На правах рукописи

Фомин Денис Васильевич

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

1.2.2. Математическое моделирование, численные методы
и комплексы программ

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата технических наук

Омск – 2024

Работа выполнена в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Амурский государственный университет».

Научный руководитель: **Ерёмин Илья Евгеньевич**, доктор технических наук, профессор, профессор кафедры информационных и управляющих систем федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Амурский государственный университет».

Официальные оппоненты: **Маликов Рамиль Фарукович**, доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры информационных технологий федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы»;

Семенов Александр Сергеевич, доктор физико-математических наук, доцент, директор, профессор кафедры «Электроэнергетика и автоматизация промышленного производства» Политехнического института (филиала) федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Северо-Восточный федеральный университет имени М.К.Аммосова» в г. Мирном.

Ведущая организация: Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского», г. Омск.

Защита состоится *24.12.2024* в *14:00* на заседании диссертационного совета 24.2.350.05, созданного на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Омский государственный технический университет» по адресу: 644050, г. Омск, пр. Мира, д.11, Главный корпус, ауд. П-202.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Омского государственного технического университета и на официальном сайте http://www.omgtu.ru.

Отзывы на автореферат в двух экземплярах, заверенные печатью учреждения, просим направлять по адресу: 644050, г. Омск, пр. Мира, д.11, ОмГТУ, учёному секретарю диссертационного совета 24.2.350.05. Тел.: (3812) 62-85-58, e-mail: dissov_omgtu@omgtu.ru.

Автореферат разослан «___ » _______________ 2024г.

Ученый секретарь
диссертационного совета 24.2.350.05,
доктор технических наук, доцент **Варепо Л.Г.**

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

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.

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. 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. 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.

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) высокие требования к ресурсам вычислительной техники; 3) 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.

Такой подход позволяет заменять полное описание сколь-угодно большого фрагмент, исследуемой структуры описанием сравнительно небольшого её фрагмента. Более того, компактное матричное описание базового фрагмента структуры будет в 48 раз меньше его обычной 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. При этом расчёты, выполненные с помощью данных 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 применяется в силу фундаментальных особенностей метода компактного матричного описания.

Таким образом, совершенствование метода компактного матричного описания и разработка новых методов расчёта структурных и энергетических параметров, а таже 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 компактное 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 соответствующими решётками. На разработанное программное обеспечение получено восемь свидетельств о государственной регистрации программ для ЭВМ.

Разработанное программное обеспечение используется в ИГиП ДВО РАН для разработки теоретически и технологически основ создания композиционных материалов с заданными свойствами на основе местного сырья.

Результаты диссертационного исследования используются в ФГБНУ «Дальневосточный научный центр физиологии и патологии дыхания» в исследованиях воздействия экстремальных факторов окружающей среды, включая загрязнения воздуха мелкими частицами, на состояние дыхательной системы.

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 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 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» (Beijing, 2019); XXI международная научно-практическая конференция «European Scientific Conference» (Пенза, 2020); International Conference «Scientific research of the SCO countries: synergy and integration» (Beijing, 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 печатная работа, 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 исследования получены лично автором. Участие соискателя в подготовке работ, опубликованных в соавторстве, состоит в следующем. В [1] им разработана методика вычислительного эксперимента, выполнен сам эксперимент. В [2] им произведено построение кубической модели исследуемой структуры на основе тетраэдрической. В [6, 7] он выполнил анализ компактного векторно-матричного метода, разработал и описал структурный численный метод подсчёта количества частиц и алгоритм расчёта коэффициента компактности, а также выполнил анализ эффективности разработанных методов. В [9] он разработал и описал брэгговские аналоги решёток ПК, ОЦК, ГЦК и ГПУ. В [11–18] автором разработана базовая часть программного кода.

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.

В приложениях приводятся акты о внедрении результатов диссертации, свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ, компактные матричные модели решёток ГПУ и структурного типа вюртцит, а также блок-схемы основных алгоритмов.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении обосновывается актуальность темы диссертационного исследования, его цели и задачи, характеризуются научная новизна и применяемые методы, приводятся основные теоретические и практические результаты, формулируются положения, выносимые на защиту.

В первой главе рассмотрены пространственные упаковки равновеликих непересекающихся сфер в пространствах разной размерности. Также рассмотрены методы определения межъядерного расстояния для веществ, обладающих кристаллической структурой, подходы к расчёту коэффициента плотности пространственной упаковки и методы математического описания пространственных решёток.

Рассматривается макроскопический способ расчёта межъядерного расстояния, предложенный У.Л. Бреггом. Данный способ 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:

$$\boldsymbol{V_0} = 2d^3;\ \boldsymbol{\rho} = \frac{M}{N_A V_0} = \frac{M}{2N_A d^3};\ \boldsymbol{d} = \sqrt[3]{\frac{M}{2N_A\rho}},$$

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

Похожий подход предложен в работах В.В. Зуева. Из подходов У.Л. Брегга и В.В. Зуева логически следуют формулы коэффициента компактности и величины межъядерного расстояния кубических решёток:

$$\gamma = \frac{V_F}{V} = \frac{\frac{N}{2}\cdot(2R)^3}{a^3};\ d = \sqrt[3]{\frac{kM\gamma}{\rho}}; \qquad (1)$$

где V_F – объём ячейки, занятый частицами и их связями, V –объём элементарной ячейки, N – количество целых частиц в ячейке, a – длина ребра ячейки, k – константа, служащая для перевода атомных единиц массы в килограммы, и численно равная $1{,}66053906660\cdot10^{-27}$.

Таким образом, существуют два близких подхода к моделированию пространственных структур: модель шаровых упаковок (ШУМ) и модель Брэгга – модель кубических упаковок (КУМ). Сравнение результатов аналитических расчётов величин межъядерных расстояний веществ разных сингоний с данными физических экспериментов показало, что КУМ имеет большую точность, чем ШУМ.

Рассматриваются методы математического описания регулярных пространственных решёток: традиционная матрица координат и компактная векторно-матричная модель.

Координатные матричные описания предполагают рассмотрение частиц пространственной структуры в виде точек с известными координатами и дополнительными характеристиками, такими как масса или заряд. Модели такого типа просты для понимания и построения, но их использование в качестве исходных данных для численных методов расчётов сопряжено с некоторыми трудностями.

В частности, координатные матрицы представляют собой списки с координатами всех частиц в заданном фрагменте структуры. Во время исследований приходится формировать и обрабатывать матрицы огромного размера. Эти операции требуют использования больших вычислительных мощностей и объёмов памяти.

В качестве альтернативы была предложена компактная векторно-матричная модель. Согласно оригинальной версии, пространственная решётка рассматривается как последовательность одинаково ориентированных вложенных друг в друга координационных слоёв. Координационный слой – это вспомогательная геометрическая структура кубической формы с правильно расположенными и периодически повторяющимися узлами. Благодаря свойствам симметрии каждый такой слой может быть «свёрнут» до треугольника (рис. 1). В результате таких преобразований удаётся уменьшить объём модели в 48 раз, сохранив необходимую точность.

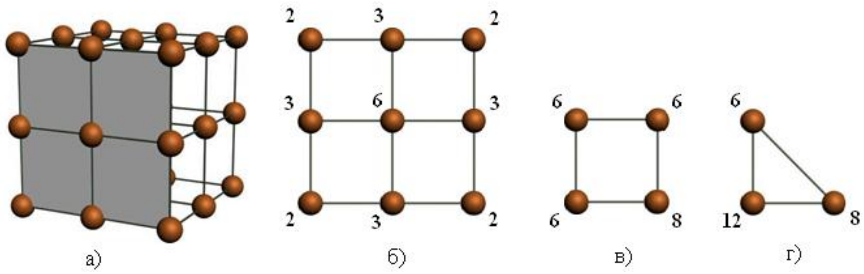

Рисунок 1 – Схема сокращения количества рассматриваемых узлов:
а) исходный координационный куб; б) куб, свёрнутый до одной грани;
в) грань свёрнутая до своей 1/4 части; г) грань, свёрнутая до 1/8 своей части

Уменьшение объёма описания возможно за счёт использования свойств симметрии куба. А также благодаря тому, что расчёты ряда параметров не требуют информации о точном расположении частиц в пространстве: достаточно знать расстояние между частицами.

Оригинальный компактный матричный метод предполагает использовать три вида двумерных матриц: универсальную количественную (УКМ), структурную (СМ) и зарядовую (ЗМ). УКМ сообщает сколько вообще есть мест каждого типа, в которых могут находиться частицы. СМ указывает, какая часть из этих мест действительно занята частицами. ЗМ описывает заряды частиц, находящихся в соответствующих узлах пространственной решётки. Главным недостатком данного метода является фундаментальная привязка к свойствам куба. Из-за чего он применим только к решёткам кубической сингонии.

Рассматривается постоянная Маделунга, характеризующая электростатическое взаимодействие частиц в решётке. А также методы вычисления данного параметра: Эвьена, Эвальда, Харрисона и Сычёва. Делается вывод о перспективности развития методов расчёта постоянной Маделунга.

Во второй главе описано построение брэгговских аналогов некоторых решёток. Описано построение математических описаний решёток структурных типов вюртцит и магний.

Описывается новая версия компактного векторно-матричного метода описания пространственных решёток. В частности, для преодоления недостатков оригинальной версии данного метода предложены следующие модификации.

Во-первых, возможно перейти от использования матриц трех разных типов к использованию матриц только одного типа: простой количественной матрицы (ПКМ). Она непосредственно содержит информацию о количестве, расположении или, при необходимости, заряде частиц, в конкретном координационном слое.

Таким образом, данная модификация позволяет существенно упростить алгоритмы расчетов ряда структурных и энергетических параметров решётки (например, постоянная Маделунга и коэффициент компактности). Также эта модификация позволяет уменьшить объем используемых вычислительных ресурсов и сократить время выполнения расчетов при сохранении точности результатов.

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

Данная модификация основывается на следующем предположении. Для моделируемой пространственной решётки произвольной сингонии возможно выделить фрагмент, обладающий названными свойствами. Его размеры и ориентация в пространстве могут существенно отличаться от размеров элементарной ячейки исследуемой структуры.

Куб-генератор является аналогом элементарной ячейки для всех регулярных пространственных структур. Его выявление делает возможным применение к соответствующей структуре метод компактного матричного описания. То есть, данная модификация делает компактный матричный метод универсальным.

Тогда процесс формирования компактной матричной модели в общем виде можно представить в виде схемы (рис. 2). На первом шаге должна быть получена стереометрическая модель исследуемой решётки. На втором шаге необходимо выделить куб-генератор. Затем описать его в виде трёхмерной бинарной матрицы. Затем выполняется пошаговое выделение и сжатие матриц координационных слоёв. Результатом чего является искомая компактная модель.

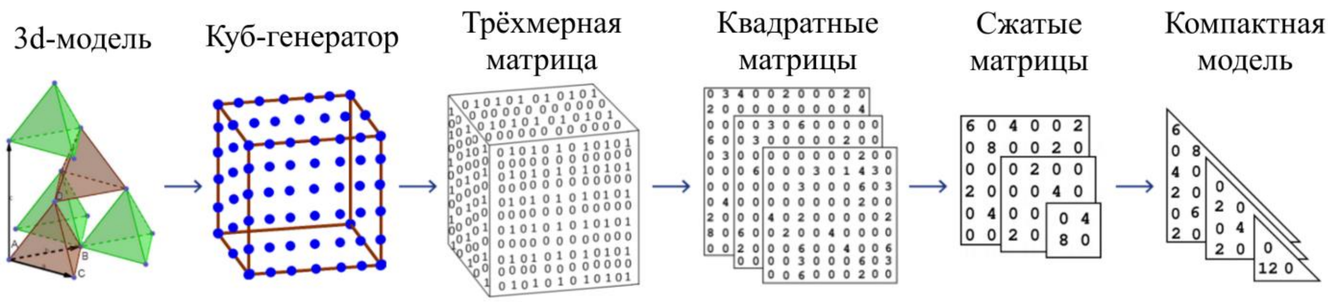

Рисунок 2 – Схема формирования компактного матричного описания произвольной решётки в соответствии с авторской версией метода

Для пространственных решёток структурных типов вюртцит и магний на основе гипотезы и аналитических расчётов было сформулировано предположение об ориентации куба-генератора. Данное предположение было проверено с помощью вычислительных экспериментов, в ходе которых выполнялась трансляция базовых элементов стереометрической модели решётки на все возможные комбинации векторов трансляции в определённой области пространства.

Полученные результаты подтвердили наличие кубов-генераторов для решёток обоих структурных типов. А также подтвердили правильность предположения об их пространственной ориентации и длине рёбер., составившей 36 условных единиц в используемой системе координат.

В свою очередь данный результат для каждой из структур позволяет перейти к формированию трёхмерной бинарной матрицы размерностью 36x36, полностью описывающей фрагмент соответствующей решётки. После чего выполняется преобразование полученных матриц в компактную векторно-матричную модель.

Сжатие трёхмерных матриц состоит из следующих этапов: 1) выделение трёхмерной матрицы координационного слоя и её преобразование 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. В частности, выполняется сложение элементов условных «граней» трёхмерной матрицы. Стоит отметить, что соседние строки и столбцы стыкующихся граней и фрагментов являются общими. Формирование компактных матриц на следующих этапах сжатия схематично показано на рис. 3.

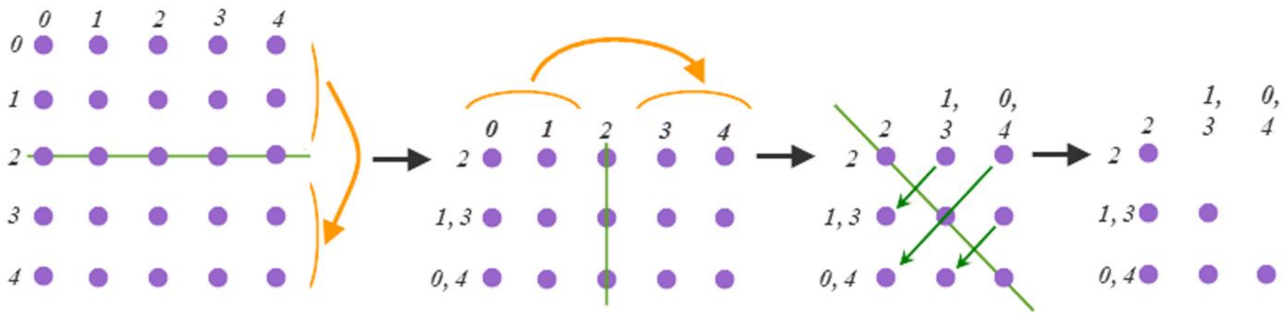

Рисунок 3 – Схема формирования компактных матриц на втором и третьем этапе

Компактные матрицы первого, второго и третьего этапа сжатия на примере третьего координационного слоя решётки ГПУ будут иметь вид:

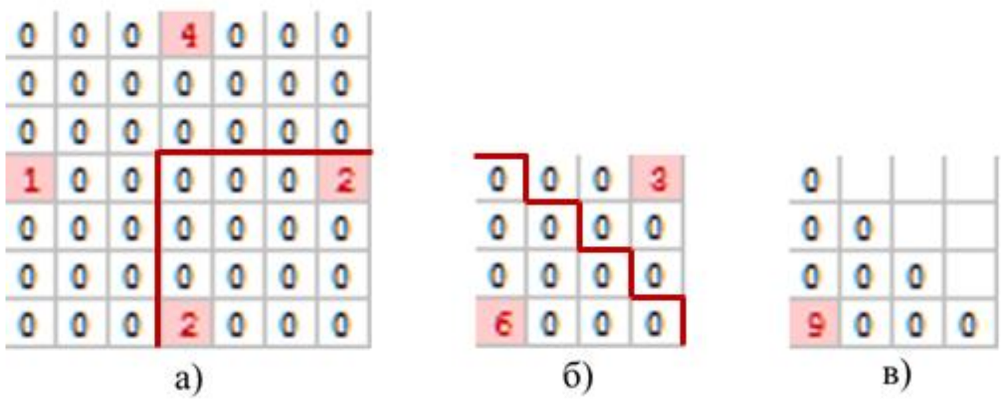

Рисунок 4 – Компактные матрицы координационного слоя № 3 решётки ГПУ:
а) первый этап сжатия; б) второй этап сжатия; в) третий этап сжатия

Проанализирована пространственная структура некоторых цеолитов. Показана возможность применения к ним метода компактного матричного описания на примере цеолита типа АОС.

В третьей главе описана разработка структурного метода определения количества частиц в заданном фрагменте решётки на основе её компактной матричной модели. А также способа расчёта коэффициента плотности пространственной упаковки и величины межъядерного расстояния.

Вводится понятие базового (все слои с номерами в диапазоне от *0* до *M*, находящиеся в пространстве куба-генератора) и составного (все слои, не входящие в базовый набор) координационных слоёв.

Рассматривается связь составных слоёв с базовыми слоями в двумерном пространстве на примере структуры, описываемой базовым набором из четырёх слоёв. При этом каждый из координационных слоёв № 0–3 полностью совпадает с соответствующим слоем из базового набора (рис. 5). Все составные слои будут либо пересекать границы базовых слоёв, либо включать их части. При этом координационный слой № 9 оказывается целиком состоящим из элементов последнего базового слоя. То есть становится эквивалентен по составу слою № 3.

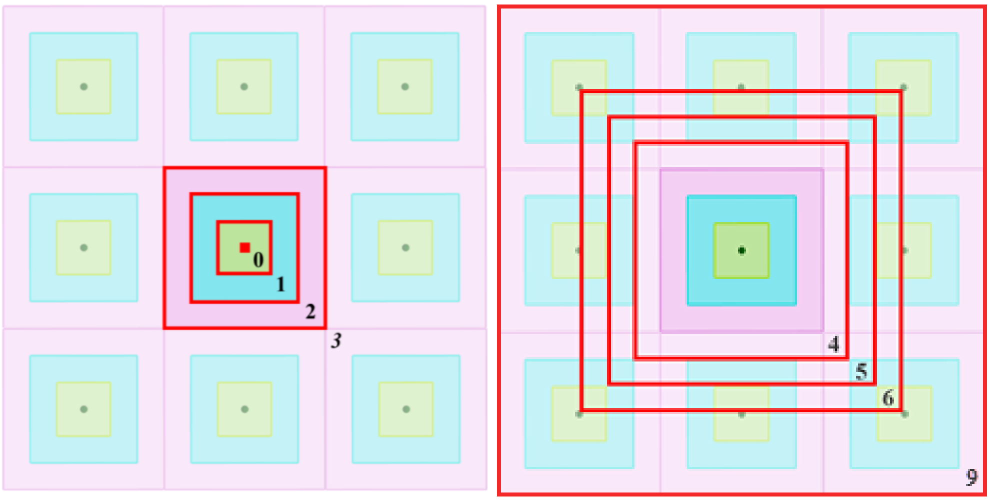

Рисунок 5 – Двумерное представление связи составных и базовых слоёв.
Слева – слои № 0–3 (базовые). Справа – слои № 4–6 (составные)

Так становится очевидным, что последующие группы слоёв в точности повторят координационные слои № 4–9. Единственным их отличием будет их более крупный размер. При этом 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.

Схемы граней составных координационных слоёв для рассматриваемой структуры будут иметь вид, показанный на рис. 6. То есть слой № 5 включает в свой состав элементы слоёв № 1 (зелёный), № 2 (синий), № 3 (чёрный).

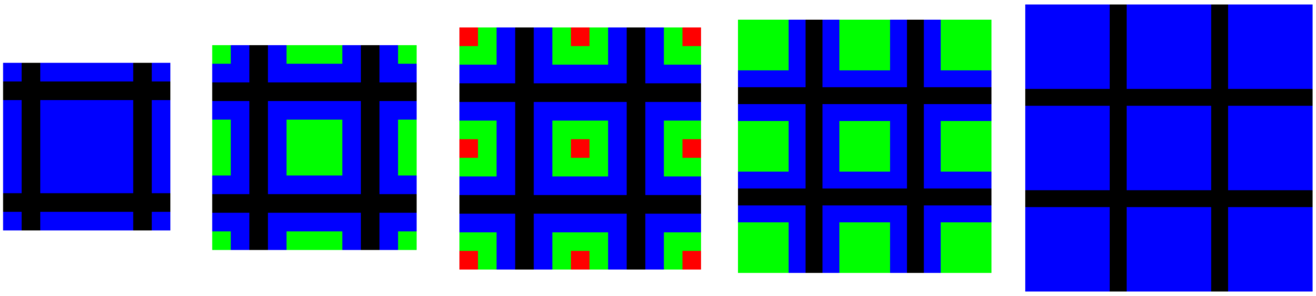

Рисунок 6 – Схемы координационных слоёв № 4, 5, 6, 7, 8 (слева направо)

Тогда можно ввести понятие периода – последовательности координационных слоёв с номерами от $L_{min,T}$ до $L_{max,T}$, рассчитываемыми по формулам:

$$L_{min,T} = (M+1) + 2M(T-1) = M\,(2T-1) + 1,$$

$$L_{max,T} = M(2T-1) + 1 + 2M - 1 = M(2T+1),$$

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

При этом построение последовательностей координационных слоёв позволяет сделать ряд наблюдений. Во-первых, схемы составных координационных слоёв периодически повторяются. Во-вторых, слои, занимающие одинаковые позиции в разных периодах, различаются только количеством вертикальных и горизонтальных «полос». На рис. 7 показаны схемы координационных слоёв № 6, 12, 18, принадлежащих к I, II и III периодам соответственно. Каждый из этих слоёв занимает позицию № 2 в своём периоде. Очевидно, что это позволяет заменить обращение к матрицам слоёв из произвольных периодов обращением к соответствующим матрицам I периода.

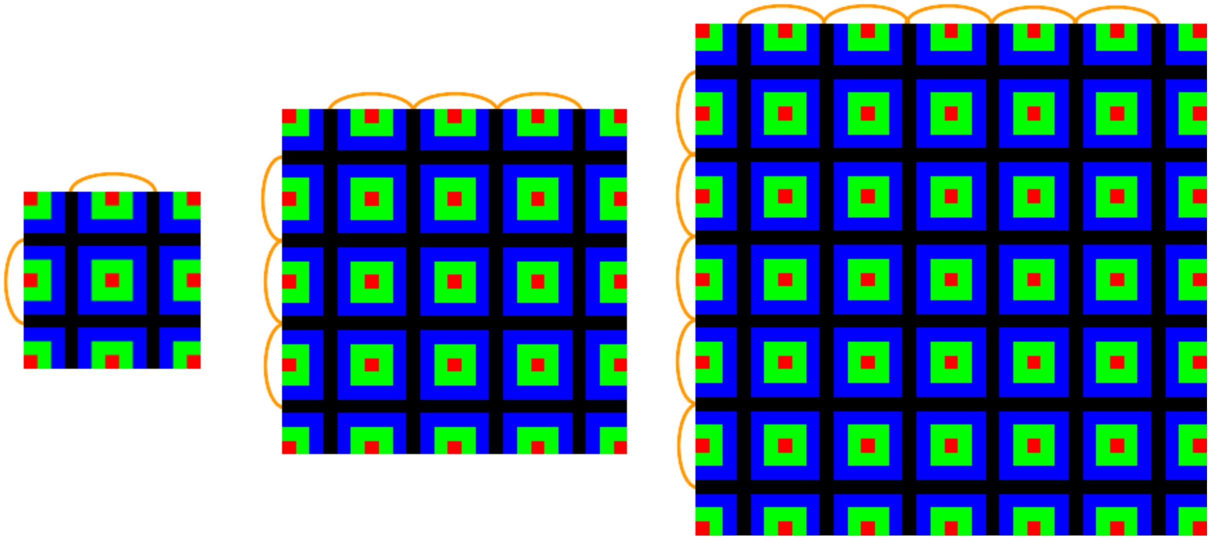

Рисунок 7 – Повторяющиеся вертикальные и горизонтальные «полосы»
в координационных слоях № 6, 12, 18 (слева на право)

Прямой метод определения количества частиц в заданной области пространства предполагает поэлементный обход матричного описания фрагмента решётки. Данный метод прост, но для его применения необходимо сформировать матрицу, полностью описывающую исследуемый фрагмент решётки. Учитывая, что расчёты структурных и энергетических параметров требуют рассмотрения большого количества частиц, размер исходных данных прямого метода будет очень велик. По той же причине сам процесс формирования полного матричного описания также становится длительной ресурсоёмкой операцией. Кроме того, последующий поэлементный обход матрицы тоже ресурсоёмок.

В то же время, выявленные взаимосвязи и закономерности в структурах координационных слоёв позволяют избежать необходимости воссоздавать матрицы всех затрагиваемых исследованием слоёв, кроме слоёв I периода.

Также можно исключить необходимость отдельной обработки каждого исследуемого слоя. Для этого вводятся два новых понятия: 1) прообразы – компактные матрицы, находящиеся в I периоде; 2) образы – матрицы такого же шага сжатия, занимающие такие же позиции, что и прообраз, но в других периодах. Примерами могут служить матрицы слоёв № 6 (прообраз) и № 12, 18 (образы) при базовом наборе четырёх слоёв (см. рис. 7).

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

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

где T – номер периода, M – номер старшего базового слоя, L_{pro} – позиция слоя L в периоде, n – количество образов слоя L_{pro} в исследуемом объёме пространства, L_{max} – наибольший номер слоя, описывающего заданный фрагмент решётки, *div* – операция целочисленного деления, *mod* – операция получения остатка от деления.

Структурный метод предполагает разбиение компактной матрицы третьего шага сжатия на структурные компоненты (рис. 8). Границы компонентов в матрице можно легко определить на основе количества матриц M, составляющих базовый набор, и номера текущего слоя. Например, компонент № 0 представляет собой квадрат со стороной равной M. Компонент № 3 представляет собой прямоугольник, одна сторона которого совпадает со стороной компонента № 0, а другая рассчитывается следующим образом: $W = 2M$.

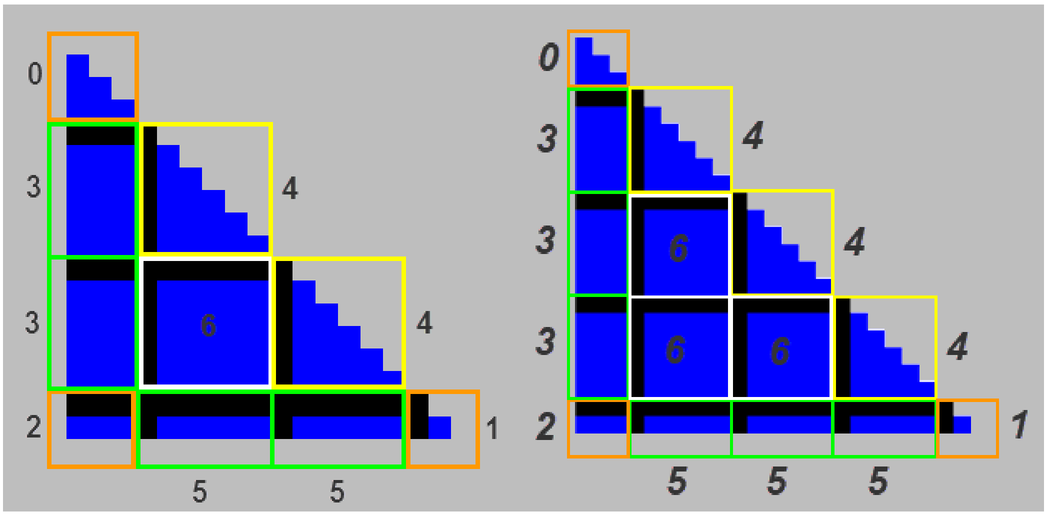

Рисунок 8 – Схемы компактных матриц третьего шага сжатия слоёв № 16, 20 (четыре базовых слоя). Слева – разбиение на компоненты матрицы-прообраза. Справа – ближайшая матрица-образ

Анализ схем треугольных матриц показал, что матрицы I и II периодов содержат не все структурные компоненты матриц последующих периодов. Поэтому в случае матриц третьего шага сжатия прообразы будут находится в III периоде. Также это позволяет заключить следующее: 1) образы имеют те же компоненты, что и прообразы; 2) количество компонентов разного типа в составе образа определяется её номером периода (см. рис. 8).

Построение схем компактных матриц III–V периодов, позволяет получить сведения о количестве структурных компонентов каждого типа в их составе (таблица 1). Для удобства расчётов нумерация периодов в таблице и в последующих вычислениях начинается с третьего периода.

Таблица 1 – Количество компонентов в матрицах третьего шага сжатия периодов III–V

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

Можно сделать вывод, что количество структурных компонентов каждого из типов напрямую зависит от номера периода и может быть рассчитано по формулам:

$$\boldsymbol{\alpha_T} = 1; \boldsymbol{\beta_T} = T + 1; \boldsymbol{\gamma_T} = \frac{T^2 + T}{2}, \tag{3}$$

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 (2), (3) и количество частиц в компоненте каждого типа. Затем остаётся найти сумму произведений по следующей формуле:

$$P_L = \alpha_T \cdot P_\alpha + \beta_T \cdot P_\beta + \gamma_T \cdot P_\gamma.$$

Легко заметить, что количество компонентов каждого типа в структуре матриц-образов, находящихся в разных периодах, образуют числовые ряды. Это делает возможным непосредственно определять суммарное количество частиц во всех матрицах-образах для каждой конкретной матрицы-прообраза. Принимая во внимание формулы (3), количество компонентов каждого из типов может быть рассчитано как частичная сумма элементарных числовых рядов. А общее количество частиц P можно рассчитать по формуле:

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

где P_i – количество частиц в i-ой матрице базового набора, P_k – количество частиц в k-ой матрице I периода, P_m – количество частиц в m-ой матрице II 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.

Канонический расчёт значения коэффициента компактности предполагает использование эффективного количества частиц в исследуемом фрагменте решётки P_{ef}, рассчитываемое по формуле:

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

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.

Получить P_{ef} из полного количества частиц можно с помощью поправки P_{crt}:

$$P_{ef} = P - P_{crt}; \; P_{crt} = \frac{1}{2} \cdot P_{fcs} + \frac{3}{4} \cdot P_{edg} + \frac{7}{8} \cdot P_{vrt}.$$

Количество частиц, находящихся на поверхности исследуемого фрагмента, можно определить с помощью матрицы старшего слоя. Компактные матрицы содержат информацию о количестве частиц, располагающихся в вершинах слоя, в сегменте *A*. На рёбрах – в сегменте *B*. На гранях – в сегменте *C* (рис. 9). Ширина и высота сегмента *A* всегда равна единице.

Совмещая наложением границы структурных компонентов и сегментов (см рис. 9), можно определить отношения между ними. Учитывая периодичность структуры, количество частиц может быть рассчитано по следующим формулам:

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

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

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

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 *A*–*C*.

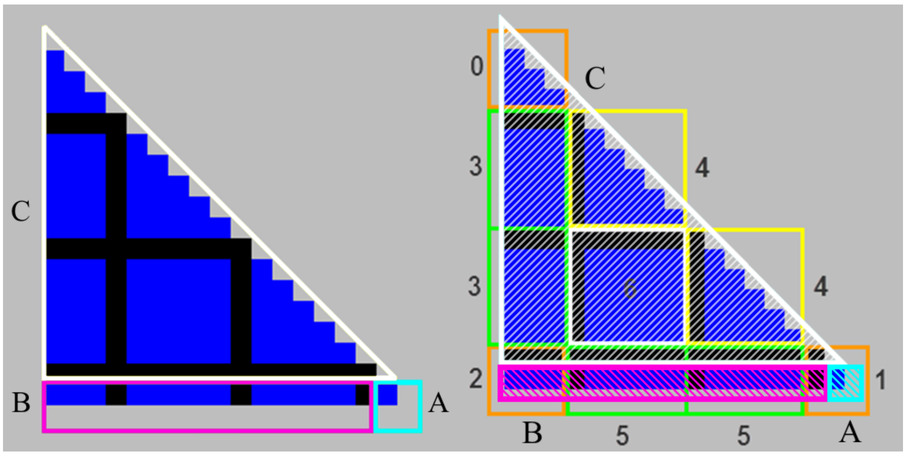

Рисунок 9 – Компактная матрица третьего шага сжатия. Слева – разбиение на сегменты. Справа – соотношение сегментов и структурных компонентов матрицы

Таким образом, разработан метод расчёта, позволяющий определить эффективное количество частиц в заданном фрагменте пространственной решётки на основе её компактной векторно-матричной модели.

На основе предлагаемой версии метода компактного матричного описания, метода Харрисона-Сычёва, а также подходов, использованных при разработке метода определения количества частиц и расчёта коэффициента компактности, разработана новая версия метода расчёта постоянной Маделунга. Согласно предложенному методу, в качестве матричного описания решётки используются зарядовые матрицы. Величина заряда компенсирующей сферы Харрисона рассчитывается с помощью метода определения количества частиц во фрагменте решётки заданного размера. А эквивалент решёточных сумм – вклад компонентов матриц рассчитывается как сумма следующих частичных сумм рядов:

$$A_{q,0} = \sum_{l=0}^{2M+1}\sum_{i=0}^{M-1}\sum_{g=0}^{i}\left(q_{l,i,g}\cdot\sum_{T=1}^{T_{max}}\frac{1}{R_{0,l,i,g,T}}\right), A_{q,1} = \sum_{l=0}^{2M+1}\sum_{i=0}^{M-1}\sum_{g=0}^{i}\left(q_{l,i,g}\cdot\sum_{T=1}^{T_{max}}\frac{1}{R_{1,l,i,g,T}}\right),$$

$$A_{q,2} = \sum_{l=0}^{2M+1}\sum_{i=0}^{M-1}\sum_{g=0}^{M-1}\left(q_{l,i,g}\cdot\sum_{T=1}^{T_{max}}\frac{1}{R_{2,l,i,g,T}}\right), A_{q,3} = \sum_{l=0}^{2M+1}\sum_{i=0}^{2M-1}\sum_{g=0}^{M-1}\left(q_{l,i,g}\cdot\sum_{T=1}^{T_{max}}\sum_{j=0}^{T}\frac{1}{R_{3,l,i,g,T}}\right),$$

$$A_{q,4} = \sum_{l=0}^{2M+1}\sum_{i=0}^{2M-1}\sum_{g=0}^{i}\left(q_{l,i,g}\cdot\sum_{T=1}^{T_{max}}\sum_{j=0}^{T}\frac{1}{R_{4,l,i,g,T}}\right), A_{q,5} = \sum_{l=0}^{2M+1}\sum_{i=0}^{M-1}\sum_{g=0}^{2M-1}\left(q_{l,i,g}\cdot\sum_{T=1}^{T_{max}}\sum_{j=0}^{T}\frac{1}{R_{5,l,i,g,T}}\right),$$

$$A_{q,6} = \sum_{l=0}^{2M+1}\sum_{i=0}^{2M-1}\sum_{g=0}^{2M-1}\left(q_{l,i,g}\cdot\sum_{T=1}^{T_{max}}\sum_{j=0}^{T-1}\sum_{p=0}^{j}\frac{1}{R_{6,l,i,g,T}}\right),$$

$$R_{0,l,i,g,T} = \sqrt{[(5M+1)+l+(T-1)]^2+i^2+g^2}\,,$$
$$R_{1,l,i,g,T} = \sqrt{[(5M+1)+l+(T-1)]^2+[3M+2MT+i]^2+[3M+2MT+g]^2}\,,$$
$$R_{2,l,i,g,T} = \sqrt{[(5M+1)+l+(T-1)]^2+[3M+2MT+i]^2+g^2}\,,$$
$$R_{3,l,i,g,T} = \sqrt{[(5M+1)+l+2M(T-1)]^2+[M+2Mj+i]^2+g^2}\,,$$
$$R_{4,l,i,g,T} = \sqrt{[(5M+1)+l+2M(T-1)]^2+[M+2Mj+i]^2+[M+2Mj+g]^2}\,,$$
$$R_{5,l,i,g,T} = \sqrt{[(5M+1)+l+2M(T-1)]^2+[M+2MT+i]^2+[M+2Mj+g]^2}\,,$$
$$R_{6,l,i,g,T} = \sqrt{[(5M+1)+l+2M(T-1)]^2+[3M+2Mj+i]^2+[M+2Mp+g]^2}\,,$$

где $A_{q,n}$ – суммарный вклад элементов компонента № n и всех его образов, l – номер текущего слоя в рабочем периоде, $q_{l,i,g}$ – значение текущего элемента (заряд), $R_{n,l,i,g,T}$ – расстояние между текущим элементом или его образом и единственным элементом нулевого координационного слоя, T_{max} – номер последнего исследуемого периода.

При этом проверять принадлежность пространству сферы Харрисона нужно элементы только тех слоёв, для которых не выполняется следующее условие: $l \le L_{max}/\sqrt{3}$, где l – номер текущего слоя, L_{max} – последний координационный слой, затронутый исследованием.

В таком случае формула расчёта постоянной Маделунга будет иметь вид:

$$A_M = \frac{1}{k}\cdot\left(A_{q,S}+\sum_{i=0}^{6}\left[A_{q,i}\right]-\frac{Q}{L_{max}}\right),$$

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.

Предложенный новый метод расчёта показывает возможность применения развиваемых подходов для решения актуальных задач науки и техники в отношении структур гораздо более сложных, чем рассматриваемые решётки структурных типов вюртцит и магний.

Дана оценка эффективности и адекватности разработанных моделей и методов. В частности, анализ формул, по которым выполняется расчёт полного количества частиц, позволяет заметить, что во время выполнения вычислений согласно структурному методу, количество совершаемых операций будет расти до обработки некоторого порогового слоя. Пороговым является слой 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 о оставшегося объёма исследуемой решётки. Что является прямым следствием предложенного способа расчёта.

Номера пороговых слоёв легко рассчитать из формул (3.3) и изложенных соображений. При этом определить количество элементов, которые нужно обработать во время исследования можно рассчитать по формуле:

$$Q_3 = \sum_{l=0}^{L} \frac{(1+2l)^2}{2} = \frac{2L^3 + 9L^2 + 13L}{12},$$

где Q_3 – количество элементов, которые нужно обработать во время исследования, при использовании матриц третьего шагов сжатия, L – номер порогового слоя.

Зависимость количества операций от объёма исследуемого фрагмента решётки для каждого из рассмотренных методов расчётов имеет следующий вид:

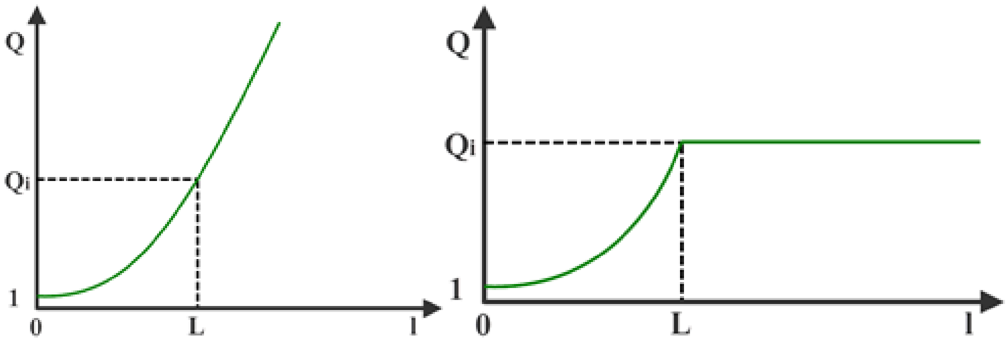

Рисунок 10 – Общий вид зависимости количества операций (Q) от объёма исследуемого фрагмента решётки, задаваемого номером координационного слоя (l). Слева – для прямого численного метода. Справа – для структурного метода

Таким образом, расчёты, выполняемые с помощью разработанного структурного метода, будут требовать выполнения на много меньшего количества операций по сравнению с прямым методом. Однако, данное преимущество будет проявляться при выполнении расчётов для больших фрагментов пространственных решёток.

Полученные теоретические оценки подтверждаются вычислительными экспериментами по расчёту значений коэффициентов компактности. Расчёты проводились на персональном компьютере с характеристиками: процессор *Intel Core i7*

CPU 930, 2.80 GHz; оперативная память – 6 Гб (доступно 5,5 Гб); операционная система – *Microsoft Windows 8.1*, *Профессиональная x64*.

При этом время расчёта структурным методом не превышает 40 мс для фрагмента исследуемых гексагональных решёток любого размера (любого количества слоёв). Что существенно быстрее по сравнению с прямым методом расчёта.

Для оценки точности структурного метода был выполнен практический расчёт величины межъядерного расстояния для веществ, обладающих структурами ГПУ (структурный тип *Mg*) и вюртцита (структурный тип *α-ZnS*), представленные в таблицах 2 и 3. В качестве контрольных данных использовались значения, установленные в ходе физических экспериментов. Вычисления выполнялись в пакете прикладных программ «Оранжерея» по компактным матричным моделям решёток с использованием разработанного структурного численного метода и кристаллографической формулы длины связи (1). Объём исследуемой пространственной структуры был эквивалентен 100 000 координационных слоёв.

Таблица 2 – Кристаллы типа Mg

Кристалл	***M* (а.е.м.)**	***ρ* (кг/м³)**	**$a_{эксп.}$ (нм)**	**Расчётное значение *d* (нм)**		
				Контроль	**ШУМ**	**КУМ**
Cd	224,829	8690	0,29788	0,297880	0,315508	0,310694
Mg	48,610	1740	0,32093	0,320930	0,323686	0,318748
Re	372,414	20800	0,27608	0,276080	0,279074	0,274817
Ru	202,144	12100	0,27053	0,270530	0,272703	0,268543
Tl	408,760	11850	0,34563	0,345630	0,347255	0,341958
Zn	130,764	7134	0,2665	0,266500	0,281266	0,276975
ε-Co	117,866	8860	0,25071	0,250710	0,252765	0,248909

Таблица 3 – Кристаллы типа α-ZnS

Кристалл	***M* (а.е.м.)**	***ρ* (кг/м³)**	**$a_{эксп.}$ (нм)**	**Расчётное значение *d* (нм)**		
				Контроль	**ШУМ**	**КУМ**
α-ZnS	97,43	4087	0,3814	0,233559	0,240253	0,236588
ZnO	81,37	5675	0,3250	0,199021	0,202802	0,199708
CdS	144,48	4820	0,4135	0,253216	0,259314	0,255358
α-SiC	40,097	3160	0,3081	0,188672	0,194707	0,191736
GaN	83,73	6070	0,3190	0,195347	0,200203	0,197149
AlN	40,989	3050	0,3110	0,190448	0,198470	0,195442
BeO	25,011	3019	0,2698	0,165218	0,168912	0,166336
InN	128,83	6786	0,3545	0,217086	0,222693	0,219296
MgTe	151,9	3850	0,4530	0,277405	0,284187	0,279852
CdSe	191,37	5660	0,4299	0,263259	0,269934	0,265817
MnS	87	3248	0,3985	0,244030	0,249770	0,245960

Результаты вычислений позволили сделать следующие выводы. Во-первых, полученные расчётные значения величин межъядерных расстояний обладают высоким соответствием данным физических экспериментов. Во-вторых, использование модели кубической упаковки, компактной матричной модели и структурного численного метода позволяет повысить точность расчётов в среднем на 1,5 %.

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 веществ с высокой точностью и скоростью.

В четвёртой главе описаны разработанные в рамках диссертационного исследования отдельные программы для ЭВМ, объединённые в комплекс программ «Оранжерея», позволяющие на основе предложенных моделей и численных методов выполнять расчёты значений коэффициента компактности и величин межъядерных расстояний для веществ структурных типов вюртцит и магний

ВЫВОДЫ И РЕКОМЕНДАЦИИ

Основные результаты и выводы, полученные при выполнении диссертационной работы, заключаются в следующем:

1. Разработана универсальная версия метода компактного матричного описания, применимая к пространственным решёткам некубических сингоний. А также более простой и эффективной структурой формируемых описаний по сравнению с оригинальной версией метода.
2. С помощью разработанного метода описания получены компактные матричные описания гексагональной плотно упакованной решётки, а также решётки структурного типа вюртцит. Результаты расчётов структурных параметров показали высокий уровень соответствия экспериментальным данным, чем подтвердили адекватность разработанных методов.
3. Разработан структурный метод численного расчёта количества частиц в заданном объёме структуры и коэффициента плотности пространственной упаковки. Данный метод позволяет с высокой точностью проводить соответствующие вычисления за небольшой фиксированный отрезок времени для фрагментов решёток любых размеров.
4. Разработан метод расчёта постоянной Маделунга, принимающий в качестве исходных данных компактное матричное описание исследуемой решётки.
5. Показана применимость предложенных методов для формирования компактных матричных описаний сложных структур и расчётов их структурных и энергетических параметров.
6. Разработан комплекс программ «Оранжерея», позволяющий выполнять построение компактных матричных описаний, расчёты коэффициента компактности и межъядерного расстояния для гексагональной плотно упакованной решётки и решётки структурного типа вюртцит.
7. Комплекс программ «Оранжерея» является модульным кроссплатформенным программным продуктом, построенным с использованием 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.

Дальнейшее развитие применённых в данной работе подходов и инструментов 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) создание математических описаний более сложных структур; 3) разработка высокоскоростных точных численных методов расчёта других структурных и энергетических параметров решёток; 4) соответствующие расширения возможностей комплекса программ «Оранжерея».

СПИСОК ОСНОВНЫХ ПУБЛИКАЦИЙ

Статьи Scopus

1. 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.

Статьи ВАК

2. 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.
3. Фомин, Д. В. Детерминированное моделирование кристаллической структуры гексагонального алмаза. I / Д. В. Фомин // Информатика и системы управления. – 2019. – № 2(60). – С. 48–56.
4. Фомин, Д. В. Детерминированное моделирование кристаллической структуры гексагонального алмаза. II / Д. В. Фомин // Информатика и системы управления. – 2019. – № 3(61). – С. 32–41.
5. Фомин, Д. В. Детерминированное моделирование кристаллической структуры гексагонального алмаза. III / Д. В. Фомин // Информатика и системы управления. – 2019. – № 4(62). – С. 45–57.
6. Ерёмин, И. Е. Вычислительный эксперимент по выявлению кубического периода гексагонального алмаза / И. Е. Ерёмин, Д. В. Фомин // Математические заметки СВФУ. – 2019. – Т. 26. – № 2. – С. 80–93.
7. Ерёмин, И. Е. Оценка эффективности структурного компактно-матричного метода расчёта коэффициента компактности / И. Е. Ерёмин, Д. В. Фомин // Информатика и системы управления. – 2021. – № 1(67). – С. 44–54.
8. Фомин, Д.В. Структурный компактно-матричный метод расчёта коэффициента компактности / Д. В. Фомин, Е. В. Дегтярёв // Информатика и системы управления. – 2021. – № 3(69). – С. 25–38.
9. Фомин, Д. В. Моделирование плотности упаковки простейшей гексагональной решетки. I / Д. В. Фомин // Информатика и системы управления. – 2021. – № 4(70). – С. 39–52.
10. Фомин, Д. В. Моделирование плотности упаковки простейшей гексагональной решетки. II / Д. В. Фомин, Е. В. Дегтярёв // Информатика и системы управления. – 2022. – № 1(71). – С. 62–77.
11. Фомин, Д. В. Моделирование плотности упаковки простейшей гексагональной решетки. III / Д. В. Фомин // Информатика и системы управления. – 2022. – № 4(74). – С. 42–53.
12. Фомин, Д. В. Применимость метода компактного матричного описания к решёткам цеолитов / Д. В. Фомин // Южно-Сибирский научный вестник. – 2024. – №4. – С. 69–75.

Объекты интеллектуальной собственности

13. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2018663888 (РФ). Программа определения периода простейшей гексагональной

решётки «Астра» / Амурский государственный университет; Фомин Д. В., Еремин И. Е. – Зарегистрировано 06.11.2018, бюллетень № 11.

14. 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., Еремин И. Е. ; заявитель и правообладатель ФГБОУ ВО «АмГУ». – 1 с.

15. 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., Еремин И. Е. ; заявитель и правообладатель ФГБОУ ВО «АмГУ». – 1 с.

16. 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., Еремин И. Е. ; заявитель и правообладатель ФГБОУ ВО «АмГУ». – 1 с.

17. 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., Еремин И. Е. ; заявитель и правообладатель ФГБОУ ВО «АмГУ». – 1 с.

18. 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.

19. 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.

20. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2023617122 Российская Федерация. Программа моделирования структурных параметров пространственных решёток «Оранжерея» №2023616168: заявл. 30.03.2023: зарег. 05.04.2023 / Фомин Д. В., Еремин И. Е. ; заявитель и правообладатель ФГБОУ ВО «АмГУ». – 1 с.