

тик сильно размываются, что экспериментально наблюдалось в работах [2, 3]. Заметим, что «старение» кристаллов, связанное с увеличением числа дефектов, также приводит к размытию диэлектрических и акустических аномалий в области перехода за счет возникновения локальных электрических полей, упругих напряжений и их градиентов.

#### Литература

1. Струков Б.А., Леванюк А.П. Физические основы сегнето-электрических явлений в кристаллах. М., 1983.
2. Itai K.J. // Phys. Soc. Japan. 1974. No. 4. P. 1069.
3. Зарембо Л.К., Красильников В.А., Румянцев В.А., Сердобольская О.Ю. // Акуст. журн. 1995. 41, № 5. С. 784.

Поступила в редакцию  
24.06.97

## ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

УДК 539.1

### РАСЧЕТ УПРУГИХ ПОСТОЯННЫХ МЕТАЛЛОВ С ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ ПЛОТНОЙ УПАКОВКОЙ

В. М. Сионов, И. А. Глянченко

(кафедра физики твердого тела)

Методом модельного потенциала в гармоническом приближении с учетом взаимодействия до четвертой координационной сферы проведен расчет упругих постоянных Mg, Zr и Ti. Как в случае Mg, так и в случае переходных металлов Zr и Ti рассчитанные значения упругих постоянных оказались близкими к экспериментальным. Для Zr и Ti наиболее близкими к экспериментальным оказались значения упругих постоянных  $C_{12}$ ,  $C_{13}$ ,  $C_{33}$ , а для  $C_{11}$  и  $C_{44}$  расхождение составило около 20%.

В настоящее время метод модельного потенциала достаточно широко применяется для изучения многих важных свойств металлов и сплавов, таких как энергия упорядочения, устойчивость фаз, фононные спектры, плотность электронных состояний и т.п. Наиболее успешным оказалось применение псевдопотенциалов для металлов с ОЦК и ГЦК структурами [1–3]. В то же время недостаточно полно исследована возможность использования модельных потенциалов для расчета подобных характеристик ГПУ металлов и сплавов, в частности переходных элементов. Упругие постоянные ГПУ металлов могут быть рассчитаны, если известны значения потенциалов межатомного взаимодействия  $F(r)$ . В работе [4] при вычислении  $F(r)$  предполагается знание распределения электронной плотности вокруг ядер. В этой работе проводился расчет упругих постоянных для Mg с применением потенциала, построенного на основе распределения электронной плотности в рамках метода функционала плотности. Однако применение использовавшихся в [4] достаточно громоздких формул для переходных элементов представляет значительные трудности. В то же время расчет упругих постоянных как для простых, так и для переходных металлов может быть проведен в рамках метода модельного потенциала. Целью данной работы является применение метода модельного потенциала для вычисления упругих постоянных ряда металлов с ГПУ структурой.

#### Методика расчета

Как отмечалось в работе [4], в гармоническом приближении для расчета упругих постоянных элементов с ГПУ структурой можно ограничиться рассмотрением координационных сфер до четвертой включительно. В этом приближении упругие постоянные могут быть рассчитаны с использованием выражений [5, 6]:

$$C_{11} = \sqrt{3}(3\alpha - A_1 - L)/2c,$$

$$C_{12} = C_{11} - \frac{1}{\sqrt{3}c} \times \\ \times [3(\alpha - 3A_1) - 3B_1 - B_2 - 12G_1 - 4G_2 + P],$$

$$L = \left[ (2B_2 + G_2 + 3G_1)(3B_1 + B_2 + 8G_2) + \right. \\ \left. + 2G_2(3B_1 + B_2) \right] / 3(B_1 + B_2 + G_1 + G_2),$$

$$C_{13} = \frac{2}{a}(2G_4 - B_4) - C_{44},$$

$$C_{33} = \frac{c}{\sqrt{3}a^2} [-3(B_3 + G_3) + 4\delta],$$

$$C_{44} = -\frac{2}{\sqrt{3}c}(3A_2 + B_3 + 4G_3),$$

$$P = \frac{(B_1 - B_2 - 2G_1 + 2G_2)^2}{B_1 + B_2 + G_1 + G_2},$$

$$\alpha = -[k_1(1) + C_B(1)], \quad A_1 = A_2 = C_B(1), \quad A_3 = 0,$$

$$\begin{aligned}
 B_1 &= C_B(2), & B_2 &= \frac{1}{3}(K_1(2) + 3C_B(2)), \\
 B_3 &= 2B_2 - B_1, & B_4 &= \sqrt{2}(B_2 - B_1), \\
 G_1 &= C_B(3), & G_2 &= \frac{1}{3}(2K_1(3) + 3C_B(3)), \\
 G_3 &= \frac{1}{2}(G_1 + G_2), & G_4 &= \frac{G_2 - G_1}{\sqrt{2}}, \\
 \delta &= -(K_1(4) + C_B(4)), \\
 K_1(S) &= (\alpha_i - \beta_i)_S, & C_B(S) &= (\beta_i)_S.
 \end{aligned}$$

В этих выражениях  $C_{11}, C_{12}, C_{13}, C_{33}$  и  $C_{44}$  — упругие постоянные,  $a$  и  $c$  — параметры кристаллической решетки.

С использованием рассчитанных потенциалов межатомного взаимодействия вычислялись значения радиальных ( $\alpha_i$ ) и тангенциальных ( $\beta_i$ ) силовых постоянных для первых четырех координационных сфер по формулам

$$\alpha_1 = \left. \frac{d^2 F}{dr^2} \right|_{r_i}, \quad \beta_1 = \left. \frac{1}{r} \frac{dF}{dr} \right|_{r_i},$$

где  $i$  — номер координационной сферы.

Во втором порядке теории возмущений потенциал межатомного взаимодействия записывается следующим образом [7]:

$$F(r) = \frac{Z^2 e^2}{r} - \frac{2Z^2 e^2}{\pi} \int_0^\infty G(q) \frac{\sin qr}{qr} dq,$$

где  $Z$  — валентность,  $q$  — модуль вектора рассеяния,  $r$  — межатомное расстояние.

В качестве исходных данных используется набор формфакторов модельных потенциалов в аналитической форме, предложенный Анималу [8, 9]:

для простых элементов

$$W(q, \mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{B(q)}{\varepsilon(q)} + F(q, \mathbf{k}, \mathbf{k}') + I(q),$$

для переходных элементов

$$W(q, \mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{B(q) + F(q, \mathbf{k}, \mathbf{k}')}{\varepsilon(q)}. \quad (1)$$

Здесь  $B(q)$  — локальная часть,  $F(q, \mathbf{k}, \mathbf{k}')$  — нелокальная часть,  $\varepsilon(q)$  — функция диэлектрической проницаемости,  $I(q)$  — дополнительный член для простых металлов. Эти выражения не приводятся полностью ввиду их громоздкости.

Как показано в работе [10], расчет формфакторов модельных потенциалов и для простых, и для переходных элементов можно проводить с использованием формулы (1).

Параметры  $A_0, A_1, A_2, R_m, \Omega, Z, m^*, R_c, \alpha_{\text{eff}}$  и  $|E_c|$ , использованные при расчете формфакторов модельных потенциалов, приведены в табл. 1. Характеристическая функция  $G(q)$  рассчитывалась по формуле [7]:

$$G(q) = \left[ \frac{4\pi Z e^2}{\Omega q^2} \right]^2 \frac{W(q)^2}{1 - f(q)} \left( 1 - \frac{1}{\varepsilon(q)} \right).$$

Таким образом, если известны значения характеристических функций  $G(q)$ , можно рассчитать силовые постоянные для каждого набора ближайших соседей.

Т а б л и ц а 1

Параметры модельных потенциалов

Металл	$a, \text{Å}$	$c, \text{Å}$	$A_0, \text{а.е.}$	$A_1, \text{а.е.}$	$A_2, \text{а.е.}$	$R_m, \text{а.е.}$	$\Omega, \text{а.е.}$	$Z, \text{а.е.}$	$m^*, \text{а.е.}$	$R_c, \text{а.е.}$	$\alpha_{\text{eff}}$	$ E_c , \text{Ry}$
Mg	3,21	5,21	0,78	0,88	0,99	2,6	155,9	2	1,0	1,47	0,043	0,086
Ti	2,95	4,68	2,30	2,50	2,10	2,0	119,0	4	1,0	1,285	0,037	0,096
Zr	3,23	5,15	1,15	1,70	1,30	2,0	157,0	4	1,0	1,493	0,044	0,095

Т а б л и ц а 2

Расчетные значения атомных силовых постоянных при учете от 1 до 4 координационных сфер

Радиусы и силовые постоянные	Mg				Ti				Zr			
	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4
$r_i, \text{Å}$	3,20	3,21	4,53	5,21	2,89	2,95	4,13	4,68	3,18	3,23	4,53	5,15
$\alpha_i \cdot 10^{-4}, \text{дин/см}$	1,41	1,04	0,12	-0,052	2,95	1,23	0,24	0,07	2,42	1,17	0,37	0,12
$\beta_i \cdot 10^{-4}, \text{дин/см}$	0,0012	0,0010	-0,033	-0,0006	0,20	0,12	-0,071	-0,019	0,11	0,07	-0,13	-0,043

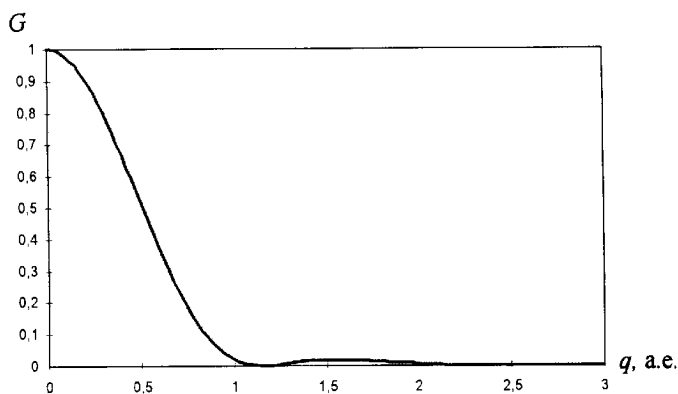


Рис. 1

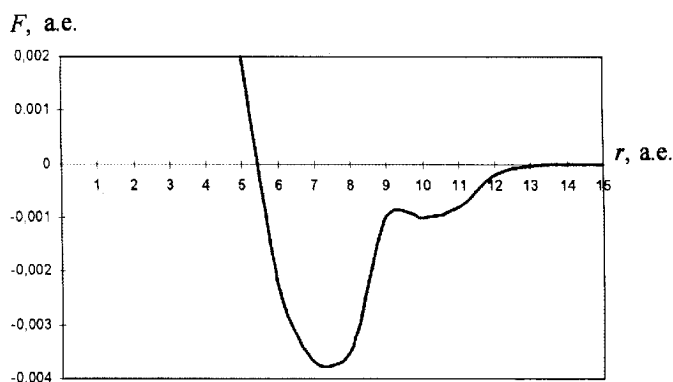


Рис. 2

### Результаты расчета

Зависимости  $G(q)$  и  $F(r)$  для Mg приведены соответственно на рис. 1 и 2. Сходный вид имеют эти зависимости для Zr и Ti.

В табл. 2 приведены радиусы первых четырех координационных сфер и значения атомных силовых постоянных для Mg, Zr и Ti. Из табл. 2 видно, что силовые постоянные, соответствующие первой и второй координационным сферам, для каждого из элементов имеют близкие значения, что является следствием близких значений радиусов этих сфер. Радиальная силовая постоянная для каждой координационной сферы больше тангенциальной постоянной.

В табл. 3 приведены упругие постоянные для Mg, Zr и Ti, рассчитанные приведенным выше методом, а также методом [4], и экспериментальные значения [11–13].

Сравнение показывает, что расчет упругих постоянных для Mg методом модельного потенциала и расчет с использованием функции распределения электронной плотности [4] удовлетворительно согласуются с экспериментом. Для Ti и Zr также получе-

но удовлетворительное согласие рассчитанных значений упругих постоянных с экспериментальными данными.

Таблица 3

### Упругие постоянные

Металл	Источник данных	$C \cdot 10^{-12}$ , дин/см <sup>2</sup>				
		$C_{11}$	$C_{22}$	$C_{13}$	$C_{33}$	$C_{44}$
Mg	Расчет (настоящая работа)	0,71	0,32	0,34	0,84	0,17
	Расчет [4]	0,59	0,26	0,21	0,62	0,16
	Эксперимент [13]	0,83	0,32	0,19	0,97	0,18
	Эксперимент [11]	0,63	0,25	0,21	0,66	0,18
Ti	Расчет (настоящая работа)	2,17	0,81	0,75	2,06	0,59
	Эксперимент [11]	1,62	0,92	0,69	1,81	0,46
Zr	Расчет (настоящая работа)	1,75	0,63	0,61	1,98	0,25
	Эксперимент [11]	1,44	0,72	0,65	1,65	0,32
	Эксперимент [12]	1,43	0,73	0,65	1,65	0,32

В то же время нужно отметить, что более близкими к экспериментальным оказались значения упругих постоянных  $C_{12}$ ,  $C_{13}$ ,  $C_{33}$ . Расхождение для  $C_{11}$  и  $C_{44}$  составило  $\sim 20\%$ . Это расхождение может быть обусловлено тем, что расчет ограничен учетом лишь четырех координационных сфер.

### Литература

1. Харрисон В. Электронная структура и свойства твердых тел. Физика химической связи. М., 1983.
2. Хейне В., Коэн М., Уэйр Д. Теория псевдопотенциалов. М., 1974.
3. Силонов В.М. Физика сплавов. М., 1994.
4. Magana L.F., Vazquez G.J. // J. Phys.: Condens. Matter. 1995. 7. P. L393.
5. Shukla R.C. // J. Chem. Phys. 1966. 45. P. 4178.
6. Collins M.F. // Proc. Phys. Soc. 1962. 80. P. 362.
7. Upadhyaya S.C., Upadhyaya J.C., Shyam R. // Phys. Rev. 1991. B44. P. 122.
8. Animalu A.O.E., Heine V. // Phil. Mag. 1965. 12. P. 1249.
9. Animalu A.O.E. // Phys. Rev. 1973. B8. P. 3542.
10. Силонов В.М. Таблицы формфакторов псевдопотенциалов Анималу: Деп. ВИНТИ № 1171-76. М., 1976.
11. Францевич И.Н., Воронов Ф.Ф., Бакута С.А. Упругие постоянные и модули упругости металлов и неметаллов. Киев, 1982.
12. Cavakheiro R., Shukla M.M. // Nuovo Cimento. 1975. B30. P. 1.
13. Slutsky L., Garland C.W. // Phys. Rev. 1957. B107. P. 972.

Поступила в редакцию  
25.06.97