

<https://doi.org/10.52676/1729-7885-2024-1-24-33>

УДК 538.94

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ И УПРУГИХ СВОЙСТВ КРИСТАЛЛА $Y_3Al_5O_{12}$

Г. М. Баубекова^{1*}, А. Ахмедов¹, Ф. У. Абуова¹, Р. Н. Асылбаев²,
А. У. Абуова¹, Г. П. Турсумбаева¹, Г. Д. Кабдрахимова¹

¹ Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

² Павлодарский педагогический университет имени Э. Марғұлан, Павлодар, Казахстан

*E-mail для контактов: guldar_87@mail.ru

В данной научной работе было проведено комплексное исследование иттрий-алюминиевого граната с применением методов компьютерного моделирования. Проанализированы упругие свойства, а также детально исследованы кристаллические и зонные структуры. При помощи современных вычислительных методов проведено детальное изучение механических параметров материала, таких как модуль упругости и коэффициент Пуассона. Методы виртуального моделирования позволяют детально изучить механические характеристики материала. Основное внимание уделяется созданию и верификации компьютерных моделей, точно отражающих упругие свойства кристалла. Были проведены сравнения значений параметров, получаемых при использовании различных гибридных функционалов, с экспериментальными данными. Виртуальные модели позволили не только детально изучить механические характеристики материала, но и предоставили результаты, существенно близкие к реальным экспериментальным данным. Сравнения проводились по следующим параметрам: параметры ячейки, энергия запрещенной зоны, эффективные заряды атомов кристалла, уравнения состояния и упругие свойства. Так же определены уровни погрешности относительно экспериментальных данных. Представлены результаты анализа кристаллической структуры иттрий-алюминиевого граната, полученные с применением различных обменно-корреляционных гибридных функционалов, таких как B3PW, B3LYP, HSE06, PBE. Этот аспект исследования включает в себя анализ параметров кристаллической решетки, распределение атомов в кристалле и зонную структуру, что важно для полного понимания свойств материала.

Ключевые слова: иттрий-алюминиевый гранат, теория функционала плотности, запрещенная зона, элементарная ячейка, упругие свойства, моделирование.

ВВЕДЕНИЕ

В последние годы значительно возрос интерес к исследованию и применению монокристаллов $Y_3Al_5O_{12}$ (YAG) благодаря их уникальным физическим и химическим свойствам. Эти материалы находят широкое применение в различных областях, включая оптоэлектронику, лазерные системы и твердотельную электронику, благодаря их высокой термической стабильности, механической прочности и оптическим характеристикам. Важным аспектом развития технологий, основанных на YAG, является глубокое понимание их электронной, кристаллической структуры и механических свойств, что также возможно благодаря применению современных квантово-химических методов.

Иттрий-алюминиевый гранат ($Y_3Al_5O_{12}$) – синтетический кристаллический материал, имеющий кубическую кристаллическую решетку 230-й кристаллографической группы, обозначаемую символом Ia3d. Благодаря широкой оптической прозрачности [1], низкому внутреннему напряжению, высокой твердости и термостойкости, YAG используется в УФ и ИК оптике. Кристалл YAG, аналогично гранату и сапфиру, не имеет применения в качестве лазерной среды в чистом виде. Тем не менее, после легирования соответствующими примесями, YAG часто используется в качестве основного материала в различных твердотельных лазерах [2].

Монокристаллы YAG активно исследуются с применением различных теоретических подходов для моделирования и анализа их свойств на атомном уровне [3–5]. Среди наиболее перспективных и широко применяемых методов выделяются квантово-химические расчеты, позволяющие с высокой точностью предсказывать электронную структуру и характеристики взаимодействия между атомами в кристалле. В частности, в данной работе акцентируется внимание на использовании различных функционалов плотности, таких как B3PW, B3LYP, HSE06 и PBE, которые демонстрируют свою эффективность в моделировании комплексных систем, подобных YAG.

Цель данной статьи состоит в том, чтобы оценить влияние применения разнообразных функционалов на точность предсказаний электронных, кристаллических структур и механических свойств монокристаллов $Y_3Al_5O_{12}$. Исследование стремится не только углубить понимание фундаментальных свойств YAG, но и обеспечить ценные указания для дальнейшего развития материаловедения и технологий, основанных на этих материалах. Приводимые в работе результаты могут стать основой для оптимизации процессов синтеза и обработки YAG, способствуя улучшению их характеристик для конкретных приложений.

1. МЕТОДЫ

Все расчеты были проведены посредством компьютерного моделирования в программе CRYSTAL17. В этой работе был использован расчет типа ограниченной закрытой оболочки (RCS) с гамильтонианами Кона-Шэма. Расчеты проводились при помощи следующих гибридных функционалов: обменно-корреляционный функционал Пердью-Вонга B3PW; обменно-корреляционный функционал Ли-Янга-Перра B3LYP; обменно-корреляционный функционал Хэйда-Скусерия-Эрзенхофа, основанный на обменно-корреляционном функционале Пердью-Бюрка-Эрзенхофа разработанный для твердых тел (PBE); обменно-корреляционный функционал Хэйда-Скусерия-Эрзенхофа (HSE06), основанный на обменно-корреляционном функционале Пердью-Бюрка-Эрзенхофа. Отличие от функционала Пердью-Бюрка-Эрзенхофа в том, что по отношению к этому функционалу применили экранированный кулоновский потенциал только к обменному взаимодействию, чтобы экранировать дальнюю действующую часть обмена Хартри-Фока. В качестве базисов для кристалла были выбраны согласованные гауссовы базисные наборы двойной и тройной зета-валентности с поляризационным качеством пятого периода для твердотельных расчетов Лауна-Оливейра-Брэдоу и Пейтингера-Оливейра-Брэдоу [6, 7]. В первых двух функционалах процент обмена Фока в гибридном обмене составляет 20%, в то время как в последних двух 25%. Для расчета кулоновских и обменных интегралов выбраны точности (допуски) 10^{-6} , 10^{-6} , 10^{-6} , 10^{-6} , 10^{-12} . Для расчетов по данному кристаллу были выбраны k -точки 2×2 .

Для большей точности проводились полные оптимизации систем, что позволило нам получить низкую погрешность. В следующем разделе мы провели анализ кристаллической структуры и зависимость параметров кристалла от используемых гибридных методов. В третьем и четвертом разделе были приведены результаты исследования уравнений состояний и упругих свойств, соответственно.

2. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Кристаллическая структура

Объектом исследования является кубический синтетический кристалл иттрий-алюминиевого граната ($\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$), кристаллографическая группа кристалла которого $\text{Ia}\bar{3}\text{d}$, под номером 230. Параметры кристаллической решетки: $a = b = c = 12,008 \text{ \AA}$.

Элементарная ячейка иттрий-алюминиевого граната содержит 8 атомов алюминия, расположенных в октаэдрических позициях, и 12 атомов алюминия, расположенных в тетраэдрической позиции, а также 12 атомов иттрия и 48 атомов кислорода. Y занимает додекаэдрические позиции, тогда как для ионов Al имеются две разные позиции – октаэдрическая и тетраэдрическая. Атомы O расположены в общих положениях.

Функционал B3PW имеет наименьшую погрешность, энергии запрещенной зоны, относительно экспериментальных данных. Что касается параметров ячейки, то погрешность у этого функционала равна 0,27%. Параметры ячейки кристалла, рассчитанные функционалом HSE06, имеют наименьшую погрешность 0,1%. На рисунке 1 приведены графики плотности состояний кристалла при разных функционалах.

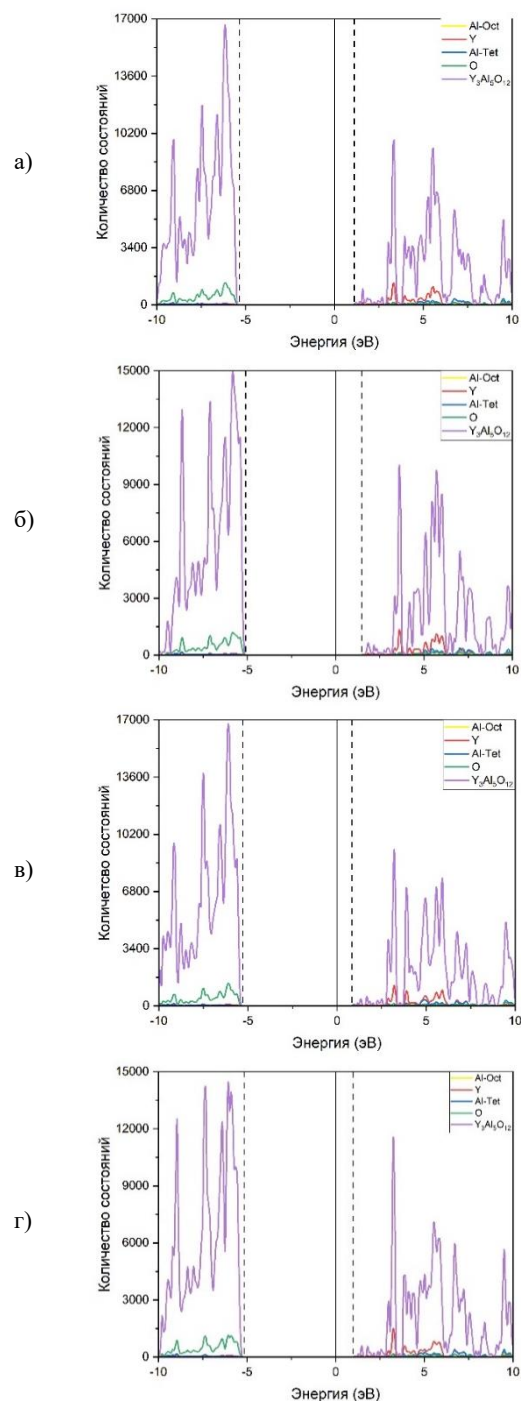


Рисунок 1. Плотность состояний кристалла YAG, рассчитанная с применением функционалов: B3PW (а), B3LYP (б), PBE (в) и HSE06 (г)

Таблица 1. Сравнение геометрических и электронных свойств с применением различных функционалов

Параметры		Полученные данные				Экспериментальные и теоретические данные
		Функционалы				
		B3PW	B3LYP	PBE	HSE06	
Параметры ячейки	a, Å (погрешность)	12,04 (0,27%)	12,1 (0,76%)	11,94 (0,57%)	12,02 (0,1%)	12,008 [8]
Энергия запрещенной зоны, эВ (погрешность)		6,6 (1,54%)	6,63 (2%)	6,24 (4%)	6,33 (2,61%)	6,5 [8]
Эффективные заряды Q(e) атомов	Al _{oct}	1,87	1,916	1,858	1,879	1,843 [9]
	Al _{tet}	1,99	2,014	1,975	1,996	2,036 [9]
	Y	1,806	1,856	1,781	1,835	2,033 [9]
	O	6,739	6,713	6,751	6,729	6,676 [9]

Таблица 2. Значения объемного модуля при различных функционалах

Функционал	Уравнение состояния	Объем, Å ³	Энергия, эВ	Объемный модуль, ГПа (погрешность)	Объемный модуль, экспериментальные данные, ГПа [9]
HSE06	Мурнаган	868,2679	-242779,81	187,19 (1,07%)	185,2
	Берч-Мурнаган	868,2580	-242779,811	187,61 (0,73%)	189
	4-й полином	868,2373	-242779,812	187,86 (17,82%)	228,6
PBE	Мурнаган	851,6936	-242362,177	195,94 (5,8%)	185,2
	Берч-Мурнаган	851,6834	-242362,178	196,37(3,9%)	189
	4-й полином	851,6674	-242362,178	196,65 (13,98%)	228,6
V3PW	Мурнаган	873,1539	-242896,519	183,59 (0,87%)	185,2
	Берч-Мурнаган	873,1425	-242896,52	183,99 (2,65%)	189
	4-й полином	873,1288	-242896,52	184,24 (19,4%)	228,6
V3LYP	Мурнаган	887,8182	-242878,0104	178,56 (3,58%)	185,2
	Берч-Мурнаган	887,8064	-242878,0109	178,95 (5,32%)	189
	4-й полином	887,7886	-242878,0112	179,10 (21,65%)	228,6

Как можно заметить из этих графиков и таблицы 1, значение ширины запрещенной зоны, наиболее близкое к экспериментальным данным, имеет функционал V3PW. При моделировании небольшим изменениям подверглось значение параметра решетки. Наиболее близким, к экспериментальным данным, результат показал функционал HSE06 с погрешностью в 0,1%. Можно отметить, что все четыре гибридных функционала в сочетании с базисными наборами, предложенные в [6, 7], показывают вполне точные результаты.

Уравнение состояния

Был проведен анализ уравнений состояний для каждого гибридного функционала. Сравнивались полученные результаты моделирования с экспериментальными данными. Сравнения проводились по трём методам расчета уравнения состояния. Результаты приведены в таблице 2.

Как видно из таблицы 2, при расчете с функционалом HSE06 во всех трёх методах расчета объем был примерно равен 868 Å³. Расчет объемного модуля по методу Берча-Мурнагана дает наиболее точные результаты (187,61 ГПа), погрешность практически равна нулю. Это позволяет нам лучше понять меха-

нические свойства кристалла при изменении различных условий, такие как давление, объем и температура.

Расчеты также проводились с помощью функционала PBE, который является разновидностью функционала HSE06 для твердых тел. Несмотря на то, что данный функционал предназначен именно для твердых материалов, он показывает не лучшие результаты относительно HSE06. Самая наименьшая погрешность равна 3,9%. Но при этом, расчет уравнения полинома четвертого порядка самый точный из всех используемых гибридных функционалов, погрешность равна 13,98%.

V3PW включает параметры, предложенные Бекке, Ли, Янгом и Парра, что делает его гибридным и обеспечивает баланс между точным описанием обмена и корреляции. Учет корреляционных эффектов позволяет получать более реалистичные предсказания упругих свойств материала. Этот функционал показывает лучший результат при расчете уравнения состояния методом Мурнагана. Уравнение состояния Мурнагана является одним из простых модельных уравнений, позволяющих описать объемные свойства твердых тел при высоких давлениях.

Функционал B3LYP показал наименее точные результаты относительно всех трех методов уравнения состояния среди всех функционалов. B3LYP является гибридным функционалом, что означает, что он комбинирует локальное приближение с точными методами. Он широко используется для расчетов молекул и систем с переходными металлами. Несмотря на то, что иттрий (Y) принадлежит к блоку d-элементов в периодической системе, он расположен в самом начале блока и его электронная конфигурация не включает неполную d-подоболочку и он не является переходным металлом. Это могло сказаться на точности расчетов.

Сравнив результаты во всех четырех функционалах, было определено, что объемный модуль, рассчитанный функционалом HSE06, имеет наименьшую погрешность. Этот функционал был разработан для более точного описания электронной корреляции и обмена в материалах, особенно в твердых телах и полупроводниках, что подтверждается в этой главе. Такие точные результаты помогают лучше понять упругие свойства материала, в данном случае, его объемное сжатие. Это важно для оптимизации использования материала в различных условиях. Уравнение состояния определяет зависимость между различными параметрами материала, такими как давление, объем, температура, их изменения и другие свойства

Упругие свойства $Y_3Al_5O_{12}$

Также были изучены упругие свойства кристалла YAG с использованием вышеупомянутых гибридных функционалов.

Таблица 3. Упругие тензорные константы разных функционалов

C _{ij} , 10 ⁹ Па (погрешность)				
HSE06	PBE	B3PW	B3LYP	Экспериментальные данные [10]
C ₁₁ =338,5 (1,6%)	C ₁₁ =352,7 (5,85%)	C ₁₁ =332,4 (0,24%)	C ₁₁ =324,6 (2,58%)	C ₁₁ =333,2
C ₁₂ =112,6 (1,72%)	C ₁₂ =118,5 (7%)	C ₁₂ =109,8 (0,8%)	C ₁₂ =105,8 (4,4%)	C ₁₂ =110,7
C ₄₄ =115,6 (0,5%)	C ₄₄ =117,1 (1,8%)	C ₄₄ =114,4 (0,5%)	C ₄₄ =114,8 (0,17%)	C ₄₄ =115

Из таблицы 3 видно, что все четыре функционала показывают вполне неплохие результаты, максимальная погрешность равна 5,85%. Было определено, что упругие тензорные константы, рассчитанные функционалом B3PW, имеют наименьшую погрешность.

В таблице 4 приведены модули упругости для разных функционалов.

Таблица 4. Модули упругости с применением разных функционалов

	HSE06	PBE	B3PW	B3LYP	Экспериментальные данные [11]
K _V , 10 ⁹ Па	187,89	196,56	184,01	178,75	187
K _R , 10 ⁹ Па	187,89	196,56	184,01	178,75	
K _H , 10 ⁹ Па	187,89	196,56	184,01	178,75	
E _V , 10 ⁹ Па	285,61	293,01	281,72	279,22	280
E _R , 10 ⁹ Па	285,58	293,01	281,68	279,09	
E _H , 10 ⁹ Па	285,6	293,01	281,7	279,15	
G _V , 10 ⁹ Па	114,55	117,06	113,15	112,62	112
G _R , 10 ⁹ Па	114,54	117,06	113,13	112,56	
G _H , 10 ⁹ Па	114,54	117,06	113,14	112,59	
ν _V	0,24666	0,25155	0,24484	0,23965	0,25
ν _R	0,24668	0,25155	0,24488	0,23977	
ν _H	0,24667	0,25155	0,24486	0,23971	

K, E, G – объемный модуль упругости, модуль Юнга и модуль сдвига, соответственно. ν – касательный модуль объемной упругости (коэффициент Пуассона). Индексы V, R, H – обозначают схемы усреднения Фогта, Ройса и Хилла, соответственно. Методы усреднения Фойгта-Рейсса-Хилла обеспечивают простой способ оценки упругих констант текстурованного поликристалла с точки зрения его кристаллографической текстуры и упругих констант составляющих кристаллитов.

В таблице 5 рассмотрены собственные значения матрицы жесткости для каждого функционала.

Таблица 5. Собственные значения матрицы жесткости

Функционал	λ ₁ , ГПа	λ ₂ , ГПа	λ ₃ , ГПа	λ ₄ , ГПа	λ ₅ , ГПа	λ ₆ , ГПа
HSE06	115,6	115,6	115,6	225,94	225,94	563,68
PBE	117,05	117,05	117,05	234,15	234,15	589,67
B3PW	114,4	114,4	114,4	222,58	222,58	552,04
B3LYP	114,78	114,78	114,78	218,75	218,75	218,75

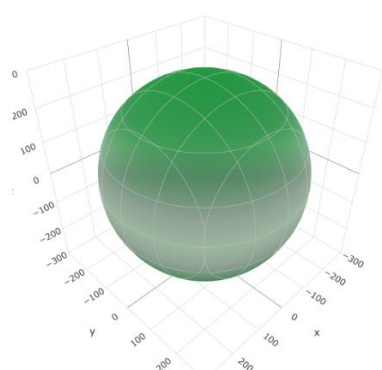
Собственные значения и векторы позволяют понять, как материал реагирует на воздействие механических сил и в каких направлениях происходит деформация под воздействием напряжения.

Из таблицы 5 можно заметить, что иттрий-алюминиевый гранат имеет одинаковые собственные значения по всем трем осям (λ₁, λ₂, λ₃). Это указывает на изотропию в отношении продольных направлений, что характерно для кубической симметрии. Значения λ₄ и λ₅ равны, что также свойственно кристаллам кубической симметрии.

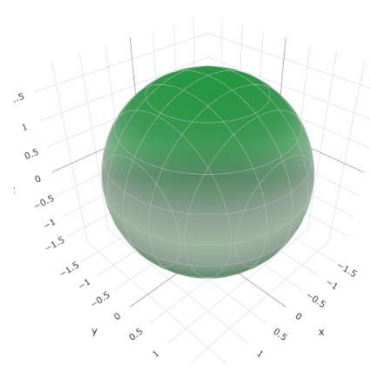
Примитивная ячейка с функционалом HSE06

Таблица 6. Модули упругости

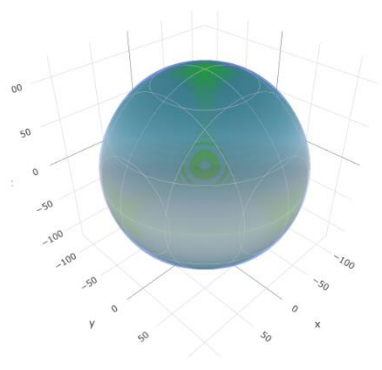
	Модуль Юнга		Линейная сжимаемость		Модуль сдвига		Коэффициент Пуассона	
	E_{min}	E_{max}	β_{min}	β_{max}	G_{min}	G_{max}	ν_{min}	ν_{max}
Значение	282,33 ГПа	287,79 ГПа	1,7741 ТПа ⁻¹	1,7741 ТПа ⁻¹	112,97 ГПа	115,6 ГПа	0,23874	0,25316
Анизотропия	1,019		1,0000		1,023		1,0604	
Ось	0,0000	0,5774	0,0000	0,8660	0,7071	0,0000	0,7071	0,7071
	0,0000	0,5774	0,0000	0,0000	-0,0003	0,0000	-0,0002	-0,0005
	1,0000	0,5773	1,0000	0,5000	0,7071	1,0000	0,7071	0,7072
Вторая ось					0,7071	1,0000	0,0000	0,0003
					-0,0005	0,0000	-1,0000	1,0000
					-0,7071	-0,0000	0,0000	0,0003



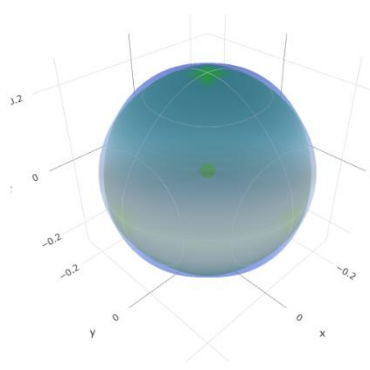
а)



б)



в)



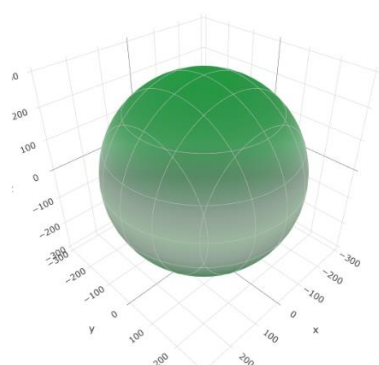
г)

Рисунок 2. 3D визуализация: модуля Юнга (а), линейной сжимаемости (б), модуля сдвига (в) и коэффициента Пуассона (г)

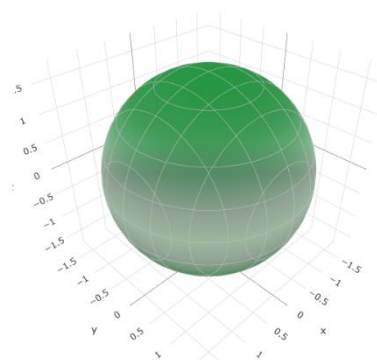
Примитивная ячейка с функционалом PBE

Таблица 7. Модули упругости

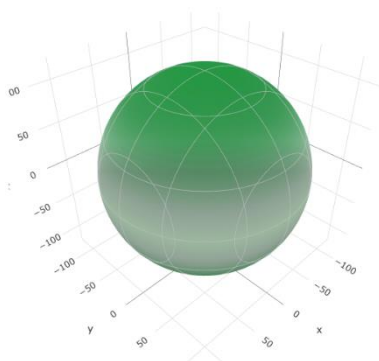
	Модуль Юнга		Линейная сжимаемость		Модуль сдвига		Коэффициент Пуассона	
	E_{min}	E_{max}	β_{min}	β_{max}	G_{min}	G_{max}	ν_{min}	ν_{max}
Значение	292,99 ГПа	293,04 ГПа	1,6959 ТПа ⁻¹	1,6959 ТПа ⁻¹	117,05 ГПа	117,07 ГПа	0,25149	0,25163
Анизотропия	1		1,0000		1		1,0006	
Ось	0,5774	0,0000	0,1206	0,9239	0,0000	0,7071	-0,7071	0,7071
	0,5774	0,0000	0,9160	0,0000	0,0000	0,0001	0,0000	-0,0002
	0,5773	1,0000	-0,3827	0,3827	1,0000	-0,7071	0,7071	0,7071
Вторая ось					-0,9397	-0,7071	0,0000	0,7071
					0,3420	-0,0002	-1,0000	-0,0006
					-0,0000	-0,7071	0,0000	-0,7071



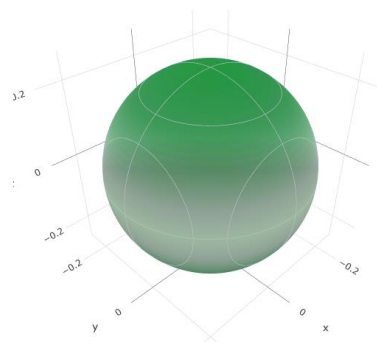
а)



б)



в)



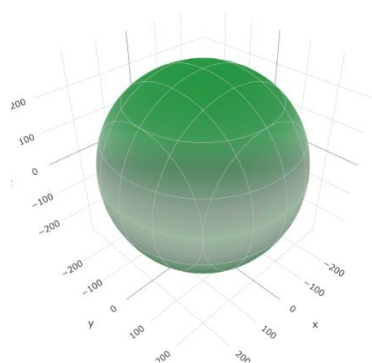
г)

Рисунок 3. 3D визуализация: модуля Юнга (а), линейной сжимаемости (б), модуля сдвига (в) и коэффициента Пуассона (г)

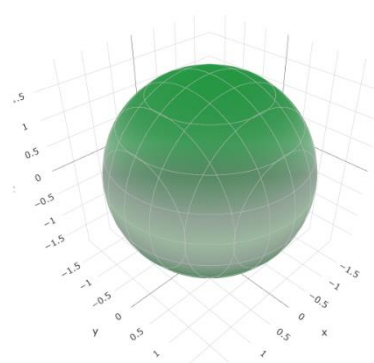
Примитивная ячейка с функционалом V3PW

Таблица 8. Модули упругости

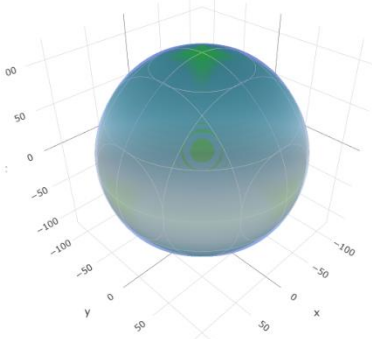
	Модуль Юнга		Линейная сжимаемость		Модуль сдвига		Коэффициент Пуассона	
	E_{min}	E_{max}	β_{min}	β_{max}	G_{min}	G_{max}	ν_{min}	ν_{max}
Значение	277,85 ГПа	284,29 ГПа	1,8115 ТПа ⁻¹	1,8115 ТПа ⁻¹	111,29 ГПа	114,4 ГПа	0,23537	0,25263
Анизотропия	1,023		1,0000		1,028		1,0734	
Ось	0,0000	0,5774	0,7934	0,0000	0,7071	0,0000	0,7071	0,7071
	0,0000	0,5774	0,0000	0,0000	-0,0003	0,0000	-0,0002	-0,0004
	1,0000	0,5773	0,6088	1,0000	0,7071	1,0000	0,7071	-0,7071
Вторая ось					0,7071	1,0000	0,7071	0,0003
					-0,0005	0,0002	-0,0006	1,0000
					-0,7071	-0,0000	-0,7071	-0,0003



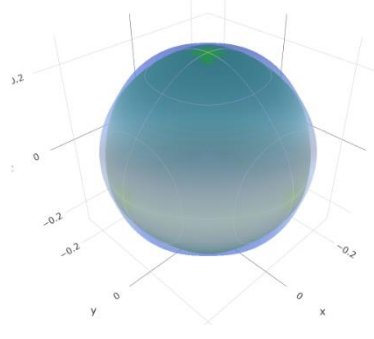
а)



б)



в)



г)

Рисунок 4. 3D визуализация: модуля Юнга (а), линейной сжимаемости (б), модуля сдвига (в) и коэффициента Пуассона (г)

Примитивная ячейка с функционалом V3LYP

Таблица 9. Модули упругости

	Модуль Юнга		Линейная сжимаемость		Модуль сдвига		Коэффициент Пуассона	
	E_{min}	E_{max}	β_{min}	β_{max}	G_{min}	G_{max}	ν_{min}	ν_{max}
Значение	272,54 ГПа	283,63 ГПа	1,8648 ТПа ⁻¹	1,8648 ТПа ⁻¹	109,38 ГПа	114,78 ГПа	0,22309	0,25331
Анизотропия	1,041		1,0000		1,049		1,1355	
Ось	0,0000	0,5774	0,0000	0,0000	0,7071	0,0000	0,7071	0,7071
	0,0000	0,5774	0,0000	0,0000	-0,0003	0,0000	-0,0002	-0,0005
	1,0000	0,5773	1,0000	1,0000	0,7071	1,0000	0,7071	0,7072
Вторая ось					0,7071	-0,1736	0,7071	0,0003
					-0,0005	0,9848	-0,0006	1,0000
					-0,7071	-0,0000	-0,7071	0,0003

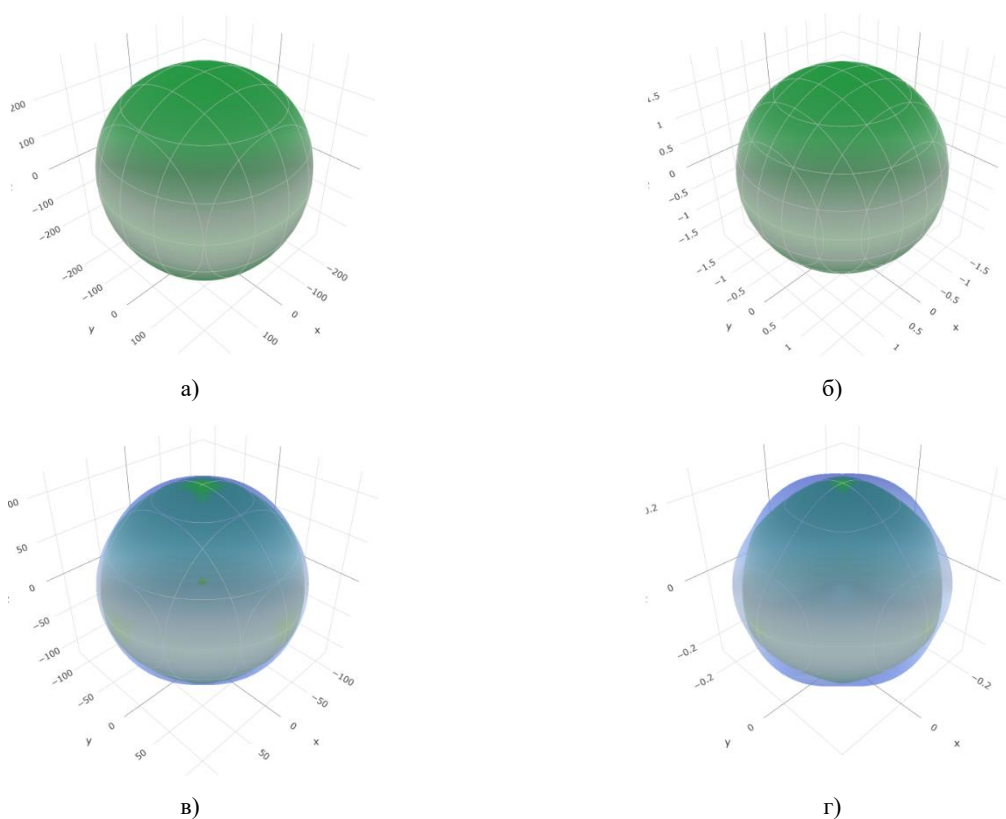


Рисунок 5. 3D визуализация: модуля Юнга (а), линейной сжимаемости (б), модуля сдвига (в) и коэффициента Пуассона (г)

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

По результатам работы были определено, что два гибридных обменно-корреляционных функционала V3PW и HSE06 показывают очень точные результаты способные дать возможность для дальнейшего более глубокого изучения механических свойств кристалла при изменениях условий системы. Погрешности при расчетах очень низкие (0,1%). Это позволяет нам получить точные и контролируемые данные о механических свойствах иттрий-алюминиевого граната, что особенно важно для такой сложной структуры как кристалл $Y_3Al_5O_{12}$. Изучение механизмов деформации кристалла показало, что кристалл иттрий-алюми-

нивого граната, являясь кубическим кристаллом, деформируется равномерно по всем осям, на что указывают собственные значения матрицы жесткости и упругие тензорные константы.

Благодарности

Данное исследование финансировалось Комитетом науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (грант № AP19574768 «Экспериментальное и теоретическое исследование радиационной стойкости функциональных керамических и кристаллических материалов для космических применений и ядерной энергетики»).

ЛИТЕРАТУРА / REFERENCES

1. Franta D., Mureşan M. G. Wide spectral range optical characterization of yttrium aluminum garnet (YAG) single crystal by the universal dispersion model // Optical Materials Express. – 2021. – Vol. 11. – No. 12. – P. 3930–3945.
2. Kalisky Y. Hosts for Solid-State Luminescent Systems // Wide-Gap Luminescent Materials: Theory and Applications. – Boston, MA : Springer US, 2013. – P. 1–11.
3. Huang Z., Feng J., Pan W. Elastic properties of YAG: First-principles calculation and experimental investigation // Solid state sciences. – 2012. – Vol. 14. – No. 9. – P. 1327–1332.
4. Chen J. et al. Ab initio study of a charged vacancy in yttrium aluminum garnet ($Y_3Al_5O_{12}$) // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2008. – Vol. 20. – No. 32. – P. 325212.
5. Xu Y. N., Ching W. Y. Electronic structure of yttrium aluminum garnet ($Y_3Al_5O_{12}$) // Physical Review B. – 1999. – Vol. 59. – No. 16. – P. 10530.
6. Laun J., Vilela Oliveira D., Bredow T. Consistent gaussian basis sets of double-and triple-zeta valence with polarization quality of the fifth period for solid-state calculations // Journal of Computational Chemistry. – 2018. – Vol. 39. – No. 19. – P. 1285–1290.
7. Peintinger M. F., Oliveira D. V., Bredow T. Consistent Gaussian basis sets of triple-zeta valence with polarization quality for solid-state calculations // Journal of Computational Chemistry. – 2013. – Vol. 34. – No. 6. – P. 451–459.
8. Tropsch W. J. Yttrium Aluminum Garnet ($Y_3Al_5O_{12}$) // Handbook of Optical Constants of Solids. – Academic Press, 1997. – P. 963–986.
9. Xu Y. N., Ching W. Y. Electronic structure of yttrium aluminum garnet ($Y_3Al_5O_{12}$) // Physical Review B. – 1999. – Vol. 59. – No. 16. – P. 10530.
10. Spencer E. G. et al. Microwave elastic properties of nonmagnetic garnets // Journal of Applied Physics. – 1963. – Vol. 34. – No. 10. – P. 3059–3060.
11. Kitaeva V. F., Zharikov E. V., Chisty I. L. The properties of crystals with garnet structure // Physica status solidi (a). – 1985. – Vol. 92. – No. 2. – P. 475–488.

 $Y_3Al_5O_{15}$ КРИСТАЛЫНЫҢ ЭЛЕКТРОНДЫ ЖӘНЕ СЕРПІМДІ ҚАСИЕТТЕРІН МОДЕЛЬДЕУ

**Г. М. Баяубекова^{1*}, А. Ахмедов¹, Ф. У. Абуова¹, Р. Н. Асылбаев²,
А. У. Абуова¹, Г. П. Тұрсынбаева¹, Г. Д. Кабдрахимова¹**

¹ Л. Н. Гумилев атындағы Еуразия Ұлттық Университеті, Астана, Қазақстан

² А. Марғұлан атындағы Павлодар педагогикалық университеті, Павлодар, Қазақстан

*Байланыс үшін E-mail: guldar_87@mail.ru

Бұл ғылыми жұмыста біз компьютерлік модельдеу әдістерін қолдана отырып, иттрий-алюминий гранатына кешенді зерттеу жүргіздік. Біздің жұмысымыз серпімді қасиеттерді дәл талдауға, күй теңдеулерін жасауға және кристалдық және аймақтық құрылымдарды зерттеуге бағытталған. Біз заманауи есептеу әдістерін қолдана отырып, серпімділік модулі және Пуассон коэффициенті сияқты материалдың механикалық параметрлерін егжей-тегжейлі зерттедік. Виртуалды модельдеу әдістері материалдың механикалық сипаттамаларын зерттеуге мүмкіндік береді. Негізгі назар кристалдың серпімді қасиеттерін дәл көрсететін компьютерлік модельдерді құруға және тексеруге бағытталған. Эксперименттік мәліметтерге қатысты әртүрлі гибриді функционалдарды пайдалану кезінде алынған мәндерді салыстыру жүргізілді. Виртуалды модельдер материалдың механикалық сипаттамаларын жан-жақты зерттеуге ғана емес, сонымен қатар нақты эксперименттік мәліметтерге айтарлықтай жақын нәтижелер берді. Салыстырулар келесі параметрлер бойынша жүргізілді: ұяшық параметрлері, тыйым салынған аймақ энергиясы, кристалл атомдарының тиімді зарядтары, күй теңдеулері және серпімділік параметрлері. Сонымен қатар, эксперименттік мәліметтерге қатысты қателік деңгейлері анықталды. Біз V3PW, V3LYP, HSE06, PBE сияқты әртүрлі алмасу-корреляциялық гибриді функционалдарды қолдану арқылы қол жеткізілген иттрий-алюминий гранатының кристалды құрылымын талдау нәтижелерін ұсынамыз. Зерттеудің бұл аспектісі кристалдық тордың параметрлерін талдауды, кристалдағы атомдардың таралуын және материалдың қасиеттерін толық түсіну үшін маңызды құрылымды қамтиды.

Түйін сөздер: иттрий-алюминий гранаты, тығыздықтың функционалдық теориясы, тыйым салынған аймақ, элементар ұяшық, серпімділік қасиеттері, модельдеу.

MODELING OF THE ELECTRONIC AND ELASTIC PROPERTIES OF THE $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{15}$ CRYSTAL

**G. M. Baubekova^{1*}, A. Akhmedov¹, F. U. Abuova¹, R. N. Assylbayev²,
A. U. Abuova¹, G. P. Tursumbayeva¹, G. D. Kabdrakhimova¹**

¹ *L. N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan*

² *A. Margulan Pavlodar Pedagogical University, Pavlodar, Kazakhstan*

**E-mail for contacts: guldar_87@mail.ru*

In this scientific work, we conducted a comprehensive study of yttrium aluminum garnet using computer modeling methods. Our efforts are focused on the precise analysis of elastic properties, the development of equations of state, as well as a detailed study of crystal and band structures. We conducted a detailed study of the mechanical parameters of the material, such as the modulus of elasticity and the Poisson's ratio, using modern computational methods. Virtual modeling methods allow us to study in detail the mechanical characteristics of the material. The main focus is on the creation and verification of computer models that accurately reflect the elastic properties of the crystal. The values obtained using various hybrid functionals were compared with experimental data. Virtual models allowed not only to study in detail the mechanical characteristics of the material, but also provided results that are significantly close to real experimental data. Comparisons were carried out according to the following parameters: cell parameters, band gap energy, effective charges of crystal atoms, equations of state and elastic properties. Also, the error levels relative to the experimental data are determined. We present the results of the analysis of the crystal structure of yttrium aluminum garnet achieved using various exchange-correlation hybrid functionals such as B3PW, B3LYP, HSE06, PBE. This aspect of the study includes the analysis of the crystal lattice parameters, the distribution of atoms in the crystal and the band structure, which is important for a complete understanding of the properties of the material.

Keywords: *yttrium-aluminum garnet, density functional theory, band gap, unit cell, elastic properties, modeling.*