

# Атомно-дискретное описание влияния анизотропных межатомных взаимодействий на упругие свойства ГПУ металлов

© М.А. Баранов, Е.А. Дубов, И.В. Дятлова, Е.В. Черных

Алтайский государственный технический университет,  
656038 Барнаул, Россия

E-mail: fap@agtu.secna.ru

(Поступила в Редакцию 7 мая 2003 г.)

Предложен вид анизотропных межатомных потенциалов, обеспечивающих устойчивость и отражающих симметрию гексагональных кристаллических решеток. Определены численные значения параметров потенциальных функций для большинства ГПУ металлов. Получены аналитические выражения для модулей упругости гексагональных кристаллов и с использованием построенных потенциалов рассчитаны их величины. Показано, что предложенная анизотропная модель позволяет достигнуть более адекватного описания упругих свойств ГПУ металлов по сравнению с изотропной моделью. Полученные потенциалы могут быть успешно применены для моделирования дефектов кристаллической решетки.

Работа выполнена при поддержке гранта МО PD 02-1.2-31.

## 1. Введение

В связи с постоянным совершенствованием и развитием транспортной, авиационной космической техники, оборудования заводов и электростанций обостряется проблема создания материалов, обладающих высокой удельной прочностью, способностью противостоять ударным нагрузкам, стойкостью к агрессивным средам, высоким температурам, кавитации. Одновременное сочетание этих свойств возможно только в металлических системах — сплавах. Физико-механические характеристики сплава зависят как от свойств базовых кристаллических решеток фаз, составляющих данный материал, так и от характера распределения и взаимодействия содержащихся в нем дефектов. Количественное описание влияния этих факторов на свойства сплава возможно на основании законов взаимодействия атомов внутри кристалла с использованием методов компьютерного моделирования. Критерием адекватности построенных законов межатомного взаимодействия является соответствие рассчитанных и экспериментальных значений возможно большего количества надежно определяемых характеристик кристалла. К числу таких характеристик относятся модули упругости и энергии образования дефектов.

К настоящему времени построены межатомные потенциалы и выполнено моделирование свойств широкого класса кристаллов с кубической решеткой узлов [1,2]. Гексагональным кристаллам уделяется намного меньше внимания [3], хотя их применение оказывается весьма перспективным. Это обусловлено трудностью построения законов межатомного взаимодействия, отражающих анизотропию ГПУ кристалла. Без учета этой анизотропии проблематичным оказывается описание устойчивости ГПУ решетки при экспериментально наблюдаемых размерах элементарной ячей-

ки и, следовательно, выполнение моделирования дефектов.

Цель данной работы — построение потенциалов межатомного взаимодействия, обеспечивающих устойчивость ГПУ металлов, разработка методики расчета модулей упругости гексагональных кристаллов и выявление границ применимости сферически симметричных межатомных потенциалов к ГПУ металлам. Соответствие расчетных и экспериментальных значений модулей упругости может представлять собой критерий адекватности построенных потенциалов. Построенные межатомные потенциалы для ГПУ металлов предполагается использовать для описания взаимодействий в сплавах, содержащих эти элементы.

## 2. Построение межатомных потенциалов

Пусть внутренняя энергия  $U_0$  кристаллической решетки ГПУ металла в расчете на один атом представляется в виде энергии парных межатомных взаимодействий

$$U_0 = \frac{1}{2} \sum_j \varphi(\mathbf{r}_j), \quad (1)$$

где  $\varphi(\mathbf{r}_j)$  — межатомный потенциал — энергия взаимодействия пары атомов, связанных вектором решетки  $\mathbf{r}_j$ . Суммирование в (1) проводится по всем связям атома, находящегося в „нулевом“ узле решетки. В дальнейшем для сокращения записей будем опускать индекс  $j$  у знака суммы и суммируемых выражений. Устойчивость решетки при экспериментально наблюдаемых размерах элементарной ячейки, значениях энергии сублимаций  $E_s$  и модуле всестороннего сжатия  $B$  достигается, если

выполнены соответствующие условия

$$\begin{aligned}
 U_0(a_0, \eta_0) &= -E_s, \\
 \left. \frac{dU_0}{da} \right|_{a_0, \eta_0} &= 0, \\
 V_0 \left( \left. \frac{d^2 U_0}{dV^2} \right) \right|_{a_0, \eta_0} &= B, \\
 \left. \frac{dU_0}{d\eta} \right|_{a_0, \eta_0} &= 0,
 \end{aligned} \quad (2)$$

где  $\eta = c/a$  — соотношение высоты  $c$  и ребра  $a$  элементарной ячейки;  $a_0, \eta_0$  — соответствующие экспериментальные значения для рассматриваемого металла;  $V_0 = (\sqrt{3}/4)\eta_0 a_0^2$  — атомный объем.

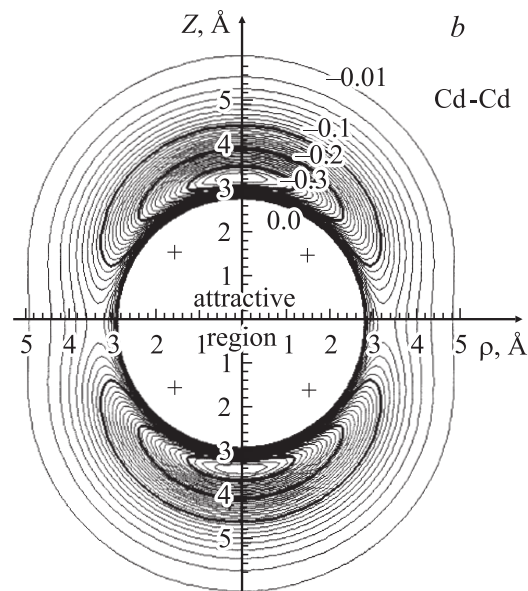
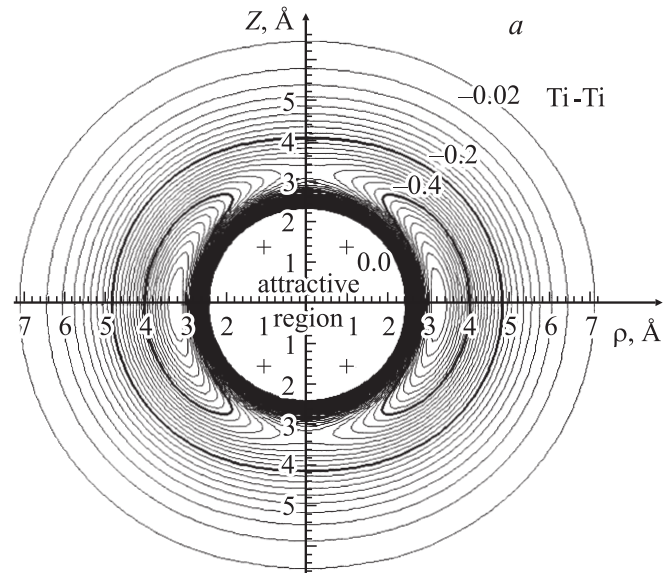
Наиболее простой вид система (2) приобретает, если потенциал  $\varphi$  является изотропным, т.е. зависит только от межатомного расстояния  $r$

$$\begin{aligned}
 \sum \varphi(r) &= -2E_s, \\
 \sum \left( r \frac{d\varphi}{dr} \right) &= 0, \\
 \frac{2\sqrt{3}}{27a_0^3\eta_0} \sum \left( r^2 \frac{d^2\varphi(r)}{dr^2} \right) &= B, \\
 \sum \left( r \frac{d\varphi}{dr} \right) \cdot \left( \frac{1}{r} \frac{dr}{d\eta} \right) &= 0.
 \end{aligned} \quad (3)$$

Производные  $(1/r \cdot dr/d\eta)$  близки к единице на четвертой и седьмой координационных сферах, т.е. для  $\mathbf{r}$ , близких по направлению к главной оси кристалла. Выполнение второго и четвертого условий системы (3) в зависимости от вида потенциала достигается только для вполне определенных  $\eta$ , близких к идеальному значению 1.633, но не обязательно совпадающих с экспериментальными. Построение изотропных межатомных потенциалов для описания ГПУ кристаллов представляет несомненный интерес, поскольку позволяет выявить возможности традиционного метода, провести сравнительный анализ результатов, полученных с учетом и без учета анизотропии межатомных взаимодействий.

Большинство сферически-симметричных функций, аппроксимирующих потенциалы межатомного взаимодействия (Борна, Борна–Майера, Морза, Сом и Домингоса, Финиста–Синклейра и др.) является двух- или трехпараметрическими и, следовательно, для определения их параметров достаточно использовать первые три уравнения системы (3). При этом необходимо иметь в виду, что устойчивое состояние решетки может быть достигнуто не при экспериментальном значении  $\eta_0$ . Подобным образом для ряда гексагональных металлов находятся параметры межатомных потенциалов, заданных функцией Морза

$$\varphi_M(r) = D\beta \exp^{-ar} (\beta e^{-ar} - 2). \quad (4)$$



Линии постоянных значений (eV) потенциалов в плоскости, содержащей направление  $\langle 0001 \rangle$  (ось  $Z$ ), в титане (а) и кадмии (b).  $\rho$  — проекция вектора связи на главную плоскость кристалла.

В настоящей работе учитывались связи в первых шести координационных сферах, что составляет 38 связей. В кубических кристаллах примерно такое же количество связей достигается на первых трех сферах (ГЦК — 42, ОЦК — 26). Соответствующие значения  $D, \alpha, \beta$  приведены в табл. 1.

Для выполнения всех четырех условий системы (3) и, следовательно, обеспечения полной стабильности решетки необходимо изменить вид потенциальной функции так, чтобы явным образом учесть направление вектора межатомной связи. При этом симметрия кристаллической решетки должна быть в некоторой степени отражена в потенциальной функции. Поскольку укладка

**Таблица 1.** Исходные данные и параметры межатомных потенциалов (4) и (5), обеспечивающих устойчивость кристаллических решеток ГПУ металлов в рамках изотропной (И) и анизотропной (А) моделей

| Металл | Исходные экспериментальные значения |        |                  |                                   | Модель | Параметры межатомных потенциалов |                         |          |                |
|--------|-------------------------------------|--------|------------------|-----------------------------------|--------|----------------------------------|-------------------------|----------|----------------|
|        | $a_0, \text{Å}$                     | $\eta$ | $E_s, \text{eV}$ | $B, \frac{\text{eV}}{\text{Å}^3}$ |        | $\xi$                            | $\alpha, \text{Å}^{-1}$ | $\beta$  | $D, \text{eV}$ |
| Be     | 2.283                               | 1.5799 | 3.33             | 0.6261                            | И      | —                                | 1.03639                 | 15.5321  | 0.28540        |
|        |                                     |        |                  |                                   | А      | -0.47003                         | 1.02984                 | 15.5631  | 0.33018        |
| Cd     | 2.973                               | 1.8859 | 1.16             | 0.2915                            | И      | —                                | 1.57346                 | 148.6845 | 0.166490       |
|        |                                     |        |                  |                                   | А      | 5.12969                          | 1.50880                 | 147.4930 | 0.055273       |
| Co     | 2.514                               | 1.6329 | 4.387            | 1.1948                            | И      | —                                | 1.41301                 | 45.7857  | 0.494230       |
|        |                                     |        |                  |                                   | А      | -0.25480                         | 1.41228                 | 45.8561  | 0.537950       |
| Hf     | 3.195                               | 1.5830 | 6.35             | 0.6804                            | И      | —                                | 0.97716                 | 30.1948  | 0.653940       |
|        |                                     |        |                  |                                   | А      | -0.48839                         | 0.97173                 | 30.3060  | 0.767107       |
| Mg     | 3.208                               | 1.6240 | 1.53             | 0.2210                            | И      | —                                | 1.16852                 | 54.1921  | 0.17832        |
|        |                                     |        |                  |                                   | А      | -0.28759                         | 1.16757                 | 54.2811  | 0.19633        |
| Re     | 2.761                               | 1.6148 | 8.10             | 2.3221                            | И      | —                                | 1.54337                 | 85.2601  | 1.01990        |
|        |                                     |        |                  |                                   | А      | -0.32127                         | 1.54212                 | 85.3768  | 1.13721        |
| Ru     | 2.706                               | 1.5824 | 6.615            | 2.0025                            | И      | —                                | 1.56400                 | 80.7498  | 0.82891        |
|        |                                     |        |                  |                                   | А      | -0.52657                         | 1.55942                 | 80.9837  | 0.99296        |
| Sc     | 3.309                               | 1.5935 | 3.93             | 0.2715                            | И      | —                                | 0.76943                 | 18.3760  | 0.35341        |
|        |                                     |        |                  |                                   | А      | -0.44311                         | 0.76583                 | 18.4222  | 0.40655        |
| Tl     | 3.456                               | 1.6002 | 1.87             | 0.2241                            | И      | —                                | 1.10367                 | 56.45925 | 0.22008        |
|        |                                     |        |                  |                                   | А      | -0.41616                         | 1.10165                 | 56.6069  | 0.25319        |
| Ti     | 2.950                               | 1.5885 | 4.855            | 0.6561                            | И      | —                                | 1.05291                 | 30.0089  | 0.49888        |
|        |                                     |        |                  |                                   | А      | -0.46777                         | 1.04914                 | 30.1143  | 0.581327       |
| Zn     | 2.665                               | 1.8563 | 1.35             | 0.3733                            | И      | —                                | 1.53691                 | 85.3287  | 0.17560        |
|        |                                     |        |                  |                                   | А      | 2.57957                          | 0.83722                 | 84.5847  | 0.08887        |
| Zr     | 3.232                               | 1.5925 | 6.316            | 0.5200                            | И      | —                                | 0.84079                 | 21.3823  | 0.59309        |
|        |                                     |        |                  |                                   | А      | -0.44977                         | 0.83722                 | 21.4452  | 0.68484        |

базисных плоскостей плотная, можно предположить, что межатомный потенциал не должен зависеть от направления проекции вектора связи  $\mathbf{r}$  на базисную плоскость, однако он должен зависеть от полярного угла  $\theta$  между вектором связи и главной осью кристалла. Кроме того, величина потенциала не должна измениться, если вектор связи испытает отражение от главной плоскости. С учетом этих обстоятельств функция, описывающая взаимодействия атомов в ГПУ кристалле, может быть представлена в виде радиальной функции  $R(r)$ , зависящей от угла  $\theta$ . Например,

$$\varphi(\mathbf{r}) = (1 + \xi \cos^2 \theta) R(r), \quad (5)$$

где  $\xi$  — параметр анизотропии. Очевидно, что при  $\xi = 0$  потенциал становится изотропным. Значения  $\cos^2 \theta$  определяются только номером координационной сферы и осевым соотношением  $\eta$ . Если принять, что вид межатомного потенциала задан функцией (5), то последнее условие устойчивости системы (2) станет отличным от последнего уравнения системы (3) и запишется

в виде

$$\sum \left[ \xi \frac{d \cos^2 \theta}{d\eta} \cdot R(r) + (1 + \xi \cos^2 \theta) \times \left( \frac{1}{r} \frac{dr}{d\eta} \right) \cdot \left( r \frac{dR}{dr} \right) \right] = 0. \quad (6)$$

В качестве радиально-симметричной функции  $R(r)$  использовалась функция Морза (4). В этом случае четыре параметра потенциала (5)  $\xi, \alpha, \beta, D$  могли быть однозначно определены путем решения системы (3) с заменой последнего условия на (6). Численные данные для этих параметров, найденные также с учетом связей до шестой координационной сферы, приводятся в табл. 1. Наглядное представление о поведении межатомных анизотропных потенциалов дает рассмотрение их линий постоянных значений в плоскости, проходящей через главную ось кристалла (ось  $Z$ ) (см. рисунок).

Для металлов с  $\eta > 1.633$  минимум  $\varphi$  достигается при  $\theta = 0^\circ$  или для векторов связи, ориентированных вдоль главной оси, а для металлов с  $\eta < 1.633$  — при  $\theta = 90^\circ$  или для векторов связи, параллельных базис-

**Таблица 2.** Экспериментальные (Э) и рассчитанные с использованием изотропных (И) и анизотропных (А) межатомных потенциалов значения модулей упругости в гексагональных металлах

| Металл | Способ определения модулей | Модули упругости, $eV/\text{Å}^3$ |          |          |          |          |
|--------|----------------------------|-----------------------------------|----------|----------|----------|----------|
|        |                            | $C_{11}$                          | $C_{12}$ | $C_{13}$ | $C_{33}$ | $C_{44}$ |
| Be     | Э                          | 1.824                             | 0.167    | 0.087    | 2.100    | 1.014    |
|        | И                          | 1.0681                            | 0.3437   | 0.3515   | 1.4063   | 0.3423   |
|        | А                          | 1.3106                            | 0.4369   | 0.2218   | 1.2526   | 0.2296   |
| Cd     | Э                          | 0.723                             | 0.248    | 0.253    | 0.321    | 0.127    |
|        | И                          | 0.8360                            | 0.2868   | 0.0134   | 0.3503   | 0.0187   |
|        | А                          | 0.3843                            | 0.1281   | 0.1459   | 1.0812   | 0.1492   |
| Co     | Э                          | 1.916                             | 1.030    | 0.643    | 2.235    | 0.487    |
|        | И                          | 2.1903                            | 0.7236   | 0.5521   | 2.7195   | 0.5472   |
|        | А                          | 2.4159                            | 0.8053   | 0.4521   | 2.5022   | 0.4534   |
| Hf     | Э                          | 1.130                             | 0.482    | 0.413    | 1.229    | 0.348    |
|        | И                          | 1.1546                            | 0.3755   | 0.3688   | 1.5896   | 0.3618   |
|        | А                          | 1.4235                            | 0.4745   | 0.2346   | 1.3891   | 0.2387   |
| Mg     | Э                          | 0.373                             | 0.163    | 0.135    | 0.385    | 0.102    |
|        | И                          | 0.4014                            | 0.1326   | 0.1046   | 0.5031   | 0.1037   |
|        | А                          | 0.4480                            | 0.1493   | 0.0842   | 0.4575   | 0.0845   |
| Re     | Э                          | 3.823                             | 1.685    | 1.286    | 4.262    | 1.014    |
|        | И                          | 4.1819                            | 1.3827   | 1.1319   | 5.2466   | 1.1234   |
|        | А                          | 4.7062                            | 1.5687   | 0.9125   | 4.6988   | 0.9144   |
| Ru     | Э                          | —                                 | —        | —        | —        | —        |
|        | И                          | 3.3921                            | 1.1134   | 1.0887   | 4.6611   | 1.0757   |
|        | А                          | 4.1796                            | 1.3932   | 0.7407   | 3.9143   | 0.7455   |
| Sc     | Э                          | —                                 | —        | —        | —        | —        |
|        | И                          | 0.4670                            | 0.1511   | 0.1471   | 0.6194   | 0.1437   |
|        | А                          | 0.5660                            | 0.1887   | 0.0956   | 0.5519   | 0.0980   |
| Tl     | Э                          | —                                 | —        | —        | —        | —        |
|        | И                          | 0.3918                            | 0.1288   | 0.1146   | 0.5179   | 0.1132   |
|        | А                          | 0.4619                            | 0.1540   | 0.1831   | 0.4530   | 0.0835   |
| Ti     | Э                          | 1.014                             | 0.574    | 0.431    | 1.128    | 0.291    |
|        | И                          | 1.1213                            | 0.3651   | 0.3507   | 1.5303   | 0.3443   |
|        | А                          | 1.3689                            | 0.4563   | 0.2279   | 1.3426   | 0.2316   |
| Zn     | Э                          | 1.005                             | 0.213    | 0.312    | 0.381    | 0.239    |
|        | И                          | 0.9831                            | 0.3368   | 0.0402   | 0.6122   | 0.0452   |
|        | А                          | 0.5732                            | 0.1911   | 0.1694   | 1.2593   | 0.1694   |
| Zr     | Э                          | 0.895                             | 0.454    | 0.498    | 1.029    | 0.200    |
|        | И                          | 0.8925                            | 0.2894   | 0.2797   | 1.1984   | 0.2736   |
|        | А                          | 1.0844                            | 0.3615   | 0.1811   | 1.0636   | 0.1851   |

ной плоскости. Параметр анизотропии  $\xi$  оказывается хорошо коррелирующим с осевым соотношением  $\eta$ . При  $\eta < 1.633$  величина  $\xi$  отрицательна, а при  $\eta = 1.88$ , что достигается в кадмии,  $\xi$  возрастает до 5.13.

### 3. Модули упругости

Пусть  $\mathbf{r}_0 = (x_0, y_0, z_0)$  — вектор, заданный декартовыми координатами и связывающий какие-либо две точки (частицы) в недеформированном материале, а  $\mathbf{r} = (x, y, z)$  — вектор, связывающий те же точки в материале, подвергнутом произвольной упругой дефор-

мации. Координаты векторов  $\mathbf{r}$  и  $\mathbf{r}_0$  в деформированном и недеформированном материале связаны друг с другом соотношениями [4–6]

$$\begin{aligned} x &= (1 + e_1)x_0 + \frac{e_6}{2}y_0 + \frac{e_5}{2}z_0, \\ y &= \frac{e_6}{2}x_0 + (1 + e_2)y_0 + \frac{e_4}{2}z_0, \\ z &= \frac{e_5}{2}x_0 + \frac{e_4}{2}y_0 + (1 + e_3)z_0, \end{aligned} \quad (7)$$

где  $e_1, e_2, e_3, \dots, e_6$  — компоненты тензора деформаций, выраженные с помощью индексов Фойгхта. Модули

упругости по определению [4,5] могут быть найдены из соотношения

$$C_{mn} = \frac{d^2U}{de_m de_n}, \quad (8)$$

где  $m, n = 1, 2, \dots, 6$ ;  $U = U_0/V_0$  — плотность внутренней энергии. Для гексагонального кристалла имеется пять независимых постоянных упругой жесткости  $C_{11}, C_{12}, C_{13}, C_{33}, C_{44}$ . Приняв во внимание, что аргументом межатомного потенциала является вектор межатомной связи  $\mathbf{r}$ , найдем производные от плотности внутренней энергии по деформациям, используя выражение (1) для  $U_0$

$$\begin{aligned} \frac{dU}{de_1} &= \frac{1}{2V_0} \sum \frac{d\varphi}{dx} x_0, \\ \frac{dU}{de_2} &= \frac{1}{2V_0} \sum \frac{d\varphi}{dy} y_0, \\ \frac{dU}{de_3} &= \frac{1}{2V_0} \sum \frac{d\varphi}{dz} z_0, \\ \frac{dU}{de_4} &= \frac{1}{2V_0} \sum \left[ \frac{d\varphi}{dy} \frac{z_0}{2} + \frac{d\varphi}{dz} \frac{y_0}{2} \right]. \end{aligned} \quad (9)$$

Здесь и далее, как и в (3), суммирование проводится по узлам решетки ГПУ металла, а все выражения вычисляются в точках равновесия кристалла. Путем дифференцирования (9) по деформациям получены выражения для модулей упругости

$$\begin{aligned} C_{11} &= \frac{1}{2V_0} \sum \left( x^2 \frac{d^2\varphi}{dx^2} \right), \\ C_{12} &= \frac{1}{2V_0} \sum \left( xy \frac{d^2\varphi}{dx dy} \right), \\ C_{13} &= \frac{1}{2V_0} \sum \left( xz \frac{d^2\varphi}{dx dz} \right), \\ C_{33} &= \frac{1}{2V_0} \sum \left( z^2 \frac{d^2\varphi}{dz^2} \right), \\ C_{44} &= \frac{1}{8V_0} \sum \left( z^2 \frac{d^2\varphi}{dy^2} + 2yz \frac{d^2\varphi}{dy dz} + y^2 \frac{d^2\varphi}{dz^2} \right). \end{aligned} \quad (10)$$

Подставляя в (10) в качестве  $\varphi$  межатомный потенциал в виде (5), учитывая, что  $\cos^2 \theta = z^2/r^2$ ;  $dr/dx = x/r$ ;  $dr/dy = y/r$ ;  $dr/dz = z/r$  и выполняя соответствующие дифференцирования, получим выражение для модулей

через радиальную функцию

$$\begin{aligned} C_{11} &= \frac{1}{2V_0} \sum \left[ \frac{8\xi x^4 z^2 - 2\xi x^2 z^2 r^2}{r^6} R + \frac{x^2 r^4 - x^4 r^2 + \xi x^2 z^2 r^2 - 5\xi z^2 x^4}{r^6} \left( r \frac{dR}{dr} \right) + \frac{x^4 r^2 + \xi x^4 z^2}{r^6} \left( r^2 \frac{d^2R}{dr^2} \right) \right], \\ C_{12} &= \frac{1}{2V_0} \sum \left[ \frac{8\xi x^2 y^2 z^2}{r^6} R - \frac{x^2 y^2 r^2 + 5\xi x^2 y^2 z^2}{r^6} \left( r \frac{dR}{dr} \right) + \frac{x^2 y^2 r^2 + \xi x^2 y^2 z^2}{r^6} \left( r^2 \frac{d^2R}{dr^2} \right) \right], \\ C_{33} &= \frac{1}{2V_0} \sum \left[ \frac{2\xi z^2 r^4 - 10\xi z^4 r^2 + 8\xi z^6}{r^6} R + \frac{z^2 r^4 + (5\xi - 1)z^4 r^2 - 5\xi z^6}{r^6} \left( r \frac{dR}{dr} \right) + \frac{z^4 r^2 + \xi z^6}{r^6} \left( r^2 \frac{d^2R}{dr^2} \right) \right], \\ C_{13} &= \frac{1}{2V_0} \sum \left[ \frac{8\xi x^2 z^4 - 4\xi x^2 z^2 r^2}{r^6} R + \frac{(2\xi - 1)x^2 z^2 r^2 - 5\xi x^2 z^4}{r^6} \left( r \frac{dR}{dr} \right) + \frac{x^2 z^2 r^2 + \xi x^2 z^4}{r^6} \left( r^2 \frac{d^2R}{dr^2} \right) \right], \\ C_{44} &= \frac{1}{8V_0} \sum \left[ \frac{32\xi y^2 z^4 - 18\xi y^2 z^2 r^2 + 2\xi y^2 r^4 - 2\xi z^4 r^2}{r^6} R + \frac{y^2 r^4 + z^2 r^4 + (9\xi - 4)y^2 z^2 r^2 - 20\xi y^2 z^4 + \xi z^4 r^2}{r^6} \left( r \frac{dR}{dr} \right) + \frac{4y^2 z^2 r^2 + 4\xi y^2 z^4}{r^6} \left( r^2 \frac{d^2R}{dr^2} \right) \right]. \end{aligned} \quad (11)$$

Очевидно, что в рамках изотропной модели модули упругости могут быть найдены, если положить  $\xi = 0$ . Значения модулей упругости для гексагональных металлов были рассчитаны в приближении изотропных и анизотропных потенциалов. В табл. 2 они сопоставляются с соответствующими известными экспериментальными значениями. В качестве радиальной функции  $R(r)$  использовалась функция Морза с параметрами, приведенными в табл. 1. Как и при построении потенциалов, здесь учитывались связи вплоть до шестой координационной сферы.

Как видно из табл. 1, для металлов с соотношением осей, близким к идеальному, рассчитанные значения модулей оказываются близкими к экспериментальным как для изотропной, так и для анизотропной моделей. Однако для кадмия и цинка — металлов с большим осевым соотношением — рассчитанные значения  $C_{13}$  и  $C_{44}$  для изотропной модели оказываются примерно на порядок ниже экспериментальных. Учет анизотропии межатомных взаимодействий позволяет исправить это несоответствие. В то же время анизотропная модель дает завышенное значение  $C_{33}$  для кадмия и цинка. И это не удивительно, поскольку при больших  $\eta$  и, следовательно, больших  $\xi$  в соответствии с (5) роль связей, близких по направлению к оси  $Z$ , оказывается более существенной. Для бериллия пропорции между рассчитанными значениями модулей примерно такие же, как и для других металлов.

Однако для экспериментальных значений модулей наблюдается аномалия, состоящая в том, что  $C_{11}$ ,  $C_{33}$  и  $C_{44}$  намного превышают  $C_{12}$  и  $C_{13}$ . В частности, отношение экспериментальных значений  $C_{33}$  к  $C_{13}$  для бериллия составляет 24.1. Вероятно, что это обусловлено сложной конфигурацией электронных оболочек бериллия, которая не отражена в данной модели.

Имеющиеся различия между экспериментальными и рассчитанными значениями модулей упругости, по-видимому, можно сократить, если найти другую, более адекватную зависимость потенциальной функции от направления вектора межатомной связи. Как бы то ни было, даже если упомянутые различия оказались бы еще большими, построение анизотропных межатомных потенциалов оказывается оправданным в связи с необходимостью моделирования протяженных дефектов решетки — дислокаций, дефектов сдвигового типа, границ зерен. Действительно, применение потенциалов, не обеспечивающих стабильность решетки, может привести к избыточной релаксации, не обусловленной присутствием дефекта.

#### 4. Заключение

Таким образом, построенные межатомные потенциалы обеспечивают стабильность кристаллических решеток для большинства ГПУ металлов относительно их геометрических и упругих характеристик и, следовательно, могут быть применены в моделировании дефектов в соединениях, содержащих соответствующие компоненты. Их применение в моделировании дефектов позволяет выявить особенности структуры кристалла, обусловленной присутствием именно рассматриваемого дефекта.

Выбор вида потенциальной функции оказывается решающим фактором при описании упругих свойств кристаллических тел. В частности, задание потенциальной функции в виде (5) позволяет получить значения модулей упругости, близкие к экспериментальным даже для металлов с большим осевым соотношением  $\eta$ .

#### Список литературы

- [1] L.A. Girifalco, V.G. Weizer. Phys. Rev. **114**, 687 (1959).
- [2] E.S. Machlin. Acta. Metall. **22**, 9 (1974).
- [3] V. Vitek, M. Igarashi. Phys. Mag. **63A**, 1059 (1991).
- [4] Ч. Киттель. Введение в физику твердого тела. Наука, М. (1978).
- [5] М.П. Шаскольская. Кристаллография. Высш. шк., М. (1984).
- [6] Г. Шульце. Металлофизика. Мир, М. (1971).