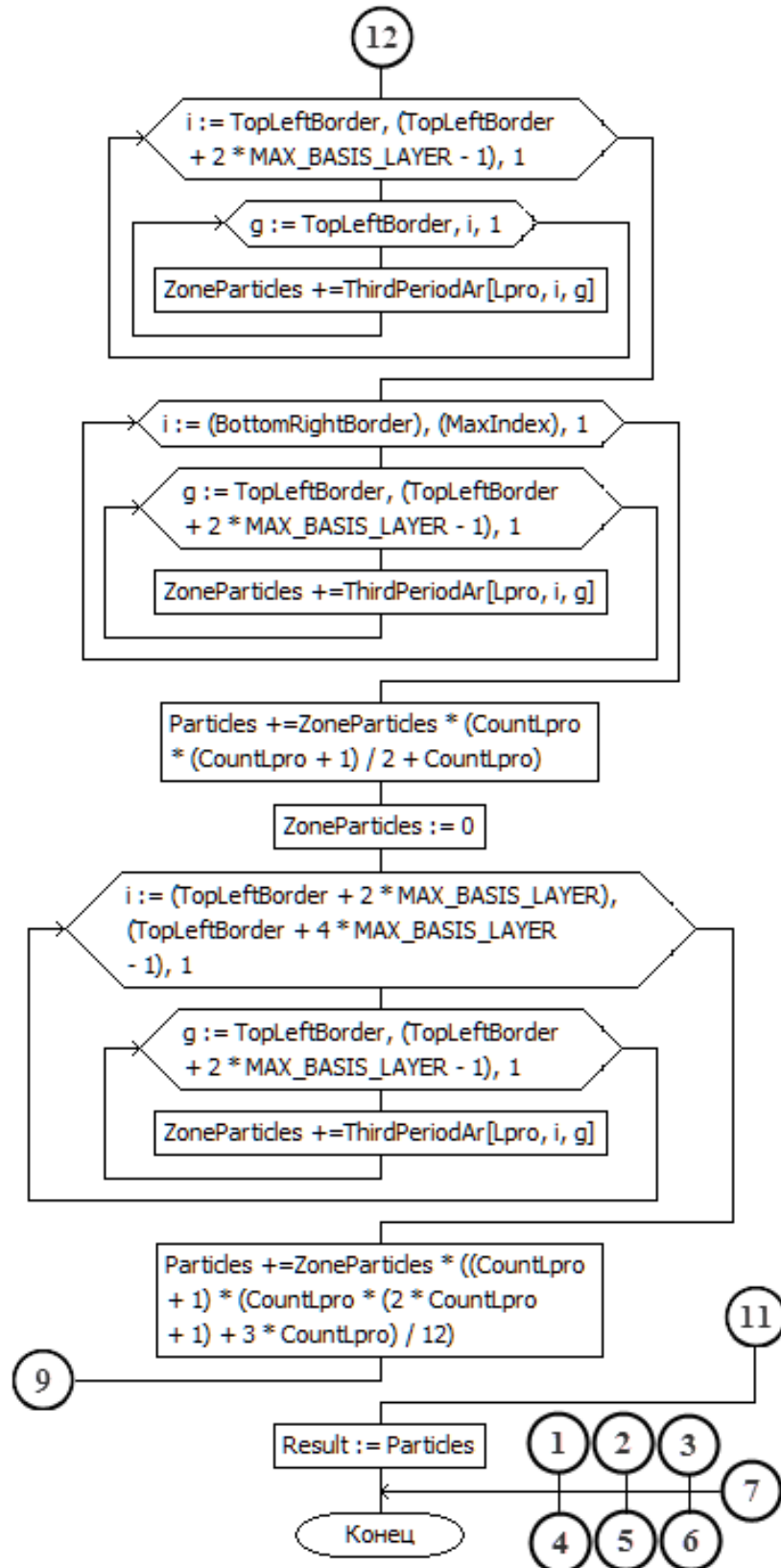
Алгоритм расчёта полного количества частиц.











Алгоритм расчёта поправки количества частиц.

