

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ ГПУ МЕТАЛЛОВ

Сеченых П.А.

ФИЦ ИУ РАН, МАИ (НИУ)

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

В данной работе требовалось определить метрические параметры – постоянные кристаллической решётки (a , b , c) и плотность упаковки атомов в элементарной ячейке.

Для расчёта метрических параметров была использована модель плотной упаковки, согласно которой, атомы металла заменяют твёрдыми шарами [1]. Система атомов считается устойчивой в рамках данной модели, если плотность упаковки ρ попадает в интервал [0.47, 0.74]. Ранее [2,3] этот подход использовался для расчёта метрических параметров соединений различных классов с кристаллической решёткой кубического типа симметрии ($a = b = c$, углы ячейки $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$). В данной работе показано его применение для кристаллов с гексагональной решёткой ($a = b \neq c$, $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$). Рассматриваемая структура (рис. 1) описывается пространственной группой симметрии $R\bar{6}_3/mmc$, позиция Уайкова 2с.

Для решения поставленной задачи применялась программная реализация алгоритма имитации отжига [4] на языке программирования C# [5]. Радиусы атомов химических элементов были взяты из [7].

Основные результаты вычислений приведены в таблице 1. Полученные значения согласуются с опубликованными значениями [8], и могут быть использованы как входные данные для расчёта электронных, магнитных, оптических и других свойств соединений.

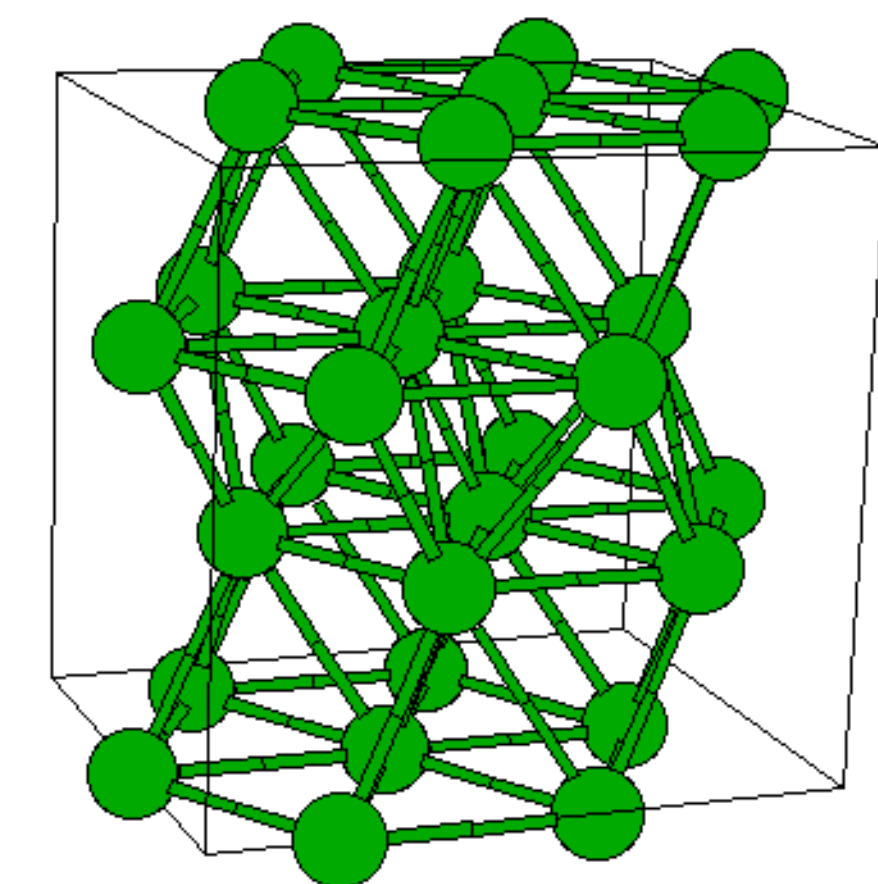


Рис.1. Структура ГПУ

Таблица 1. Результаты вычислений.

		вычисленные				табличные		погрешность	
		a	c	c/a	ρ	a	c	Δa	Δc
Бериллий	Be	2,269	3,615	1,593	0,602	2,29	3,58	0,009	0,010
Церий	Ce	3,559	5,590	1,571	0,592	3,65	5,96	0,025	0,062
Кобальт	α -Co	2,419	3,810	1,575	0,594	2,51	4,07	0,036	0,064
Диспрозий	Dy	3,599	5,754	1,599	0,605	3,59	5,65	0,003	0,018
Эрбий	Er	3,567	5,772	1,618	0,614	3,56	5,59	0,002	0,033
Гадолиний	Gd	3,644	5,822	1,598	0,604	3,64	5,78	0,001	0,007
Гафний	Hf	3,246	5,254	1,619	0,614	3,20	5,06	0,014	0,038
Гольмий	Ho	3,575	5,721	1,600	0,605	3,58	5,62	0,001	0,018
Лантан	La	3,810	6,240	1,638	0,623	3,75	6,07	0,016	0,028
Лютеций	Lu	3,501	5,576	1,593	0,602	3,50	5,55	0,000	0,005
Магний	Mg	3,217	5,177	1,609	0,609	3,21	5,21	0,002	0,006
Неодим	Nd	3,707	6,019	1,624	0,616	3,66	5,90	0,013	0,020
Осмий	Os	2,728	4,473	1,640	0,624	2,74	4,32	0,004	0,035
Празеодим	Pr	3,732	6,098	1,634	0,621	3,67	5,92	0,017	0,030
Рений	Re	2,780	4,537	1,632	0,620	2,76	4,46	0,007	0,017
Рутений	Ru	2,700	4,303	1,594	0,602	2,70	4,28	0,000	0,005
Скандий	Sc	3,227	5,078	1,574	0,593	3,31	5,27	0,025	0,036
Тербий	Tb	3,620	5,784	1,598	0,602	3,60	5,69	0,006	0,017
Титан	Ti	2,959	4,670	1,578	0,595	2,95	4,69	0,003	0,004
Таллий	Tl	3,145	4,938	1,570	0,591	3,46	5,53	0,091	0,107
Тулий	Tm	3,531	5,653	1,601	0,606	3,54	5,55	0,003	0,019
Иттрий	Y	3,557	5,592	1,572	0,592	3,65	5,73	0,025	0,024
Цирконий	Zr	3,258	5,339	1,639	0,623	3,23	5,15	0,009	0,037

Литература

1. Абгарян К.К., Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения.- М.:МАКС Пресс, 2017. – 284с.
2. Сеченых П.А., Абгарян К.К. Математическое моделирование кристаллической структуры оксидов металлов //Материалы I Международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК-2019), 21-23 октября 2019г. Москва: МАКС Пресс. – 2019. – С.74-76. – Doi.org/10.29003/m682.MMMSEC-2019/74-76
3. Сеченых П.А. Математическое моделирование кристаллической структуры перовскитоподобных соединений //Материалы III Международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК-2021), 25-27 октября 2021г. Москва: МАКС Пресс. – 2021. – С.86-88. – https://doi.org/10.29003/m2479.MMMSEC-2021/86-88.
4. Metropolis N., Ulam S. The Monte Carlo Method. Journal of the American Statistical Association, Vol. 44, No. 247 (Sep., 1949), pp. 335-341.
5. Сеченых П.А. Математическое моделирование перспективных структур оксидов металлов // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2019. Т. 22, № 4. С. 268-271. DOI: 10.17073/1609-3577-2019-4-268-271
6. Hahn T. International Tables for Crystallography. Vol. A. // Springer, 2005 – 911с.
7. WebElements [электронный ресурс]. URL: <https://www.webelements.com> (дата обращения 20.09.2022).
8. Ashcroft N.W., Mermin N.D. Solid state physics. – New York: Saunders College Publishing, 1976.