

УДК 539.5

DOI 10.18101/2306-2363-2018-1-10-26

**К РАСЧЕТУ СИЛОВЫХ И УПРУГИХ ПОСТОЯННЫХ МЕТАЛЛОВ
С ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ ПЛОТНОУПАКОВАННОЙ СТРУКТУРОЙ**© **Л. Энхтор**

доктор технических наук, профессор,
Монгольский государственный университет,
факультет естественных наук, кафедра физики,
Монголия, 210646, Улан-Батор, Их сургуулийн гудамж-1.

© **Р. Галбадрах**

доктор физико-математических наук, профессор,
Монгольский государственный университет,
факультет естественных наук, кафедра физики,
Монголия, 210646, Улан-Батор, Их сургуулийн гудамж-1.

© **В. М. Сионов**

доктор физико-математических наук, профессор,
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, физический факультет, кафедра физики твердого тела,
Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2.

© **Б. Б. Дамдинов**

доктор физико-математических наук,
Бурятский государственный университет, физический факультет
Россия, Улан-Удэ
E-mail: dababa@mail.ru

В модели Де Лане расписаны выражения для элементов динамической матрицы гексагональных плотноупакованных структур, из которых в длинноволновом приближении выведены формулы для расчетов упругих постоянных C_{11} , C_{12} , C_{13} , C_{33} , C_{44} . Полученные формулы применялись для расчетов упругих постоянных Mg, Ti, Zr, Hf, Co, Ru и Os через радиальные и тангенциальные силовые постоянные межатомного взаимодействия, значения которых рассчитывались методом псевдопотенциала для первых восьми координационных сфер. Результаты расчетов сравнивались с соответствующими экспериментальными данными упругих постоянных. Также, с применением полученных выражений из экспериментальных значений упругих постоянных рассматриваемых металлов рассчитывались силовые постоянные на первых трех координационных сферах, которые сравнивались с результатами расчетов методом псевдопотенциала.

Ключевые слова: динамическая матрица; радиальные и тангенциальные силовые постоянные; упругие постоянные; гексагональные плотноупакованные структуры металлов; метод псевдопотенциала; модель Де Лане.

Введение

Упругие постоянные являются важными характеристиками металлов и их сплавов, от которых зависят плотность упругой энергии, дисперсия фононов, дебаевская характеристическая температура и рассеяние рентгеновских лучей и

нейтронов на кристалле [1]. Между тем, известно, что измерение полного набора упругих постоянных методом ультразвуковых волн возможно лишь для монокристаллов, а для поликристаллических образцов не удается измерить все типы упругих постоянных. Поэтому задача теоретической оценки упругих постоянных металлов и сплавов является остающейся актуальной. В микроскопической теории твердого тела значения упругих постоянных зависят от силовых постоянных межатомного взаимодействия. Поэтому при известных значениях упругих постоянных можно оценить значения силовых постоянных межатомного взаимодействия, через которых можно проверить достоверность теоретических моделей расчета энергии межатомного взаимодействия.

Для расчета упругих постоянных гексагональных плотноупакованных структуры металлов (ГПУ) в модели Борна-Кармана, в гармоническом приближении, с учетом первых четырех координационных сфер предложены следующие выражения [2, 3]:

$$\begin{aligned} C_{11} &= \sqrt{3}(3a - A_1 - L)/2c; \\ C_{12} &= C_{11} - 1/\sqrt{3}c[3(\alpha - 3A_1) - 3B_1 - B_2 - 12G_1 - 4G_2 + P] \\ C_{13} &= 2/\alpha(2G_4 - B_4) - C_{44} \\ C_{33} &= c/\sqrt{3}\alpha^2[-3(B_3 + G_3) + 4\delta]; \\ C_{44} &= -2/\sqrt{3}c[3A_3 + B_3 + 4G_3], \end{aligned} \quad (1)$$

$$\text{где } L = \frac{(2B_2 + G_2 + 3G_1)(3B_1 + B_2 + 8G_2) + 2G_2(3B_1 + B_2)}{3(B_1 + B_2 + G_1 + G_2)}, \quad P = \frac{(B_1 - B_2 - 2G_1 + 2G_2)^2}{B_1 + B_2 + G_1 + G_2},$$

$$\begin{aligned} \alpha &= -[k_1(1) + C_B(1)], \quad A_1 = A_2 = C_B(1), \quad A_3 = 0, \\ B_1 &= C_B(2), \quad B_2 = 1/3(K_1(2) + 3C_B(2)), \quad B_3 = 2B_2 - B_1, \\ B_4 &= \sqrt{2}(B_2 - B_1), \\ G_1 &= G_B(3), \quad G_2 = 1/3(2K_1(3) + 3C_B(3)), \\ G_3 &= 1/3(G_1 + G_2), \quad G_4 = 1/\sqrt{2}(G_2 - G_1), \\ \delta &= -(K_1(4) + C_B(4)), \\ K_1(S) &= (\alpha_i - \beta_i)_S, \quad C_B(S) = (\beta_i)_S. \end{aligned}$$

В этих выражениях C_{11} , C_{12} , C_{13} , C_{33} и C_{44} — упругие постоянные, a и c — параметры кристаллической решетки, α_i и β_i ($i = 1, 4$) — тангенциальные и радиальные силовые постоянные:

$$\alpha_n = \left(\frac{d^2 V}{dR^2} \right)_{R_n}; \quad \beta_n = \left(\frac{dV}{RdR} \right)_{R_n}, \quad (2)$$

где $V(R)$ — парный потенциал межатомного взаимодействия. Выражения (1) впервые были получены Бегби [4] при учете взаимодействия с первыми двумя соседними атомами, а в работе [5] при учете центрального взаимодействия с тремя первыми соседними атомами. В [6] исследованием динамики решетки магния методом неупругого рассеяния нейтронов были измерены фононные частоты в симметричных направлениях, которые в наряду с экспериментальными значениями упругих постоянных [7] использовались в расчете силовых постоянных в модели Борна-Кармана. При этом автор [6] включил выражения (1) в систему уравнений для расчета силовых постоянных на первых четырех координа-

ционных сферах магния при неполном учете силовых постоянных на третьей и четвертой сферах. Выражения (1) применялись в работе [8] для расчета упругих постоянных магния, для которого потенциал межатомного взаимодействия был построен на основе распределения электронной плотности в рамках метода функционала плотности. Но как отмечено в [9], применение использовавшихся в [8] громоздких формул для переходных металлов представляет значительные трудности. Ввиду этого, авторы [9] с применением модельного потенциала переходных металлов (МППМ) Анималу [10, 11] согласно выражениям (1) при учете силовых постоянных на первых четырех координационных сферах рассчитали упругие постоянные ГПУ металлов Mg, Ti и Zr, значения которых находятся в удовлетворительном согласии с соответствующими экспериментальными значениями.

Дисперсия фононов ГПУ металлов в модели потенциала парного центрального ион-ионного и электрон-ионного взаимодействия исследована в работе [12], где упругие постоянные C_{11} , C_{12} , C_{33} , C_{44} , C_{13} , вторые моменты фононных частот $\omega^2_{LO}(\Gamma)$, $\omega^2_{TO}(\Gamma)$, $\omega^2_{LA}(\Gamma)$, $\omega^2_{TA\perp}(M)$, $\omega^2_{TO\perp}(M)$ выражались через модуль всестороннего сжатия электронов K_e , функцию G и параметры α_j и β_j ($j=1, \dots, 5$):

$$\alpha_j = \frac{A_j}{r_j}; \quad \beta_1 = B_1 - \frac{A_1}{r_1}; \quad \beta_2 = \frac{B_2 - A_2/r_2}{1 + 3c^2/4a^2}; \quad \beta_3 = \frac{B_3 - A_3/r_3}{1 + 3c^2/16a^2}; \quad \beta_4 = B_4 - \frac{A_4}{r_4};$$

$$\beta_5 = \frac{B_5 - A_5/r_5}{1 + 3c^2/28a^2}.$$

Здесь фигурируют первые и вторые производные от потенциала ион-ионного парного взаимодействия на первых пяти координационных сферах

$$A_j = \frac{d\phi_j^i}{dr_j} \text{ и } B_j = \frac{d^2\phi_j^i}{dr_j^2} \text{ при } j = 1, \dots, 5. \text{ Для Mg, Sc, Zr и Ho с использованием экс-}$$

периментальных значений C_{11} , C_{12} , C_{33} , C_{44} , C_{13} , $\omega^2_{LO}(\Gamma)$, $\omega^2_{TO}(\Gamma)$, $\omega^2_{LA}(A)$, $\omega^2_{TA\perp}(M)$, $\omega^2_{TO\perp}(M)$, были рассчитаны значения K_e , α_j и β_j ($j = 1, \dots, 5$), посредством которых были выражены элементы динамической матрицы и построены фононные спектры этих металлов, хорошо согласующиеся с соответствующими экспериментальными кривыми.

В работе [13] модель Де Лане была расширена на ГПУ металлы, и из экспериментальных данных упругих постоянных C_{11} , C_{12} , C_{33} , C_{44} , C_{13} и частот $\nu_{LA}(0001)$, $\nu_{TO\perp}(01\bar{1}0)$ были извлечены значения силовых постоянных α' , β' , γ' , α , β , γ , ε на первых четырех сферах с использованием соотношений:

$$C_{11} = \frac{1}{2c\sqrt{3}} \left[9\alpha' + 3\beta' + 12\gamma' - \frac{(\beta - 2\gamma')^2}{\alpha' + \beta'} \right];$$

$$C_{12} = \frac{1}{2c\sqrt{3}} \left[9\alpha' + 3\beta' + 12\gamma' - \frac{(\beta - 2\gamma')^2}{\alpha' + \beta'} - 6\alpha - \frac{18\beta\gamma}{\beta + \gamma} \right];$$

$$C_{11} - C_{12} = \frac{1}{2c\sqrt{3}} \left[6\alpha - \frac{18\beta\gamma}{\beta + \gamma} \right]; \quad (3)$$

$$C_{44} = \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{c}{a^2} [3(\beta' + \gamma') - 2(\beta + \gamma)];$$

$$C_{33} = \frac{c}{a\sqrt{3}} \left\{ \frac{9}{4} \frac{c^2}{a^2} \left(\beta' + \frac{\gamma'}{4} \right) + 4\varepsilon \right\};$$

$$C_{11} - C_{44} = 3 \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{c}{a^2} [(\beta' - \beta) + (\gamma' - \gamma)],$$

где последнее соотношение выражает модуль всестороннего сжатия электронного газа. С использованием силовых постоянных α' , β' , γ' , α , β , γ , ε были выражены элементы динамической матрицы рассчитаны фононные спектры Zr, Sc, Tl, Ho, Tb, которые по мнению авторов [13] находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными.

Во всех выше упомянутых работах рассматривались силовые постоянные на первых пяти координационных сферах. Также можно отметить, что в них выражения для расчета упругих постоянных очень громоздки и обратная задача оценки силовых постоянных из экспериментальных значений упругих постоянных затруднительна. Существуют серии работ по изучению динамики решетки ГПУ металлов методом нейтронографии, в которых определены силовые постоянные на координационных сферах вплоть до восьмой в модели Борна-Кармана или аксиально-симметричной модели. Но в этих моделях приходится определять на каждой координационной сфере от двух до шести типов силовых постоянных, что уменьшает их достоверность, так как они определяются методом наименьших квадратов или оптимизационными процедурами из экспериментально измеренных фононных частот.

Целью данной работы является расчет радиальных и тангенциальных силовых постоянных Mg, Ti, Zr, Hf, Co, Ru и Os на первых восьми координационных сферах методом псевдопотенциала и расчет упругих постоянных этих металлов с использованием выражений, полученных в модели Де Лане. Для сравнения также были рассчитаны силовые постоянные на первых трех координационных сферах с применением экспериментальных данных упругих постоянных рассмотренных металлов. В настоящей работе выбор модели Де Лане обусловлен, тем что на каждой рассматриваемой координационной сфере учитываются только два типа силовых постоянных межатомного взаимодействия. Это обстоятельство упрощает выражения для упругих постоянных через силовые постоянные межатомного взаимодействия, и дает возможность оценки значений силовых постоянных из экспериментальных данных об упругих постоянных.

Формулы расчета элементов динамической матрицы и упругих постоянных ГПУ металлов

Модель Де Лане, подробно описанная в обзорной статье [14], применяется в расчетах элементов динамической матрицы и упругих постоянных металлов с гранецентрированной и объемноцентрированными кубическими структурами. Согласно данной модели компоненты квазиупругой силы между атомом в начале отсчета и атомом, находящимся на n -ой координационной сфере, выражаются следующим образом:

$$X_n = -\beta_n(u_0 - u_n) - (\alpha_n - \beta_n)\lambda_n[\lambda_n(u_0 - u_n) + \mu_n(v_0 - v_n) + \nu_n(\omega_0 - \omega_n)];$$

$$Y_n = -\beta_n(v_0 - v_n) - (\alpha_n - \beta_n)\mu_n[\lambda_n(u_0 - u_n) + \mu_n(v_0 - v_n) + \nu_n(\omega_0 - \omega_n)];$$

$$Z_n = -\beta_n(\omega_0 - \omega_n) - (\alpha_n - \beta_n)v_n[\lambda_n(u_0 - u_n) + \mu_n(v_0 - v_n) + v_n(\omega_0 - \omega_n)]; \quad (4)$$

где u_0, v_0, ω_0 – компоненты вектора смещения атома в начале отсчета из положения равновесия; u_n, v_n, ω_n – компоненты вектора смещения атома, находящегося на n -ой координационной сфере, из положения равновесия; α_n и β_n есть радиальные и тангенциальные силовые постоянные; λ_n, μ_n, ν_n – направляющие косинусы отрезка соединяющего атом в начале отсчета с атомом, находящимся на n -ой координационной сфере. В Табл. 1 приведены координаты

Для расчета движения атома O выше приведенные выражения нужно подставить в уравнение, суммировать по индексу n , и решение ищутся в виде:

$$\begin{aligned} u_0 &= A_1 \exp(2\pi i v t); \\ v_0 &= A_2 \exp(2\pi i v t); \\ w_0 &= A_3 \exp(2\pi i v t); \\ u_n &= A_1 \exp(2\pi i v t - \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_n); \\ v_n &= A_2 \exp(2\pi i v t - \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_n); \\ w_n &= A_3 \exp(2\pi i v t - \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_n), \end{aligned}$$

где k — волновой вектор, \mathbf{r}_n – радиус-вектор атома с индексом n .

В настоящей работе мы вывели для ГПУ структуры элементы динамической матрицы через радиальные α_n и тангенциальные β_n ($n=1, \dots, 8$) силовые постоянные на первых восьми координационных сферах в виде:

$$\begin{aligned} D_{11} &= -\beta_1 \left\{ 6 - \left[4 \cos(\pi a q_x) e^{i \frac{\pi a}{\sqrt{3}} q_y} + 2 e^{-i \frac{2\pi a}{\sqrt{3}} q_y} \right] \cos(\pi c q_z) \right\} - \\ &\quad - (\alpha_1 - \beta_1) \frac{a^2}{\frac{a^2}{3} + \frac{c^2}{4}} \left\{ 1 - \cos(\pi a q_x) e^{i \frac{\pi a}{\sqrt{3}} q_y} \cos(\pi c q_z) \right\} - \\ &\quad - \beta_2 \left\{ 6 - 2 \cos(2\pi a q_x) - 4 \cos(\pi a q_x) \cos(\pi a \sqrt{3} q_y) \right\} - \\ &\quad - (\alpha_2 - \beta_2) \left\{ 2 [1 - \cos(2\pi a q_x)] + [1 - \cos(\pi a q_x) \cos(\pi a \sqrt{3} q_y)] \right\} - \\ &\quad - \beta_3 \left\{ 6 - \left[4 \cos(2\pi a q_x) e^{-i \frac{2\pi a}{\sqrt{3}} q_y} + 2 e^{i \frac{4\pi a}{\sqrt{3}} q_y} \right] \cos(\pi c q_z) \right\} - \\ &\quad - \frac{4a^2}{\frac{4a^2}{3} + \frac{c^2}{4}} (\alpha_3 - \beta_3) \left\{ 1 - \cos(2\pi a q_x) e^{-i \frac{2\pi a}{\sqrt{3}} q_y} \cos(\pi c q_z) \right\} - \\ &\quad - 2\beta_4 \{1 - \cos(2\pi c q_z)\} - \\ &\quad - \beta_5 \left\{ 12 - 4 \cos(\pi c q_z) \left[\cos(\pi a q_x) e^{-i \frac{5\pi a}{\sqrt{3}} q_y} + \cos(2\pi a k_x) e^{i \frac{4\pi a}{\sqrt{3}} q_y} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \cos(3\pi a q_x) e^{-i \frac{\pi a}{\sqrt{3}} q_y} \right] \right\} - \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & -(\alpha_5 - \beta_5) \frac{a^2}{\frac{7a^2}{3} + \frac{c^2}{4}} \left\{ \left[1 - \cos(\pi a q_x) e^{-i \frac{5\pi a}{\sqrt{3}} q_y} \right] \right. \\
 & \quad + 4 \left[1 - \cos(2\pi a q_x) e^{i \frac{4\pi a}{\sqrt{3}} q_y} \right] + \\
 & \quad \left. + 9 \left[1 - \cos(3\pi a q_x) e^{-i \frac{\pi a}{\sqrt{3}} q_y} \right] \right\} \cos(\pi c q_z) \\
 & - \beta_6 \{ 6 - 4 \cos(3\pi a q_x) \cos(\pi a \sqrt{3} q_y) - 2 \cos(2\pi a \sqrt{3} q_y) \} - \\
 & - 3(\alpha_6 - \beta_6) \{ 1 - \cos(3\pi a q_x) \cos(\pi a \sqrt{3} q_y) \} - \\
 & - \beta_7 \{ 12 - [4 \cos(2\pi a q_x) + 8 \cos(\pi a q_x) \cos(\pi a \sqrt{3} q_y)] \cos(2\pi c q_z) \} - \\
 & - (\alpha_7 - \beta_7) \frac{a^2}{a^2 + c^2} \{ 4[1 - \cos(2\pi a q_x)] \\
 & \quad + 2[1 - \cos(\pi a q_x) \cos(\pi a \sqrt{3} q_y)] \} \cos(2\pi c q_z) - \\
 & - \beta_8 \{ 6 - 2 \cos(4\pi a q_x) - 4 \cos(2\pi a q_x) \cos(\pi a \sqrt{3} q_y) \} - \\
 & - (\alpha_8 - \beta_8) \{ 2[1 - \cos(4\pi a q_x)] + [1 - \cos(2\pi a q_x) \cos(\pi a \sqrt{3} q_y)] \}; \\
 & D_{12} = -(\alpha_1 - \beta_1) \frac{ia^2}{\sqrt{3} \left(\frac{a^2}{3} + \frac{c^2}{4} \right)} \sin(\pi a q_x) e^{i \frac{\pi a}{\sqrt{3}} q_y} \cos(\pi c q_z) - \\
 & - (\alpha_2 - \beta_2) \sqrt{3} \sin(\pi a q_x) \sin(\pi a \sqrt{3} q_y) - \\
 & - (\alpha_3 - \beta_3) \frac{4ia^2}{\sqrt{3} \left(\frac{4a^2}{3} + \frac{c^2}{4} \right)} \sin(2\pi a q_x) e^{-i \frac{2\pi a}{\sqrt{3}} q_y} \cos(\pi c q_z) - (5) \\
 & - (\alpha_5 - \beta_5) \frac{ia^2}{\sqrt{3} \left(\frac{7a^2}{3} + \frac{c^2}{4} \right)} \left\{ 5 \sin(\pi a q_x) e^{-i \frac{5\pi a}{\sqrt{3}} q_y} - 8i \sin(2\pi a q_x) e^{i \frac{4\pi a}{\sqrt{3}} q_y} \right. \\
 & - \\
 & \left. - 3i \sin(3\pi a q_x) e^{i \frac{\pi a}{\sqrt{3}} q_y} \right\} \cos(\pi c q_z) \\
 & - \sqrt{3}(\alpha_6 - \beta_6) \sin(3\pi a q_x) \sin(\pi a \sqrt{3} q_y) - \\
 & - (\alpha_7 - \beta_7) \frac{2\sqrt{3}a^2}{a^2 + c^2} \sin(\pi a q_x) \sin(\pi a \sqrt{3} q_y) \cos(2\pi c q_z) - \\
 & - (\alpha_8 - \beta_8) \sqrt{3} \sin(2\pi a q_x) \sin(2\pi a \sqrt{3} q_y); \\
 & D_{13} = -(\alpha_1 - \beta_1) \frac{ac}{\left(\frac{a^2}{3} + \frac{c^2}{4} \right)} \sin(\pi a q_x) e^{i \frac{\pi a}{\sqrt{3}} q_y} \sin(\pi c q_z) -
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & -(\alpha_3 - \beta_3) \frac{2ac}{\left(\frac{4a^2}{3} + \frac{c^2}{4}\right)} \sin(2\pi a q_x) e^{i\frac{2\pi a}{\sqrt{3}} q_y} \sin(\pi c q_z) - (6) \\
 & -(\alpha_5 - \beta_5) \frac{ac}{\left(\frac{7a^2}{3} + \frac{c^2}{4}\right)} \left\{ \sin(\pi a q_x) e^{-i\frac{5\pi a}{\sqrt{3}} q_y} + 2\sin(2\pi a q_x) e^{i\frac{4\pi a}{\sqrt{3}} q_y} + \right. \\
 & \quad \left. + 3\sin(3\pi a q_x) e^{i\frac{\pi a}{\sqrt{3}} q_y} \right\} \sin(\pi c q_z) - \\
 & -(\alpha_7 - \beta_7) \frac{4ac}{a^2 + c^2} \left\{ \sin(2\pi a q_x) + \sin(\pi a q_x) \cos(\pi a \sqrt{3} q_y) \right\} \sin(2\pi c q_z); \\
 & D_{22} = -\beta_1 \left\{ 6 - \left[4\cos(\pi a q_x) e^{i\frac{\pi a}{\sqrt{3}} q_y} + 2e^{-i\frac{2\pi a}{\sqrt{3}} q_y} \right] \cos(\pi c q_z) \right\} - \\
 & -(\alpha_1 - \beta_1) \frac{a^2}{3\left(\frac{a^2}{3} + \frac{c^2}{4}\right)} \left\{ 2 \left[1 - e^{-i\frac{2\pi a}{\sqrt{3}} q_y} \right] \right. \\
 & \quad \left. + \left[1 - \cos(\pi a q_x) e^{i\frac{\pi a}{\sqrt{3}} q_y} \right] \right\} \cos(\pi c q_z) - \\
 & -\beta_2 \{ 6 - 2\cos(2\pi a q_x) - 4\cos(\pi a q_x) \cos(\pi a \sqrt{3} q_y) \} - (7) \\
 & -3(\alpha_2 - \beta_2) \{ 1 - \cos(\pi a q_x) \cos(\pi a \sqrt{3} q_y) \} - \\
 & -\beta_3 \left\{ 6 - \left[4\cos(2\pi a q_x) e^{-i\frac{2\pi a}{\sqrt{3}} q_y} + 2e^{i\frac{4\pi a}{\sqrt{3}} q_y} \right] \cos(\pi c q_z) \right\} - \\
 & -\frac{4a^2}{3\left(\frac{4a^2}{3} + \frac{c^2}{4}\right)} (\alpha_3 - \beta_3) \left\{ 1 - \cos(2\pi a q_x) e^{-i\frac{2\pi a}{\sqrt{3}} q_y} \cos(\pi c q_z) \right. \\
 & \quad \left. + 2 \left[1 - e^{i\frac{4\pi a}{\sqrt{3}} q_y} \cos(\pi c q_z) \right] \right\} - \\
 & -2\beta_4 \{ 1 - \cos(2\pi c q_z) \} - \\
 & -\beta_5 \left\{ 12 - 4\cos(\pi c q_z) \left[\cos(\pi a q_x) e^{-i\frac{5\pi a}{\sqrt{3}} q_y} + \cos(2\pi a q_x) e^{i\frac{4\pi a}{\sqrt{3}} q_y} \right. \right. \\
 & \quad \left. \left. + \cos(3\pi a q_x) e^{-i\frac{\pi a}{\sqrt{3}} q_y} \right] \right\} - \\
 & -(\alpha_5 - \beta_5) \frac{a^2}{\frac{7a^2}{3} + \frac{c^2}{4}} \left\{ \frac{25}{3} \left[1 - \cos(\pi a q_x) e^{-i\frac{5\pi a}{\sqrt{3}} q_y} \right] \right. \\
 & \quad \left. + \frac{16}{3} \left[1 - \cos(2\pi a q_x) e^{i\frac{4\pi a}{\sqrt{3}} q_y} \right] + \right. \\
 & \quad \left. + \frac{1}{3} \left[1 - \cos(3\pi a q_x) e^{-i\frac{\pi a}{\sqrt{3}} q_y} \right] \right\} \cos(\pi c q_z) -
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & -\beta_6\{6 - 4\cos(3\pi a q_x)\cos(\pi a\sqrt{3}q_y) - 2\cos(2\pi a\sqrt{3}q_y)\} - \\
 & -(\alpha_6 - \beta_6)\{[1 - \cos(3\pi a q_x)\cos(\pi a\sqrt{3}q_y)] + 2[1 - \cos(\pi a\sqrt{3}q_y)]\} - \\
 & -\beta_7\{12 - [4\cos(2\pi a q_x) + 8\cos(\pi a q_x)\cos(\pi a\sqrt{3}q_y)]\cos(2\pi c q_z)\} - \\
 & -(\alpha_7 - \beta_7)\frac{6a^2}{a^2 + c^2}\{1 - \cos(\pi a q_x)\cos(\pi a\sqrt{3}q_y)\cos(2\pi c q_z)\} - \\
 & -\beta_8\{6 - 2\cos(4\pi a q_x) - 4\cos(2\pi a q_x)\cos(\pi a\sqrt{3}q_y)\} - \\
 & -(\alpha_8 - \beta_8)\{3[1 - \cos(2\pi a q_x)\cos(\pi a\sqrt{3}q_y)]\}. \\
 D_{23} = & -(\alpha_1 - \beta_1)\frac{iac}{\sqrt{3}\left(\frac{a^2}{3} + \frac{c^2}{4}\right)}\left\{\cos(\pi a q_x)e^{i\frac{\pi a}{\sqrt{3}}q_y} - e^{-i\frac{2\pi a}{\sqrt{3}}q_y}\right\}\sin(\pi c q_z) \\
 & - \\
 & -\frac{2iac}{\sqrt{3}\left(\frac{4a^2}{3} + \frac{c^2}{4}\right)}(\alpha_3 - \beta_3)\left\{\cos(2\pi a q_x)e^{-i\frac{2\pi a}{\sqrt{3}}q_y} - e^{i\frac{4\pi a}{\sqrt{3}}q_y}\right\}\sin(\pi c q_z) - \quad (8) \\
 & -(\alpha_5 - \beta_5)\frac{iac}{\sqrt{3}\left(\frac{7a^2}{3} + \frac{c^2}{4}\right)}\left\{5\cos(\pi a q_x)e^{-i\frac{5\pi a}{\sqrt{3}}q_y} - 4\cos(2\pi a k_x)e^{i\frac{4\pi a}{\sqrt{3}}q_y}\right. \\
 & - \\
 & \left. + \cos(3\pi a q_x)e^{-i\frac{\pi a}{\sqrt{3}}q_y}\right\}\sin(\pi c q_z) - \\
 & -(\alpha_7 - \beta_7)\frac{4ac}{a^2 + c^2}\cos(\pi a q_x)\sin(\pi a\sqrt{3}q_y)\sin(2\pi c q_z); \\
 D_{33} = & -\beta_1\left\{6 - \left[4\cos(\pi a q_x)e^{i\frac{\pi a}{\sqrt{3}}q_y} + 2e^{-i\frac{2\pi a}{\sqrt{3}}q_y}\right]\cos(\pi c q_z)\right\} - \\
 & -(\alpha_1 - \beta_1)\frac{c^2}{4\left(\frac{a^2}{3} + \frac{c^2}{4}\right)}\left\{6\right. \\
 & \left. - \left[4\cos(\pi a q_x)e^{i\frac{\pi a}{\sqrt{3}}q_y} + 2e^{-i\frac{2\pi a}{\sqrt{3}}q_y}\right]\cos(\pi c q_z)\right\} - \\
 & -\beta_2\{6 - 2\cos(2\pi a q_x) - 4\cos(\pi a q_x)\cos(\pi a\sqrt{3}q_y)\} - (9) \\
 & -\beta_3\left\{6 - \left[4\cos(2\pi a q_x)e^{-i\frac{2\pi a}{\sqrt{3}}k_y} + 2e^{i\frac{4\pi a}{\sqrt{3}}q_y}\right]\cos(\pi c q_z)\right\} - \\
 & -\frac{4c^2}{4\left(\frac{4a^2}{3} + \frac{c^2}{4}\right)}(\alpha_3 - \beta_3)\left\{6\right. \\
 & \left. - \left[4\cos(2\pi a q_x)e^{-i\frac{2\pi a}{\sqrt{3}}q_y} + 2e^{i\frac{4\pi a}{\sqrt{3}}q_y}\right]\cos(\pi c q_z)\right\} \\
 & - 2\beta_4\{1 - \cos(2\pi c q_z)\} -
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & -\beta_5 \left\{ 12 - 4\cos(\pi c q_z) \left[\cos(\pi a q_x) e^{-i\frac{5\pi a}{\sqrt{3}} q_y} + \cos(2\pi a q_x) e^{i\frac{4\pi a}{\sqrt{3}} q_y} \right. \right. \\
 & \quad \left. \left. + \cos(3\pi a q_x) e^{-i\frac{\pi a}{\sqrt{3}} q_y} \right] \right\} - \\
 & -(\alpha_5 - \beta_5) \frac{c^2}{\frac{7a^2}{3} + \frac{c^2}{4}} \left\{ 3 - \left[\cos(\pi a q_x) e^{-i\frac{5\pi a}{\sqrt{3}} q_y} + \cos(2\pi a q_x) e^{i\frac{4\pi a}{\sqrt{3}} q_y} + \right. \right. \\
 & \left. \left. + \cos(3\pi a q_x) e^{-i\frac{\pi a}{\sqrt{3}} q_y} \right] \cos(\pi c q_z) \right\} \\
 & - \beta_6 \{ 6 - 4\cos(3\pi a q_x) \cos(\pi a \sqrt{3} q_y) - 2\cos(2\pi a \sqrt{3} q_y) \} - \\
 & - \beta_7 \{ 12 - [4\cos(2\pi a q_x) + 8\cos(\pi a q_x) \cos(\pi a \sqrt{3} q_y)] \cos(2\pi c q_z) \} - \\
 & - (\alpha_7 - \beta_7) \frac{c^2}{a^2 + c^2} \{ 12 \\
 & \quad - [4\cos(2\pi a q_x) + 8\cos(\pi a q_x) \cos(\pi a \sqrt{3} q_y)] \cos(2\pi c q_z) \} \\
 & - \\
 & - \beta_8 \{ 6 - 2\cos(4\pi a q_x) - 4\cos(2\pi a q_x) \cos(\pi a \sqrt{3} q_y) \}, \\
 & D_{12} = D_{21}; D_{13} = D_{31}; D_{23} = D_{32}, \tag{10}
 \end{aligned}$$

где a и c — параметры кристаллической структуры. Выражения (4)-(10) отличаются простотой, и с учетом первых трех-четырех слагаемых их можно привести к виду похожему выражениям для элементов динамической матрицы, выведенных в работе [8].

Из выражений (4)-(10) в длинноволновом приближении $q \rightarrow 0$ можно получить выражения для расчета упругих постоянных C_{11} , C_{12} , C_{13} , C_{33} и C_{44} . Для этого воспользуемся выражениями, представленными в [4], где элементы динамической матрицы определены через упругие постоянные:

$$\begin{pmatrix} D_{11} \\ D_{22} \\ D_{33} \\ D_{23} \\ D_{31} \\ D_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}) & C_{44} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}) & C_{11} & C_{44} & 0 & 0 & 0 \\ C_{44} & C_{44} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}(C_{13} + C_{44}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}(C_{13} + C_{44}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}(C_{13} + C_{44}) \end{pmatrix}$$

В результате получаем следующие выражения для упругих постоянных для кристаллов с ГПУ структурой с учетом радиальных α_i и тангенциальных β_i силовых постоянных на первых восьми координационных сферах:

$$\begin{aligned}
 c_{11} = \frac{1}{2\sqrt{3}c} & \left\{ 4\beta_1 + \frac{a^2}{\frac{a^2}{3} + \frac{c^2}{4}} (\alpha_1 - \beta_1) + 12\beta_2 + 9(\alpha_2 - \beta_2) + 16\beta_3 \right. \\
 & + \frac{16a^2}{\frac{4a^2}{3} + \frac{c^2}{4}} (\alpha_3 - \beta_3) + \\
 & + 56\beta_5 + \frac{96a^2}{\frac{7a^2}{3} + \frac{c^2}{4}} (\alpha_5 - \beta_5) + 36\beta_6 + 27(\alpha_6 - \beta_6) + 24\beta_7 \\
 & \left. + \frac{18a^2}{c^2 + a^2} (\alpha_7 - \beta_7) + 48\beta_8 + 33(\alpha_8 - \beta_8) \right\}; \\
 c_{44} = \frac{c}{2\sqrt{3}a^2} & \left\{ 6\beta_1 + \frac{a^2}{\frac{a^2}{3} + \frac{c^2}{4}} (\alpha_1 - \beta_1) + 6\beta_3 + \frac{4a^2}{\frac{4a^2}{3} + \frac{c^2}{4}} (\alpha_3 - \beta_3) \right. \\
 & + 8\beta_4 + 12\beta_5 + 48\beta_7 + \\
 & \left. + \frac{24a^2}{c^2 + a^2} (\alpha_7 - \beta_7) \right\}; (11) \\
 c_{33} = \frac{c}{2\sqrt{3}a^2} & \left\{ 6\beta_1 + \frac{6c^2}{4\left(\frac{a^2}{3} + \frac{c^2}{4}\right)} (\alpha_1 - \beta_1) + 6\beta_3 \right. \\
 & + \frac{6c^2}{4\left(\frac{4a^2}{3} + \frac{c^2}{4}\right)} (\alpha_3 - \beta_3) + 8\alpha_4 + 12\beta_5 + \\
 & \left. + \frac{3c^2}{\frac{7a^2}{3} + \frac{c^2}{4}} (\alpha_5 - \beta_5) + 48\beta_7 + \frac{48a^2}{c^2 + a^2} (\alpha_7 - \beta_7) \right\}; \\
 c_{11} - c_{12} = \frac{1}{c\sqrt{3}} & \left\{ 4\beta_1 + \frac{a^2}{3\left(\frac{a^2}{3} + \frac{c^2}{4}\right)} (\alpha_1 - \beta_1) + 12\beta_2 + 3(\alpha_2 - \beta_2) \right. \\
 & \left. + 16\beta_3 + \frac{16a^2}{3\left(\frac{4a^2}{3} + \frac{c^2}{4}\right)} (\alpha_3 - \beta_3) + \right.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &+56\beta_5 + \frac{100a^2}{3\left(\frac{7a^2}{3} + \frac{c^2}{4}\right)}(\alpha_5 - \beta_5) + 36\beta_6 + 9(\alpha_6 - \beta_6) + 24\beta_7 \\
 &\quad + \frac{6a^2}{c^2 + a^2}(\alpha_7 - \beta_7) + 48\beta_8 + 12(\alpha_8 - \beta_8)\}; \\
 c_{13} + c_{44} = &\frac{1}{a\sqrt{3}} \left\{ \frac{ac}{\frac{a^2}{3} + \frac{c^2}{4}}(\alpha_1 - \beta_1) + \frac{4ac}{\frac{4a^2}{3} + \frac{c^2}{4}}(\alpha_3 - \beta_3) + \frac{15ac}{\frac{7a^2}{3} + \frac{c^2}{4}}(\alpha_5 \right. \\
 &\quad \left. - \beta_5) + \frac{4ac}{c^2 + a^2}(\alpha_7 - \beta_7) \right\}.
 \end{aligned}$$

Вышеприведенные выражения (11) для упругих постоянных в некоторой степени схожи к выражениям (3), полученными в работе [8], если соотнести α_2 , β_2 к α' , β' .

Методика и результаты расчета силовых постоянных методом псевдопотенциала

В расчете силовых постоянных Mg, Ti, Zr, Hf, Co, Ru и Os методом псевдопотенциала с применением МППМ Анималу [10, 11] использовались параметры, взятые из работы [15].

В рамках теории псевдопотенциала парный потенциал межатомного взаимодействия атомов можно представить в виде:

$$V(r) = -\frac{Z^2 e^2}{r} - \frac{2Z^2 e^2}{\pi} \int_0^\infty G(q) \frac{\sin qr}{qr} dq. \quad (12)$$

Здесь Z — валентность, e — заряд электрона, q — модуль волнового вектора, r — межатомное расстояние, $G(q)$ — нормированная характеристическая функция:

$$G(q) = \left[\frac{4\pi Z e^2}{\Omega_0 q^2} \right]^{-2} \frac{W^{bare}(q)^2}{1-f(q)} (1 - 1/\varepsilon(q)), \quad (13)$$

где $W^{bare}(q)$ — неэкранированный ионный потенциал [10, 11], Ω — атомный объем,

$$\varepsilon(q) = 1 + [1 - f(q)] \frac{4\pi Z e^{*2}}{\Omega_0 q^2} \left(\frac{2}{3} E_F \right)^{-1} \left[\frac{1}{2} + \frac{4k_F^2 - q^2}{8k_F q} \ln \left| \frac{2k_F + q}{2k_F - q} \right| \right], \quad (14)$$

$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m^*}$, k_F — импульс Ферми, m^* — эффективная масса электрона, $e^{*2} = (1 + \alpha_{eff})e^2$, $f(q)$ — поправка на обмен и корреляцию электронов. Эта функция имеет вид по Хаббарду и Шэму [16, 17]:

$$f(q) = \frac{q^2}{2(q^2 + k_F^2 + k_S^2)}, k_S^2 = \frac{2k_F}{\pi}, \quad (15)$$

В случае центральных взаимодействий, исходя из межатомного потенциала $V(r)$, можно определить два типа силовых постоянных:

$$\frac{1}{r} \frac{dV}{dr} = -\frac{Z^2 e^2}{r^3} - \frac{2Z^2 e^2}{\pi r^2} \int_0^\infty G(q) \left(\cos qr - \frac{\sin qr}{qr} \right) dq, \quad (16)$$

$$\frac{d^2 V}{dr^2} = -\frac{2Z^2 e^2}{r^3} - \frac{2Z^2 e^2}{\pi r} \int_0^\infty G(q) \left(\frac{2\sin qr}{qr^2} - \frac{2\cos qr}{r} - q \sin qr \right) dq. \quad (17)$$

Эти силовые постоянные обозначены в определениях (2) как α_i и β_i .

В данной работе силовые постоянные межатомного взаимодействия ГПУ металлов Mg, Ti, Zr, Hf, Co, Ru и Os рассчитывались двумя разными методами: методом псевдопотенциала и решением системы уравнений (11) с применением экспериментальных значений упругих постоянных. В Табл. 1 и Табл. 2 приведены радиусы первых восьми координационных сфер и значения радиальных α_i и тангенциальных β_i силовых постоянных для Mg, Ti, Zr, Hf, Co, Ru и Os, рассчитанные методом псевдопотенциала, и помеченные как теоретические значения. Для сравнения в Табл. 1 и Табл. 2 приведены силовые постоянные тех же металлов, рассчитанные из выражений (11) с применением экспериментальных значений упругих постоянных [7, 16, 17], и помеченные как экспериментальные. Из данных приведенных таблиц можно заключить, что значения радиальных силовых постоянных α_i ($i=1,2$) на первых двух координационных сферах Mg, Ti, Zr, Hf, Co, рассчитанные методом псевдопотенциала, хорошо согласуются со значениями, полученными с применением упругих постоянных. Для Ru и Os можно констатировать только качественное согласие для сравниваемых значений силовых постоянных α_i ($i=1,2$). Для всех элементов, за исключением Ru, значения силовой постоянной β_1 на первой сфере, рассчитанные методом псевдопотенциала, по знаку согласуются со значениями, полученными из упругих постоянных. Для радиальной силовой постоянной на третьей координационной сфере α_3 не можем констатировать согласие значений, рассчитанных методом псевдопотенциала, со значениями, полученными с применением упругих постоянных, что видно из данных Табл. 1 и Табл. 2.

Это обстоятельство можно объяснить тем, что из экспериментальных значений C_{11} , C_{12} , C_{13} , C_{33} , C_{44} упругих постоянных с применением выражений (11) получаем только пять неизвестных параметров на первых трех координационных сферах. Между тем, из-за дальнего действия межатомных сил упругие постоянные могут зависеть от силовых постоянных на дальних сферах. Таким образом невозможность учета β_3 и силовых постоянных на дальних сферах, начиная с четвертой, может обусловить неточность значений силовых постоянных α_3 , β_2 , полученных с применением упругих постоянных. Для расчета силовых постоянных на дальних сферах может быть целесообразным добавить к выражениям (11) выражения для фононных частот, как это предпринято в работах [12, 13].

Таблица 1

Значения радиальных α_i и тангенциальных β_i силовых постоянных Mg, Ti, Zr, Hf и Co (10^{-3} Н/м) в зависимости от радиусов координационных сфер $R_i(\text{Å})$

Номер сферы i		1	2	3	4	5	6	7	8
Mg	R_i	3.197	3.210	4.530	5.210	5.552	5.560	6.119	6.420
	α_i –теор.	15431.3	14641.2	-1539.7	310.4	276.8	272.4	-165.5	-253.7
	α_i –эксп.	18095.3	17295.1	-2801.6					
	β_i –теор.	-20.8	40.2	56.3	-1.1	19.0	19.4	21.8	10.2
	β_i –эксп.	-57.1	-469.8						
Ti	R_i	2.894	2.951	4.133	4.679	5.079	5.111	5.532	5.902
	α_i –теор.	28580.6	25579.9	-2361.1	-2335.8	1401.5	1589.4	1178.9	-797.3
	α_i –эксп.	29564.1	24891.8	2447.6					
	β_i –теор.	-4875.4	-4253.7	381.3	-75.9	-94.2	-84.0	54.9	61.5
	β_i –эксп.	-1243.7	-3410.3						
Zr	R_i	3.176	3.223	4.525	5.147	5.555	5.582	6.073	6.446
	α_i –теор.	32315.9	23299.6	2243.1	-8404.1	-1335.2	-777.6	4190.7	887.9
	α_i –эксп.	30044.4	25444.8	484.2					
	β_i –теор.	-2117.4	-1681.2	919.6	154.5	-248.0	-251.9	-14.9	150.6
	β_i –эксп.	-1922.6	-473.5						
Hf	R_i	3.130	3.196	4.472	5.051	5.497	5.536	5.978	6.393
	α_i –теор.	31089.8	19881.1	450.2	-8100.3	-279.6	453.2	3929.4	34.5
	α_i –эксп.	34071.5	29116.7	3146.9					
	β_i –теор.	-2380.8	-1790.8	932.0	143.7	-240.7	-238.4	1.6	148.5
	β_i –эксп.	-601.4	-1622.2						
Co	R_i	2.497	2.507	3.538	4.070	4.337	4.342	4.780	5.014
	α_i –теор.	40172.0	38652.0	218.1	652.9	-4.2	-19.6	-720.8	-602.3
	α_i –эксп.	45686.0	42894.3	417.4					
	β_i –теор.	-3233.5	3063.0	-16.1	76.1	-4.2	92.3	41.3	7.2
	β_i –эксп.	-1783.5	-4750.7						

Таблица 2

Значения радиальных α_i и тангенциальных β_i силовых постоянных Ru и Os (10^{-3}Н/м) в зависимости от радиусов координационных сфер R_i (Å)

Номер сферы i		1	2	3	4	5	6	7	8
Ru	R_i	2.650	2.706	3.788	4.282	4.655	4.687	5.065	5.412
	α_i –теор.	143661.2	110849.1	11268.7	-20993.2	-532.8	1502.1	11866.8	377.8
	α_i –эксп.	92171.7	78438.2	-244.8					
	β_i –теор.	-19888.9	-16873.8	1782.9	263.6	-734.8	-726.5	7.5	455.9
	β_i –эксп.	641.8	-244.8						
Os	R_i	2.674	2.734	3.825	4.317	4.702	4.736	5.110	5.469
	α_i –теор.	95474.6	75129.6	3307.8	-23791.7	4158.4	6463.3	13604.0	-2269.3
	α_i –эксп.	173340.1	155996.1	-30936.1					
	β_i –теор.	-19105.4	-16827.4	2340.7	-43.0	-907.6	-862.2	148.0	549.6
	β_i –эксп.	-4169.5	5966.9						

Для верификации значений силовых постоянных, рассчитанных методом псевдопотенциала, мы рассчитали по ним упругие постоянные изучаемых металлов согласно выражениям (11). Результаты расчетов упругих постоянных C_{11} , C_{12} , C_{13} , C_{33} , C_{44} представлены в Табл. 3 при сравнении с экспериментальными данными [7, 16, 17]. Там же приведены результаты расчетов других авторов, которые применили выражения (1) в модели Борна-Кармана. Для магния результаты расчетов данной работы в целом удовлетворительно согласуются с результатами экспериментов [7, 16] и с расчетами [8, 9]. Для титана результаты наших расчетов упругих постоянных C_{13} и C_{44} наиболее отличаются от экспериментальных значений, что может быть обусловлено различием по знаку значения силовой постоянной α_3 , рассчитанной методом псевдопотенциала, от значения, полученного с применением упругих постоянных (Табл. 1). Для этого металла в расчетах [9] наиболее отличается от эксперимента [16] значение C_{11} . Результаты наших расчетов упругих постоянных циркония, проведенные с учетом силовых постоянных на первых трех координационных сферах, оказались наиболее схожими с экспериментальными данными [16], что представлено в Табл. 3. Из результатов расчетов [9] упругих постоянных циркония видно, что теоретические значения C_{11} и C_{33} на более чем 20% отличаются от экспериментальных значений. Подобное различие наблюдается в случае гафния, где расчетные значения C_{11} и C_{33} соответственно на 28 и 39% отличаются от экспериментальных значений. Для кобальта в целом можно констатировать удовлетворительное согласие теоретических и экспериментальных значений упругих постоянных. Для рутения теоретические значения C_{11} и C_{33} наиболее близки к экспериментальным значениям, а теоретические значения C_{12} , C_{13} в три раза превышают соответствующие экспериментальные значения, что может быть обусловлено неточностью использованных значений силовых постоянных. Из данных Табл. 2 видно, что для руте-

ния теоретические значения радиальных силовых постоянных α_i ($i = 1, 2$) соответственно на 56 и 41% отличаются от значений, которые рассчитаны с применением экспериментальных значений упругих постоянных. Похожее объяснение можно привести для осмия, для которого теоретические значения C_{33} , C_{44} наиболее близки к экспериментальным значениям, между тем как теоретическое значение C_{12} в два раза превышает экспериментальное значение.

Таблица 3
Упругие постоянные Mg, Ti, Zr, Hf, Co, Ru и Os (10^{11} Н/м²)

		C_{11}	C_{12}	C_{13}	C_{33}	C_{44}
Mg	[7] — эксперимент	0.83	0.32	0.19	0.97	0.18
	[16] -эксперимент	0.63	0.25	0.21	0.66	0.18
	[8] — расчет	0.59	0.26	0.21	0.62	0.16
	[9] — расчет	0.71	0.32	0.34	0.84	0.17
	Расчет (данная работа)	0.79	0.24	0.21	0.83	0.18
Ti	[16] — эксперимент	1.62	0.92	0.69	1.81	0.46
	[9] — расчет	2.17	0.81	0.75	2.06	0.59
	Расчет (данная работа)	1.75	1.18	1.01	1.93	0.17
Zr	[16] — эксперимент	1.44	0.72	0.65	1.65	0.32
	[9] — расчет	1.75	0.63	0.61	1.98	0.25
	Расчет (данная работа)	1.44	0.58	0.65	1.87	0.44
Hf	[17] — эксперимент	1.81	0.77	0.66	1.94	0.56
	Расчет (данная работа)	1.31	0.67	0.37	2.69	0.72
Co	[17] — эксперимент	2.95	1.59	1.11	3.35	0.71
	Расчет (данная работа)	2.65	1.27	1.14	2.99	0.49
Ru	[17] — эксперимент	5.63	1.88	1.68	6.24	1.81
	Расчет (данная работа)	7.71	5.46	5.19	6.31	1.26
Os	[17] — эксперимент	8.98	2.49	2.46	10.16	1.62
	Расчет (данная работа)	6.69	4.97	3.60	10.48	1.83

Заключение

Из результатов расчета упругих постоянных рассматриваемых металлов можно заключить, что наилучшее соответствие между теоретическими значениями и экспериментальными данными наблюдается для магния, титана, циркония и кобальта. Для этих металлов значения радиальных силовых постоянных на первых двух-трех координационных сферах, а также тангенциальной силовой постоянной на первой сфере, вычисленные методом псевдопотенциала согласуются со значениями, полученными с применением экспериментальных значений упругих постоянных. Поэтому можно заключить, что предложенные в данной работе выражения упругих постоянных через радиальные и тангенциальные силовые постоянные приемлемы не только для расчета упругих постоянных, но для

оценки значений силовых постоянных из экспериментальных данных упругих постоянных.

Благодарность

Данная работа выполнена в рамках проекта передовых исследований Монгольского государственного университета Р 2016-1127 и при финансовой поддержке проекта Фонда науки и технологии при Министерстве Науки, образования и культуры Монголии по теме “Изучение динамики решетки и упорядочения в интерметаллических твердых растворах”.

Литература

1. Кривоглаз М. А. Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов в неидеальных кристаллах. Киев, Наукова думка, 1983. 408 с.
2. Collins M. F. Lattice Dynamics of Magnesium // Proc. Phys. Soc. 1962. V. 80. P. 362–372
3. Shukla R. C. Simple method of deriving the elements of the tensor-force matrix for monoatomic cubic crystals // J. Chem. Phys. 1966. V. 45. P. 4178–4181.
4. Begbie G. H. Thermal scattering of X-rays by crystals. II The thermal scattering of cubic and close-packed hexagonal lattices // Proc. Roy. Soc. 1947. V. A188. P. 189
5. Slutsky L., Garland C. W. Lattice Dynamics of Hexagonal Close Packed Metals // J. Chem. Phys. 1962. V. 26. P. 7–793.
6. Collinz M. F. Lattice Dynamics of Magnesium // Proc. Phys. Soc. 1962. V. 80. P. 362–372.
7. Slutsky L., Garland C. W. Elastic constants of magnesium from 4.2K to 300 K // Phys. Rev. 1957. V. 107. P. 972–976.
8. Magana L. F., Vazquez G. J. Ab initio calculation of the elastic constants of magnesium // J. Phys.: Condens. matter. 1995. V. 7. L393-L396.
9. Силонов В. М., Глянченко И. А. Расчет упругих постоянных металлов с гексагональной плотной упаковкой // Вестник Московского Университета. Серия 3. Физика. Астрономия. 1998. С. 38–40.
10. Animalu A. O. E., Heine V. The screened potential for 25 elements // Phil. Mag. 1965. V. 12(20). P. 1249–1270.
11. Animalu A. O. E. Electronic structure of transition metals // J. Phys. Rev. 1973. V. 8 (8). P. 3542–3554.
12. Upadhyaya J. C., Verma M. P. Study of Phonon Dispersion in HCP Metals with Central Pair Potential Representing Ion-Ion Interactions // Phys. Rev. B. 1973. V. 8, № 2. P. 593–598.
13. Cavalheiro R., Shukla M. M. Extended Launay model for the lattice dynamics of HCP metals // Nuovocimento. 1975. V. 30B(1). P. 163–181.
14. Энхтор Л., Силонов В. М. Силовые и упругие постоянные металлов и сплавов // РЭНСИТ. Физика конденсированного состояния. 2015. Т. 10, № 1. С. 54–72.
15. Силонов В. М. Таблицы факторов псевдопотенциалов Анималу // Деп. ВИНТИ №1171-76. 1976. 24 с.
16. Францевич И. Н., Воронов Ф. Ф., Бакута С. А. Упругие постоянные и модули упругости: справочник. Киев: Наукова Думка, 1982. 286 с.
17. Chen Q., Sundman B. Calculation of Debye Temperature for crystalline structures — a case study on Ti, Zr, and Hf // Acta mater. 2001. V. 49. P. 947–961.

THE CALCULATION OF THE POWER AND THE ELASTIC CONSTANTS
OF METALS WITH A HEXAGONAL CLOSE-PACKED STRUCTURE

L. Ankhtor

Doctor of Technical Sciences, Professor,
Mongolian State University, Faculty of natural Sciences,
Department of Physics, Mongolia,
210646, Ulaanbaatar, Ich Surguuliin gudamzh-1.

R. Galbadrakh

Doctor of Physics and Mathematics, Professor,
Mongolian State University, Faculty of Natural Sciences,
Department of Physics, Mongolia,
210646, Ulaanbaatar, Ich Surguuliin gudamzh-1.

V. M. Silonov

Doctor of Physics and Mathematics, Professor,
Moscow State University, Faculty of Physics,
Department of Solid State Physics,
Russia, 119991, Moscow, Leninskie Gory 1, bld 2.

B. B. Damdinov

Doctor of Physics and Mathematics
Buryat State University, Faculty of Physics
Russia, Ulan-Ude
E-mail: dababa@mail.ru

In the De Laon model the expressions for the elements of the dynamic matrix of hexagonal close-packed structures are presented, of which formulas for the calculation of elastic constants C_{11} , C_{12} , C_{13} , C_{33} , C_{44} are derived in the long-wave approximation. The formulas were used for the calculations of the elastic constants Mg, Ti, Zr, Hf, Co, Ru and Os through the radial and tangential force constant of the interatomic interaction, the values of which were calculated by the method of pseudopotential for the first eight coordinative areas. The results of the calculations were compared with the corresponding experimental data of elastic constants. Also, using the obtained expressions from the experimental values of the elastic constants of the metals under consideration, the force constants for the first three coordinative spheres were calculated, which were compared with the results of calculations by the pseudopotential method.

Keywords: dynamic matrix, radial and tangential force constants, elastic constants, hexagonal close-packed metal structures, pseudopotential method, De Laine model