УДК 538.91

© 2021 г. Д.В. Фомин

(Амурский государственный университет, Благовещенск)

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛОТНОСТИ УПАКОВКИ ПРОСТЕЙШЕЙ ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ РЕШЕТКИ. I

В статье рассматриваются классические и альтернативные элементарные ячейки кубических и гексагональной плотно упакованной кристаллических решеток. Анализируются способы оценки плотности пространственной упаковки и расстояния между частицами в кристалле. Сравниваются шаровая и кубическая модели укладки равновеликих непересекающихся сфер. Приводится сравнительная оценка их эффективности на основе практических расчетов.

Ключевые слова: модель кристаллической решетки, кубическая решетка, гексагональная решетка, коэффициент компактности, плотность упаковки, шаровая упаковка, кубическая упаковка.

DOI: 10.22250/isu.2021.70.39-52

Введение

Задачи, связанные с пространственными упаковками сфер, находят применение в разных областях науки и техники, включая математическую теорию групп, кристаллографию, кодирование информации, теорию телекоммуникации, физику конденсированного состояния, физику плазмы и ряд других [1 – 29]. При этом большое значение имеет рассмотрение пространственных упаковок равновеликих неперекрывающихся сфер, а также задачи поиска наиболее плотной упаковки шаров в пространстве и оценки плотности упаковки [16, 17].

Определенный интерес представляют шаровые упаковки в трехмерном пространстве, в особенности кубические – примитивная, объемно центрированная, а также кубическая и гексагональная плотнейшие упаковки. Данные упаковки не только широко распространены в природе, но и относительно просты. Это делает их удобными объектами для разработки новых математических моделей и методов, которые в дальнейшем могут быть распростра-

нены на упаковки более сложных типов.

Решетчатые модели плотных шаровых упаковок

Плотные шаровые упаковки (ПШУ) подразумевают заполнение пространства соприкасающимися равновеликими сферами, образующими кристаллическую структуру. То есть сферы располагаются в пространстве, периодически повторяясь, в строго определенных направлениях, через строго определенные промежутки. Это позволяет использовать пространственную решетку в качестве геометрической схемы, точно описывающей расположение частиц в кристалле [2].

В 1848 г. О. Бравэ показал, что все кристаллические структуры можно описать с помощью четырнадцати типов решеток, различающихся элементарными ячейками и делящихся на семь групп кристаллографических сингоний [2, 30]. Одной из простейших является кубическая сингония. Она включает примитивную (ПК), объемно центрированную (ОЦК) и грани центрированную (ГЦК) решетки.

Элементарная ячейка примитивной кубической решетки имеет структуру, представленную на рис. 1. Согласно классическому подходу, коэффициент компактности рассчитывается как отношение объема пространства ячейки, занятого сферами V_s , к общему объему пространства V . Таким образом, общая формула расчета коэффициента компактности для шаровых упаковок в трехмерном пространстве, описываемых кубическими решетками, будет иметь вид:

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

где N – число целых шаров, принадлежащих пространству элементарной ячейки; a – длина ребра ячейки (параметр решетки), выраженная через R [2].

б)

Рис. 1. Примитивная кубическая решетка:
а) упаковка равновеликих неперекрывающихся сфер;
б) элементарная ячейка.

Для примитивной кубической решетки длина ребра ячейки a совпадает с расстоянием между частицами d и составляет $a = 2R$ (рис. 1б). Таким образом, коэффициент компактности ПК составит [2, 8, 30]:

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

Структура элементарной ячейки объемно центрированной кубической решетки показана на рис. 2.

Рис. 2. Объемно центрированная кубическая решетка:

а) упаковка равновеликих неперекрывающихся сфер; б) элементарная ячейка.

Длина ребра ячейки a может быть выражена через радиус сфер R из двух прямоугольных треугольников, образованных диагональю куба и ее проекцией в плоскость основания: $a = 4R / \sqrt{3}$. Тогда коэффициент компактности ОЦК составит [2, 8, 30]:

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

Структура элементарной ячейки гранецентрированной кубической решетки показана на рис. 3.

Рис. 3. Гранецентрированная кубическая решетка:

а) упаковка равновеликих неперекрывающихся сфер; б) элементарная ячейка.

Длину ребра a можно выразить через радиус сфер R из прямоугольного треугольника, образованного диагональю грани ячейки: $a = 4R / \sqrt{2}$. Тогда

коэффициент компактности ГЦК составит [2, 8, 30]:

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

Среди существующих правил и рекомендаций выбора фрагмента решетки в качестве элементарной ячейки действительно обязательным является возможность бесконечно строить решетку путем трансляции выбранного фрагмента. Это позволяет выбирать другие элементарные ячейки для тех же решеток в зависимости от решаемой задачи [2].

Так, для ГЦК можно выбрать эквивалентную элементарную ячейку (рис. 3). Для этого достаточно сместить куб, задающий границы ячейки, вдоль одного из ребер на половину длины последнего. Такая ячейка содержит столько же полных сфер, что и классическая элементарная ячейка ГЦК. Следовательно, альтернативная ячейка дает то же значение компактности, что и классическая (рис. 4).

Рис. 4. Эквивалентный вариант элементарной ячейки ГЦК.

При этом эквивалентная элементарная ячейка ГЦК (рис. 5а) более соответствует слоистому характеру плотной шаровой упаковки [30]. Более того, шестигранная призма, основаниями которой являются сечения двух кубов с общей вершиной (рис. 5б), также обладает свойствами элементарной ячейки, т.е. для ГЦК возможно выделить еще одну альтернативную элементарную ячейку (рис. 5в, г), имеющую уже не кубическую форму [31, 32].

Учитывая, что основанием альтернативной гексагональной элементарной ячейки ГЦК является правильный шестиугольник, – длина ребра основания $a = 2R$. Очевидно, что высота призмы может быть выражена через высоты правильных тетраэдров, образуемых соседними частицами структуры (рис. 5д). Тогда объем призмы V_{hex} может быть найден через ее площадь S_{hex} и высоту H . Откуда коэффициент компактности гранецентрированной кубической решетки для альтернативной элементарной ячейке составит:

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

Таким образом, ГЦК описывает трехслойную шаровую упаковку и может быть задана не только кубической, но и гексагональной элементарной ячейкой, что также указывает на сходство ГЦК и ГПУ.

Рис. 5. 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 ее основания.

ГПУ является двухслойной упаковкой равновеликих неперекрывающихся шаров. Ее элементарная ячейка представлена на рис. 6.

Рис. 6. Гексагональная плотноупакованная решетка: а) упаковка равновеликих неперекрывающихся сфер; б) элементарная ячейка; в) связь высоты ячейки с длиной ребра ее основания.

Очевидно, что высота призмы может быть выражена через высоты правильных тетраэдров, образуемых соседними частицами структуры (рис. 6г). Тогда объем призмы V_{hex} может быть найден через ее площадь S_{hex} и высоту H_{hex} , а коэффициент компактности составит [30]:

$$\gamma_{hp} = \frac{6 \cdot 4\pi R^3 \cdot \sqrt{2}}{3 \cdot 48R^3} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} \approx 74\%.$$

Таким образом, значения коэффициентов компактности ГПУ и ГЦК одинаковы. При этом сами структуры имеют существенное топологическое различие: все частицы кубической гранецентрированной решетки расположены одинаково относительно окружающих частиц; расположение частиц из соседних слоев в гексагональной плотно упакованной решетке различается [33].

Макроскопический расчет межъядерного расстояния

На данный момент для определения структуры вещества главным образом используются методы рентгеноструктурного анализа [3, 34 – 36]. Они основаны на исследовании дифракционной картины рентгеновского облучения исследуемого образца. Это позволяет определить симметрию кристалла. Но для определения его структуры необходимо знать расстояние между частицами [36]. Для решения данной задачи существует два подхода, разработанные У.Л. Бреггом [3].

Первый подход состоит в рассмотрении макроскопических характеристик кристалла: объема элементарной ячейки V и плотности ρ . При этом считается, что кристалл составлен из соприкасающихся сфер, а расстояние между частицами в решетке d принимается равным сумме радиусов R_1 и R_2 двух соприкасающихся сфер, соответствующих атомам разных элементов. Таким образом, значение d может быть выражено следующим образом:

$$V_0 = 2d^3, \rho = \frac{M}{N_A V_0} = \frac{M}{2N_A d^3}, d = \sqrt[3]{\frac{M}{2N_A \rho}}, \quad (1)$$

где V_0 – элементарный объем; M – молярная масса; N_A – число Авогадро [3].

Очевидно, что в зависимости от типа решетки, каждая структурная единица кристаллического вещества занимает некоторый «собственный» объем и некоторый «свободный» объем. Исходя из этого, У.Л. Брэгг предложил использовать в расчете «элементарный объем» – объем пространства, приходящегося на одну пару связанных частиц. Данный объем определяется как объем двух равных кубов, один из которых эквивалентен объему двух связанных частиц, а другой – свободному объему, приходящемуся на эту же пару частиц (рис. 7).

Рис. 7. Элементарный объем Брэгга.

Стоит отметить, что «собственный» объем V_{cb} практически равен суммарному объему сфер $V_{\Sigma, sph}$, соответствующих частицам:

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

Второй подход к определению расстояния d основан 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 согласно закону Вульфа-Брэгга:

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

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

На данный момент именно второй подход к определению расстояния между частицами в кристалле распространен более широко. Но различные варианты аналитического подхода также находят свое применение. Так, В.В. Зуев в работах [37 – 39] предлагает использовать относительную структурную плотность γ' кристаллической решетки, входящей в состав альтернативной кристаллохимической формулы плотности кристаллов [37, 38]:

$$\rho = \frac{k' \gamma' M}{n' d^3}, \quad (2)$$

где n' – число атомов в формуле соединения, $k' = 1,66$ – константа для выражения плотности в г/см³ и равная атомной единице массы, поделенной на коэффициент перевода кубических ангстремов в кубические сантиметры.

Также в работах [37, 38] отмечается, что можно вывести строгую формулу оценки ρ из кристаллохимических данных путем сопоставления формулы (2) с известной рентгеноструктурной формулой плотности:

$$\rho = \frac{k' N' M}{V}, \quad (3)$$

где N' – число формульных единиц в элементарной ячейке.

В результате комбинирования этих двух формул можно получить:

$$\gamma' = \frac{N'n'd^3}{V}. \quad (4)$$

В работах [37, 38] также указывается, что переход от γ' к γ осуществляется по формуле: $\gamma = b\gamma'$, где $b = 52,4\%$ – выраженная в процентах степень заполнения пространства равновеликими соприкасающимися сферами в решетке ПК.

Из подходов У.Л. Брэгга и В.В. Зуева логически следует формула коэффициента компактности для кубических решеток, которая может быть получена путем комбинации формул (1) и (4):

$$\gamma = \frac{V_F}{V} = \frac{\frac{N}{2} \cdot (2R)^2}{a^3}, \quad (5)$$

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

Согласно подходу Брэгга, в расчетах 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: $P = N/2 = N'$.

Объем кубической элементарной ячейки – $V = a^3$. Межъядерное расстояние d позволяет определить элементарный объем V_0 , приходящийся на одну связь и составляющего $d = 2R$.

Тогда формулы (4) и (5) взаимосвязаны: $\gamma = \gamma'/n'$, а плотность кристаллического вещества с кубической решеткой может быть рассчитана через межъядерное расстояние, коэффициент компактности и молекулярную массу:

$$\rho = \frac{kM\gamma}{d^3},$$

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

$$d = \sqrt[3]{\frac{kM\gamma}{\rho}}. \quad (6)$$

Таким образом, существуют разные модели кристаллической структуры: классическая модель шаровых упаковок и модель Брэгга-Зуева – модель

кубических упаковок. Соответственно существуют и разные методы оценки коэффициента компактности кристаллических структур, а также формулы, связывающие значение коэффициента компактности со значениями макропараметров вещества.

Сравнительная эффективность моделей

Оценку эффективности моделей плотности упаковки можно произвести на основе формулы (6), используя классические формулы, соответствующие модели шаровой упаковки (ШУМ), и формулу (5), соответствующую модели кубической упаковки (КУМ), путем определения величины межъядерного расстояния и ее сравнения с литературными данными.

Справочные данные об атомной массе взяты из источников [40 – 43], о плотности – из справочников [44, 45], о межъядерном расстоянии – из источников [44 – 47]. Результаты соответствующих расчетов для ПК (структурный тип $NaCl$, КЧ = 6), ОЦК (структурный тип $CsCl$, КЧ = 8), ГЦК (структурный тип Cu , КЧ = 12) и ГПУ (структурный тип Mg , КЧ = 12) решеток приведены в табл. 1 – 4 соответственно.

В графе «Расчет» приводятся значения межъядерного расстояния d , соответствующие определенному экспериментально параметру решетки $a_{эксп.}$ с учетом типа кристаллической решетки.

В графах «ШУМ» и «КУМ» приводятся значения межъядерного расстояния, рассчитанные на основе соответствующих моделей упаковок частиц.

Таблица 1

Кристалл	M (а.е.м.)	ρ (кг/м ³) [44]	$a_{эксп.}$ (нм)	Расчетное значение d (нм)		
				Кон-троль	ШУМ	КУМ
AgBr	187,772 [40]	6470	0,577450 [44]	0,288725	0,293309	0,288834
AgCl	143,318 [40]	5560	0,556000 [47]	0,278000	0,281941	0,277640
AgF	126,867 [40]	5852	0,492000 [46]	0,246000	0,266132	0,262072
CaO	56,077 [40]	3340	0,481080 [45]	0,240540	0,244397	0,240669
CaS	72,138 [40]	2590	0,568900 [44]	0,284450	0,289315	0,284902
CoO	74,932 [40,41]	6440	0,426000 [44]	0,213000	0,216277	0,212978
FeO	71,844 [40]	6000	0,430000 [47]	0,215000	0,218355	0,215024
KBr	119,002 [40]	2740	0,660000 [46]	0,330000	0,335494	0,330376
KCl	74,548 [40]	1988	0,629310 [44]	0,314655	0,319465	0,314591
KF	58,097 [40]	2480	0,534700 [46]	0,267350	0,273096	0,268930
KI	166,003 [40]	3120	0,706555 [46]	0,353278	0,358979	0,353503
LiBr	86,844 [40]	3464	0,550130 [46]	0,275065	0,279342	0,275081

Продолжение табл. 1

LiCl	42,390 [40]	2070	0,512954 [46]	0,256477	0,261124	0,257141
LiF	25,938 [40]	2640	0,401730 [46]	0,200865	0,204423	0,201304
LiI	133,845 [40]	4060	0,600000 [46]	0,300000	0,306037	0,301369
MgO	40,304 [40]	3600	0,421170 [44]	0,210585	0,213516	0,210259
MnO	70,937 [40,41]	5370	0,444480 [44]	0,222240	0,225622	0,222180
MnS	86,998 [40,41]	4000	0,522300 [44]	0,261150	0,303503	0,298873
NaBr	102,894 [40]	3200	0,597324 [46]	0,298662	0,286088	0,281723
NaCl	58,440 [40]	2170	0,564020 [44]	0,282010	0,235927	0,232327
NaF	41,988 [40]	2780	0,463420 [44]	0,231710	0,328692	0,323678
NaI	149,894 [40]	3670	0,647280 [44]	0,323640	0,213003	0,209753
NiO	74,692 [40]	6720	0,417700 [44]	0,208850	0,301376	0,296778
PbS	239,271 [40]	7600	0,593600 [44]	0,296800	0,313186	0,308408
PbSe	286,183 [40]	8100	0,612550 [44]	0,306275	0,329142	0,324121
PbTe	334,814 [40]	8164	0,646060 [44]	0,323030	0,350124	0,344783
RbBr	165,372 [40]	3350	0,685400 [46]	0,342700	0,336467	0,331335
RbCl	120,918 [40]	2760	0,658100 [46]	0,329050	0,305041	0,300387
RbF	104,466 [40]	3200	0,564000 [46]	0,282000	0,373284	0,367589
RbI	212,372 [40]	3550	0,734200 [46]	0,367100	0,223857	0,220442
TiO	63,866 [40]	4950	0,417660 [46]	0,208830	0,266419	0,262355

Таблица 2

Кристалл	M (а.е.м.)	ρ (кг/м ³)	$a_{\text{эксп.}}$ (нм)	Расчетное значение d (нм)		
				Контроль	ШУМ	КУМ
Ba	274,656 [40]	3620 [44]	0,502300 [45]	0,435005	0,440876	0,434150
Cr	103,992 [40]	7150 [44]	0,288470 [45]	0,249822	0,254208	0,250330
Cs	265,811 [40]	1873 [44]	0,614100 [45]	0,531826	0,543211	0,534924
CsBr	212,810 [40]	4430 [44]	0,428120 [46]	0,370763	0,378575	0,372800
CsCl	168,356 [40]	3988 [44]	0,412300 [46]	0,357062	0,362616	0,357085
CsI	259,810 [40]	4510 [44]	0,456670 [46]	0,395488	0,402207	0,396071
Eu	303,928 [40]	5240 [44]	0,458270 [45]	0,396873	0,403122	0,396972
K	78,197 [40]	862 [45]	0,532100 [45]	0,460812	0,467933	0,460794
Mo	191,902 [40]	10200 [44]	0,316530 [44]	0,274123	0,276981	0,272756
Na	45,980 [40]	970 [44]	0,420960 [45]	0,364562	0,376896	0,371146
Nb	185,813 [41]	8570 [44]	0,330070 [45]	0,285849	0,290394	0,285964
Rb	170,936 [40]	1530 [44]	0,570300 [45]	0,493894	0,501576	0,493925
Ta	361,896 [40]	16400 [44]	0,330580 [44]	0,286291	0,292103	0,287647
V	101,883 [40]	6000 [44]	0,302380 [45]	0,261869	0,267674	0,263591
W	367,682 [40]	19300 [44]	0,316530 [44]	0,274123	0,278139	0,273896
α -Fe	111,690 [40]	7870 [44]	0,286640 [44]	0,248238	0,252137	0,248291
β -Li	13,880 [40]	534 [44]	0,350930 [45]	0,303914	0,308489	0,303783

Таблица 3

Кристалл	M (а.е.м.)	ρ (кг/м ³) [44]	$a_{\text{эксп.}}$ (нм)	Расчетное значение d (нм)		
				Контроль	ШУМ	КУМ
Ag	215,736 [40]	10500	0,40862 [44]	0,288938	0,293426	0,288950
Au	393,933 [41]	19300	0,40786 [44]	0,288401	0,292781	0,288314
Cu	127,093 [40]	8960	0,3615 [44]	0,255619	0,259333	0,255377
Ir	384,434 [41]	22562	0,38391 [45]	0,271465	0,275678	0,271473
Ni	117,387 [40]	8900	0,35241 [45]	0,249192	0,253122	0,249261
Pb	414,422 [40]	11300	0,49505 [44]	0,350053	0,355939	0,350509
Pd	212,842 [40]	12000	0,38901 [45]	0,275072	0,279391	0,275129
Pt	390,170 [40]	21500	0,39231 [44]	0,277405	0,281531	0,277236
Rh	205,811 [41]	12400	0,28032 [45]	0,198216	0,273277	0,269108
Th	464,075 [40]	11700	0,50851 [45]	0,359571	0,365361	0,359787
Yb	346,090 [43]	6900	0,54848 [45]	0,387834	0,395094	0,389067
α -Al	53,963 [41]	2700	0,4049 [44]	0,286308	0,290736	0,286301
α -Ca	80,157 [40]	1540	0,55884 [45]	0,395160	0,400001	0,393899
α -Ce	280,232 [40]	6770	0,5161 [45]	0,364938	0,370593	0,364940
α -Sr	175,242 [40]	2640	0,6084 [45]	0,430204	0,433776	0,427159

Таблица 4

Кри- сталл	M (а.е.м.)	ρ (кг/м ³) [44]	$a_{\text{эксп.}}$ (нм)	Расчетное значение d (нм)		
				Контроль	ШУМ	КУМ
Cd	224,829 [40]	8690	0,29788 [45]	0,297880	0,316858	0,312025
Mg	48,610 [40]	1740	0,32093 [45]	0,320930	0,325072	0,320113
Re	372,414 [40]	20800	0,27608 [45]	0,276080	0,280269	0,275994
Ru	202,144 [40]	12100	0,27053 [45]	0,270530	0,273871	0,269693
Tl	408,760 [40]	11850	0,34563 [45]	0,345630	0,348742	0,343422
Zn	130,764 [40]	7134	0,2665 [44]	0,266500	0,282470	0,278161

Оценка полученных результатов позволяет сделать вывод, что модель кубической упаковки Брэгга-Зуева является более точной по сравнению с классической моделью шаровой упаковки.

Заключение

Анализ публикаций в таких областях как математическая теория групп, кристаллография, кристаллофизика, физика твердого тела, физика плазмы, теория телекоммуникации и кодирования информации позволяет сделать вывод, что методы решения некоторых задач, связанных с ПШУ, обладают потенциалом для повышения удобства, эффективности и точности расчетов. Сравнение результатов определения плотности упаковки кристал-

лов показало, что данная задача решается достаточно просто для решеток с кубическими элементарными ячейками.

Иными словами, имеют место два близких подхода к моделированию кристаллической структуры вещества: классическая шаровая упаковка и кубическая упаковка Брэгга-Зуева. Практические расчеты показали явное преимущество модели кубической упаковки по сравнению с моделью шаровой упаковки. Следовательно, синтез кубических аналогов гексагональных элементарных ячеек, т.е. расширение подхода Брэгга-Зуева должен позволить упростить расчет плотности пространственной упаковки решеток некубического типа, а также оказаться достаточно полезным для решения сопутствующих задач [48 – 53].

ЛИТЕРАТУРА

1. *Кеплер И.* О шестиугольных снежинках. – М.: Наука, 1982.
2. *Шаскольская М.П.* Кристаллография. – М.: Высш. шк., 1984.
3. *Шаскольская М.П.* Очерки о свойствах кристаллов. – М.: Наука, 1978.
4. *Шаскольская М.П.* Кристаллы. – М.: Наука, 1978.
5. *Васильев Д.М.* Физическая кристаллография. – М.: Металлургия, 1972.
6. *Engel P.* Geometric crystallography: an axiomatic introduction to crystallography. – Dordrecht: D. Reidel pub. comp., 1986.
7. *Verma A.R.* Crystallography applied to solid state physics. – New Delhi: New age, 1991.
8. *Giacovazzo C. et al.* Fundamentals of Crystallography. – Oxford: University Press, 2011.
9. *Эйхвальд А.И., Карасев В.Ю., Дзлиева Е.С., Иванов А.Ю.* Упорядоченные плазменно-пылевые структуры в стратах тлеющего разряда // Вестник СПГУ. – 2008. – №1. – С. 36-47.
10. *Карасев В.Ю., Эйхвальд А.И., Дзлиева Е.С., Иванов А.Ю.* Об упорядоченных пылевых структурах, формируемых в тлеющем разряде // ЖЭТФ. – 2008. – Т.133. – Вып. 2. – С. 460–465.
11. *Дзлиева Е.С. и др.* Об особенностях объемного строения плазменно-пылевых структур // Вестник Санкт-Петербургского государственного университета. – 2013. – №2. – С. 39-45.
12. *Поляков Д.Н., Василяк Л.М., Шумова В.В.* Синергетика пылевой плазмы и технологические аспекты применения криогенной пылевой плазмы // ЭОМ. – 2015. – №2. – С.41–49.
13. *Поляков Д.Н., Шумова В.В., Василяк Л.М.* Положительный столб тлеющего разряда с пылевыми частицами // ЭОМ. – 2013. – №2. – С.25–35.
14. *Cavarroc M. et al.* Nanostructured Silicon thin Films Deposited under Dusty Plasma Conditions. // IEEE Transactions on Plasma Science. – 2008. – №36(4). – P. 1016–1017.
15. *Tsytoovich V.N., Morfill G.E., Vladimirov S.V., Thomas H.M.* Elementary Physics of Complex Plasmas // Springer Series on Lect. Notes Phys. – Springer, 2008.
16. *Слоэн Н.Дж.А.* Упаковка шаров // В мире науки, 1984. – №3. – С. 72-82.
17. *Conway J.H., Sloane N.J.A.* Sphere Packings, Lattices and Groups. – N.-Y: Springer-Verlag, 1999.

18. Бондарева Т.П. Компьютерное моделирование структуры случайной упаковки систем сферических частиц // Научные ведомости БелГУ. – 2013. – № 1(144). – С. 78-85.
19. Бондарев В.Г., Мигаль Л.В. Имитационное моделирование структуры плотноупакованных систем твердых дисков // Научные ведомости БелГУ. – 2008. – № 9(49). – С. 248-260.
20. Дик И.Г., Дьяченко Е.Н., Миньков Л.Л. Моделирование случайной упаковки шаров // Физическая мезомеханика. – 2006. – № 4(9). – С. 63-69.
21. Верхотуров М.А и др. Упаковка сложных трехмерных объектов в прямоугольный контейнер на базе дискретно-логического представления информации // Известия Самарского научного центра РАН. – 2014. – № 4-2. – С. 378-383.
22. Чеканин В.А., Чеканин А.В. Прикладное программное обеспечение для решения задач ортогональной упаковки объектов // Объектные системы. – 2016. – №13. – С. 10-15.
23. Урусов В.С. Компьютер помогает предвидеть структуру и свойства кристаллов // Вестник РАН. – 1997. – Т. 67, №2. – С. 113-117.
24. Viazovska M. The sphere packing problem in dimension 8 // Annals of Mathematics. – 2017. – №185 (3). – P. 991-1015.
25. Cohn H., Kumar A., Miller S.D., Radchenko D. The sphere packing problem in dimension 24 // Annals of mathematics. – 2017. – №185(3). – P. 1017-1033.
26. Hales T.C. A proof of the Kepler conjecture // Annals of Mathematics. – 2005. – №162(3). – P. 1065–1185.
27. Hales T.C., Ferguson S.P. A formulation of the Kepler conjecture // Discrete & Computational Geometry. – 2006. – №36(1). – P. 21–69.
28. Hales T.C. Dense Sphere Packings: A Blueprint for Formal Proofs. – Cambridge: University Press, 2012.
29. Стюарт И. Величайшие математические задачи. – М.: Альпина нон-фикшн, 2015.
30. Урусов В.С. Теоретическая кристаллохимия. – М.: Изд-во МГУ, 1987.
31. Белов Н.В. Структура ионных кристаллов и металлических фаз. – Изд-во АН СССР, 1941.
32. Егоров-Тисменко Ю.К. Кристаллография и кристаллохимия. – М.: КДУ, 2005.
33. Подольская Е.А., Кривцов А.М. Описание геометрии кристаллов с гексагональной плотноупакованной структурой на основе парных потенциалов взаимодействия // Физика твердого тела. – 2012. – Т. 54. – Вып. 7. – С. 1327–1334.
34. Уманский Я.С., Скаков Ю.А., Иванов А.Н., Расторгуев Л.Н. Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия. – М.: Металлургия, 1982.
35. Ladd M., Palmer R. Structure determination by X-ray crystallography: analysis by X-rays and Neutrons. – New York: Springer, 2013.
36. Симонов В.И. Рентгеновский структурный анализ // БСЭ. – Изд. 3-е. – М.: Советская энциклопедия, 1975. – Т. 22. – С. 23–27.
37. Зуев В.В., Поцелуева Л.Н., Гончаров Ю.Д. Кристаллоэнергетика как основа оценки свойств твердотельных материалов. – СПб., 2006.
38. Зуев В.В. Основно-электронная кристаллохимия и свойства минералов. – СПб.: Наука, 2009.
39. Богданов О.С., Зуев В.В. О кристаллохимической оценке магнитных, электрических и гравитационных свойств минералов // Обогащение руд. – 1991. – № 6. – С. 12–16.
40. Maija J, Coplen T.B., Berglund M, et al. Atomic weights of the elements 2013. IUPAC

Technical Report // Pure Appl. Chem. – 2016. – №88(3). – P. 265-291.

41. *Meija J, Prohaska T, Irrgeher J.* Standard Atomic Weights of 14 Chemical Elements Revised // Chemistry International. – 2018. – №40(4) – P. 23-24.
42. *Maija J.* Standard atomic weight of Hafnium revised // IUPAC Announcements. – <https://iupac.org/standard-atomic-weight-of-hafnium-revised/> (Дата обращения 11.08.2021).
43. *Kemsley J.* Ytterbium gets a new atomic weight. Periodic Table: IUPAC lowers the element's vital stat // Chem. Eng. News. – 2015. – № 93(37).
44. *CRC Handbook of chemistry and physics.* – London: CRC Press, 2017.
45. *Martienssen W., Warlimont H.* Springer handbook of condensed Matter and Materials Data. – Berlin, Heidelberg: Springer, 2005.
46. *Wyckoff R.W.G.* Crystal Structures. – New York: Interscience Publishers, 1963.
47. *Брэгг У.Л., Кларингбулл Г.Ф.* Кристаллическая структура минералов. – М.: Мир, 1967.
48. *Еремин И.Е., Сычев М.С.* Модифицированный алгоритм расчета постоянной Маделунга // Информатика и системы управления. – 2010. – № 3(25). – С. 27-34.
49. *Еремин И.Е., Сычев М.С.* Моделирование постоянной Маделунга кристаллов кубической сингонии. I // Вестник Тихоокеанского государственного университета. – 2012. – № 1(24). – С. 43-50.
50. *Еремин И.Е., Еремина В.В., Сычев М.С., Моисеенко В.Г.* Эффективные коэффициенты компактности двухкомпонентных кубических кристаллов // Доклады Академии наук. – 2015. – Т. 461. – № 6. – С. 650-652.
51. *Еремин И.Е., Еремина В.В., Костюков Н.С., Оверчук В.А.* Элементы параметрического синтеза линейной модели процесса упругой электронной поляризации // Информатика и системы управления. – 2003. – № 1(5). – С. 26-32.
52. *Еремина В.В.* Сравнительный анализ моментов инерции свободной и закрепленной молекулы воды // Информатика и системы управления. – 2009. – № 1(19). – С. 46-54.
53. *Жилиндина О.В., Еремин И.Е.* Моделирование упругой электронной поляризации кордьеритовой керамики Л-24 // Стекло и керамика. – 2012. – № 7. – С. 30-32.

Статья представлена к публикации членом редколлегии И.Е. Ереминым.

E-mail:

Фомин Денис Васильевич – gefest-uni@yandex.ru.