

УДК 539.3

© 2010 г. А.М. КРИВЦОВ, Е.А. ПОДОЛЬСКАЯ

МОДЕЛИРОВАНИЕ УПРУГИХ СВОЙСТВ КРИСТАЛЛОВ С ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ ПЛОТНОУПАКОВАННОЙ РЕШЕТКОЙ

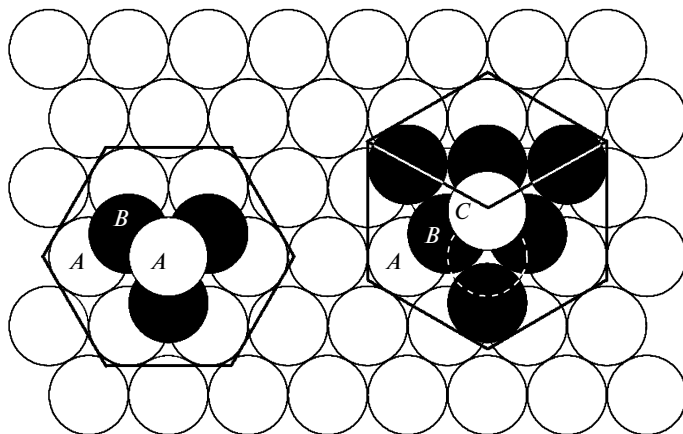
Работа посвящена аналитическому исследованию механических свойств идеальной гексагональной плотноупакованной (ГПУ) кристаллической решетки. Строятся три модели для описания упругих характеристик металлов с ГПУ решеткой. На примере девяти металлов с различной степенью геометрической неидеальности (бериллий, гафний, кадмий, кобальт, магний, рений, титан, цинк, цирконий) показано, что включение в модель моментного взаимодействия приводит к более точному описанию упругих свойств, чем учет геометрических особенностей конкретной решетки. Показано, что в зависимости от типа электронной оболочки эффективным является применение различных моделей: для d -элементов достаточно использовать двухпараметрическую силовую модель, в то время как для s -элементов требуется учет моментного взаимодействия.

Ключевые слова: ГПУ решетка, упругие свойства, моментное взаимодействие, электронная оболочка, модуль объемного сжатия.

1. Введение. Метод динамики частиц [1–3], согласно которому материал представляется в виде совокупности материальных точек или твердых тел, движущихся в соответствии с законами классической механики, в последние годы приобретает особую актуальность в связи с необходимостью описания механических процессов, происходящих на нанометровом масштабном уровне [4–10]. При этом метод динамики частиц имеет важное значение не только как вычислительный метод; он является также мощным аналитическим средством для исследования поведения вещества на наноуровне и для установления связи между микро- и макропараметрами материала [1, 11–15].

В связи с развитием нанотехнологий возникла необходимость определять механические свойства объектов, размеры которых сопоставимы с межатомным расстоянием, и, следовательно, потребовалось явно учитывать особенности их атомарной структуры. Многие наноструктуры или являются идеальными кристаллами, или содержат значительные монокристаллические участки, поэтому развитие математического аппарата и механических моделей деформирования кристаллических твердых тел необходимо для правильного описания и эксплуатации нанообъектов [16–18]. Кроме того, возможность связывать микро- и макропараметры важна для постановки задач компьютерного моделирования.

В данной работе рассматривается аналитическое моделирование одной из наиболее распространенных кристаллических структур: гексагональной плотноупакованной (ГПУ) решетки. В работе [17] был предложен анизотропный потенциал на основе потенциала Морзе, явным образом учитывающий направление вектора межатомной связи. Принимались во внимание связи в первых шести координационных сферах. Этот потенциал обеспечивает устойчивость и отражает симметрию гексагональных кристаллических решеток, но расчет с его помощью модулей упругости не для всех металлов приводит к корректным результатам. Кроме того, ввиду явного учета сим-



Фиг. 1

метрии решетки, такой потенциал невозможно применить при рассмотрении больших деформаций и структурных переходов. В данной работе предлагается ограничиться рассмотрением только первой координационной сферы, что значительно упрощает вычисления и оказывается достаточным для описания упругих свойств (также без перехода к большим деформациям).

Плотнупакованными называются решетки, в которых при заданном минимальном расстоянии между узлами достигается максимальная концентрация узлов в единице объема. Визуализировать подобную конструкцию можно с помощью твердых шаров, уложенных слоями в некотором объеме (фиг. 1). В отличие от связей в ковалентных кристаллах, которые являются направленными, связь в металлическом кристалле сферически-симметричная [19]. Поэтому в кристаллографии и заменяют реальный атом металла твердым шаром, радиус которого – так называемый металлический радиус атома – равен половине расстояния между ближайшими соседями. Чаще всего встречаются две плотноупакованные структуры. В кристаллографии они получили названия гранецентрированной кубической (ГЦК) и гексагональной плотноупакованной (ГПУ) решеток [19]. Различия между ГЦК (справа) и ГПУ (слева) решетками можно увидеть на фиг. 1.

ГПУ решетка обладает двухслойной периодичностью, последовательность ее слоев записывают в виде $...ABABAB...$, а ГЦК решетка – трехслойной, которую характеризует последовательность $...ABCABC...$ Плотность упаковки, которая представляет собой отношение суммарного объема, занимаемого собственно шарами в элементарной ячейке, к ее полному объему, у обеих решеток одинакова, однако у них есть существенные топологические различия. ГЦК решетка простая: все атомы (и A , и B , и C) находятся в одинаковом положении по отношению к своему окружению. ГПУ решетка сложная, двухатомная: по отношению к атомам в четных (B) и нечетных (A) слоях окружающие их атомы расположены по-разному. Условно будем говорить, что атомы из смежных слоев (A и B) являются атомами разного типа, хотя сами атомы одинаковы, а различается только геометрия их окружения. Любая сложная решетка может быть представлена как несколько вставленных друг в друга простых подрешеток. Для ГПУ решетки таких простых подрешеток две, они могут быть получены как объединение, соответственно, четных или нечетных слоев атомов. Кубической симметрией ГПУ решетка, в отличие от ГЦК, не обладает. Важность учета наличия двух атомов в элементарной ячейке ГПУ решетки рассматривалась, например, в работе [20] при разработке рентге-

нографической методики исследования ближнего порядка в поликристаллических ГПУ-сплавах.

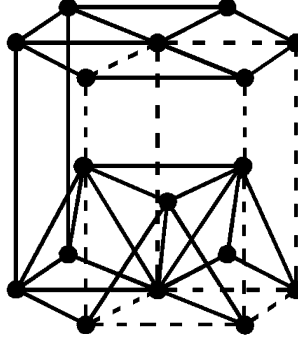
Кроме того, в реальных кристаллах расстояние между соседними атомами, принадлежащими одному и тому же или разным слоям, для ГЦК решетки всегда одинаковы (что является следствием кубической симметрии). Для ГПУ решетки эти расстояния в большей или меньшей степени различаются, так что реальная ГПУ решетка отвечает плотной упаковке эллипсоидов, а не шаров. Будем называть решетку реальных металлов геометрически неидеальной. В плотноупакованных структурах каждый атом имеет, очевидно, 12 ближайших соседей, называемых первой координационной сферой. В решетке реальных металлов эти 12 соседей, строго говоря, нельзя называть первой координационной сферой, поскольку 6 из них лежат к отсчетному атому ближе, чем другие. Тем не менее, во избежание путаницы при рассмотрении большого количества координационных сфер, к первой координационной сфере в геометрически неидеальной решетке будем относить те атомы, которые принадлежали бы ей, если бы решетка была идеальной.

2. Техника моделирования. Основные соотношения. Построение моделей проводится методом динамики частиц, согласно которому материал, т.е. сплошную среду, можно представить в виде совокупности материальных точек или твердых тел, взаимодействующих друг с другом по определенным законам. Таким образом осуществляется переход от континуальной модели к дискретной, что является одним из важнейших шагов на пути от микромира к макромиру. Важной задачей является получение связи между макроскопическими и микроскопическими упругими характеристиками, а именно, между компонентами тензора жесткости решетки и жесткостью связи между отдельными частицами. В данной работе построены две “силовые” и “моментная” модели.

При построении моделей используется прямое тензорное исчисление [21, 22]. Векторные величины обозначаются **a**, **b**, тензорные — **A**, **B**. Ранг тензора обозначается верхним индексом, расположенным слева от тензора, например: ${}^3\mathbf{C}$ — тензор третьего ранга. Для тензоров второго ранга этот индекс, как правило, опускается. Тензор ранга **n** представляет собой сумму слагаемых, каждое из которых является тензорным произведением **n** векторов. Тензорное произведение ассоциативно и дистрибутивно как по вектору, так и по числу (скалярному множителю), однако, оно не коммутативно: векторы в тензорном произведении нельзя переставлять местами.

В основе силовой модели лежит идея о том, что отдельные частицы, формирующие решетку, взаимодействуют посредством парного потенциала, зависящего только от расстояния между частицами, например, Леннарда-Джонса или Морзе, при этом конкретный вид потенциала не уточняется. В первом приближении каждая частица (атом, узел решетки) оказывается связана со своими 12 ближайшими соседями, образующими первую координационную сферу, линейными пружинами с жесткостью, которую и будем называть микроскопической. Достаточно очевидно, что для плотноупакованной решетки такая модель, основанная лишь на центральном взаимодействии, обладает устойчивостью. Тензор жесткости сложной двухатомной решетки при силовом взаимодействии может быть вычислен по формулам [1]:

$${}^4\mathbf{C} = {}^4\mathbf{C}_* - {}^3\mathbf{C} \cdot {}^2\mathbf{C}^{-1} \cdot {}^3\mathbf{C} \quad (2.1)$$



Фиг. 2

$$\begin{aligned}
 {}^2\mathbf{C} &= \frac{1}{V_0} \sum_{\alpha} v_{\alpha} c_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha}, & {}^3\mathbf{C} &= \frac{1}{V_0} \sum_{\alpha} v_{\alpha} a_{\alpha} c_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \\
 {}^4\mathbf{C}_{*} &= \frac{1}{V_0} \sum_{\alpha} a_{\alpha}^2 c_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha}
 \end{aligned} \tag{2.2}$$

где \mathbf{n}_{α} — орты направления связей, a_{α} и c_{α} — длины и жесткости связей, $v_{\alpha} = 0$, если взаимодействуют атомы одного типа, $v_{\alpha} = 1$ — для атомов разного типа, V_0 — объем элементарной ячейки. Для ГПУ решетки это прямая призма, в основании которой лежит ромб с углом 60 градусов (выделена пунктиром на фиг. 2). Суммирование ведется по всем атомам, с которыми взаимодействует отсчетный атом. Тип отсчетного атома не важен.

Формулы (2.1), (2.2) получены в предположении, что в равновесном состоянии кристалла силы взаимодействия между атомами обращаются в нуль (или пренебрежимо малы). Деформирование сложной решетки складывается из деформирования подрешеток и их смещения друг относительно друга. Тензор ${}^4\mathbf{C}_{*}$ характеризует жесткость кристалла без учета смещения подрешеток, тензор ${}^2\mathbf{C}$ — жесткость по отношению к смещению подрешеток, ${}^3\mathbf{C}$ описывает взаимное влияние двух видов деформирования.

Описание при помощи моментного (нецентрального) взаимодействия равносильно введению вместо пружин стержней, обладающих как продольной, так и поперечной жесткостью. В работе [23] были получены формулы для тензоров жесткости двухатомной решетки при моментном взаимодействии:

$$\begin{aligned}
 {}^2\mathbf{C} &= \frac{1}{V_0} \sum_{\alpha} v_{\alpha} [(c_A - c_D) \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} + c_D \mathbf{E}] \\
 {}^3\mathbf{C} &= \frac{c_A - c_D}{V_0} \sum_{\alpha} v_{\alpha} a_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \\
 {}^4\mathbf{C}_{*} &= \frac{1}{V_0} \sum_{\alpha} [(c_A - c_D) a_{\alpha}^2 \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} + c_D \mathbf{n}_{\alpha} \mathbf{E} \mathbf{n}_{\alpha}]^S
 \end{aligned} \tag{2.3}$$

где c_A и c_D — продольная и поперечная жесткости связи, \mathbf{E} — единичный тензор второго ранга. Символ S означает симметризацию по всем векторам, входящим в тензорное произведение.

3. Однопараметрическая силовая модель. Рассмотрим простейшую модель идеальной ГПУ решетки: расстояние между любым атомом и всеми его соседями по первой координационной сфере одинаково, одинакова и жесткость связи между ними. Такая модель является однопараметрической, так как в ней фигурирует одна микроскопическая упругая характеристика.

Для ГПУ решетки положим, что при взаимодействии ближайших соседей в одном слое $v_\alpha = 0$ (для $\alpha = 1-6$), а при взаимодействии ближайших соседей в смежных слоях $v_\alpha = 1$ (для $\alpha = 7-12$).

Тогда формулы (2.2) принимают вид

$$\begin{aligned} {}^2\mathbf{C} &= \frac{c}{V_0} \sum_{\alpha=7}^{12} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha, & {}^3\mathbf{C} &= \frac{ca}{V_0} \sum_{\alpha=7}^{12} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \\ {}^4\mathbf{C}_* &= \frac{ca^2}{V_0} \sum_{\alpha=1}^{12} \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha, & V_0 &= \sqrt{2}a^3 \end{aligned} \quad (3.1)$$

где a и c – длина и жесткость связи.

Введем ортонормированный базис так, чтобы векторы \mathbf{i}, \mathbf{j} лежали в плоскости слоя атомов, а вектор \mathbf{k} был направлен перпендикулярно слою.

Тогда векторы \mathbf{n}_α могут быть представлены в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{n}_{1,4} &= \pm \mathbf{i}, & \mathbf{n}_{8,11} &= \frac{\sqrt{3}}{3} \mathbf{j} \pm \frac{\sqrt{3}}{6} \mathbf{k} \\ \mathbf{n}_{2,3,5,6} &= \pm \frac{1}{2} \mathbf{i} \pm \frac{\sqrt{3}}{2} \mathbf{j}, & \mathbf{n}_{7,9,10,12} &= \pm \frac{1}{2} \mathbf{i} - \frac{\sqrt{3}}{6} \mathbf{j} \pm \frac{\sqrt{6}}{3} \mathbf{k} \end{aligned} \quad (3.2)$$

Подставляя полученные выражения в формулы (3.1), получим

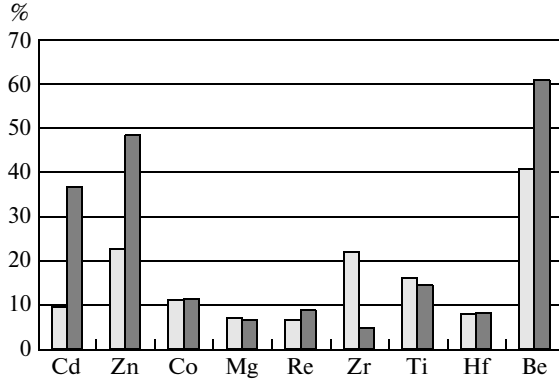
$$\begin{aligned} {}^2\mathbf{C} &= \frac{c}{V_0} (\tilde{\mathbf{E}} + 4\mathbf{k}\mathbf{k}), & {}^3\mathbf{C} &= \frac{\sqrt{3}ca^3}{6V_0} \mathbf{J} \\ {}^4\mathbf{C}_* &= \frac{ca^2}{V_0} \left[\frac{5}{2} (\tilde{\mathbf{E}}\tilde{\mathbf{E}})^S + 4(\tilde{\mathbf{E}}\mathbf{k}\mathbf{k})^S + \frac{8}{3} \mathbf{k}\mathbf{k}\mathbf{k}\mathbf{k} \right] \\ \tilde{\mathbf{E}} &= \mathbf{i}\mathbf{i} + \mathbf{j}\mathbf{j}, & {}^3\mathbf{J} &= \mathbf{j}\mathbf{j}\mathbf{j} - 3(\mathbf{i}\mathbf{j})^S \end{aligned} \quad (3.3)$$

Символ S означает симметризацию по всем входящим в тензорное произведение векторам, в частности

$$\begin{aligned} (\mathbf{i}\mathbf{j})^S &= 1/3(\mathbf{i}\mathbf{j} + \mathbf{j}\mathbf{i} + \mathbf{j}\mathbf{i}), & (\tilde{\mathbf{E}}\tilde{\mathbf{E}})^S &= 1/3(\tilde{\mathbf{J}}_1 + \tilde{\mathbf{J}}_{23}) \\ \tilde{\mathbf{J}}_1 &= \tilde{\mathbf{E}}\tilde{\mathbf{E}}, & \tilde{\mathbf{J}}_{23} &= 2\mathbf{i}\mathbf{i}\mathbf{i} + 2\mathbf{j}\mathbf{j}\mathbf{j} + \mathbf{i}\mathbf{j}\mathbf{i} + \mathbf{j}\mathbf{i}\mathbf{j} + \mathbf{i}\mathbf{j}\mathbf{j} + \mathbf{j}\mathbf{i}\mathbf{i} \\ (\tilde{\mathbf{E}}\mathbf{k}\mathbf{k})^S &= 1/6(\tilde{\mathbf{E}}\mathbf{k}\mathbf{k} + \mathbf{k}\tilde{\mathbf{E}}\mathbf{k} + \mathbf{k}\mathbf{k}\tilde{\mathbf{E}} + \mathbf{i}\mathbf{k}\mathbf{i}\mathbf{k} + \mathbf{j}\mathbf{k}\mathbf{j}\mathbf{k} + \mathbf{k}\mathbf{i}\mathbf{k}\mathbf{i} + \mathbf{k}\mathbf{j}\mathbf{k}\mathbf{j} + \mathbf{i}\mathbf{k}\mathbf{k}\mathbf{i} + \mathbf{j}\mathbf{k}\mathbf{k}\mathbf{j}) \end{aligned} \quad (3.4)$$

Из геометрических соображений следует, что тензор жесткости ${}^4\mathbf{C}_*$, задаваемый формулой (3.3), является тензором жесткости ГЦК решетки при взаимодействии ближайших соседей. Второе слагаемое в формуле (2.1) может быть вычислено как

$${}^3\mathbf{C} \cdot {}^2\mathbf{C}^{-1} \cdot {}^3\mathbf{C} = \frac{1}{12} \frac{ca^2}{V_0} {}^3\mathbf{J} \cdot {}^3\mathbf{J} = \frac{1}{12} \frac{ca^2}{V_0} (\tilde{\mathbf{J}}_{23} - \tilde{\mathbf{J}}_1) \quad (3.5)$$



Фиг. 3

Тогда для тензора жесткости ГПУ решетки, согласно формуле (2.1), получаем

$${}^4\mathbf{C} = \frac{ca^2}{V_0} \left[\frac{11}{12} \tilde{\mathbf{J}}_1 + \frac{3}{4} \tilde{\mathbf{J}}_{23} + 4(\tilde{\mathbf{E}}\mathbf{k}\mathbf{k})^s + \frac{8}{3} \mathbf{k}\mathbf{k}\mathbf{k}\mathbf{k} \right] \quad (3.6)$$

На основании (3.6) получаем аналитические выражения компонент тензора жесткости (в трехмерном случае ему соответствует матрица 6×6) через жесткость и длину связи:

$$\begin{aligned} C_{11} = C_{22} &= \frac{29\sqrt{2}c}{24a}, & C_{33} &= \frac{4\sqrt{2}c}{3a}, & C_{12} &= \frac{11\sqrt{2}c}{24a} \\ C_{13} = C_{23} = C_{44} = C_{55} &= \frac{\sqrt{2}c}{3a}, & C_{66} &= \frac{3\sqrt{2}c}{8a} \end{aligned} \quad (3.7)$$

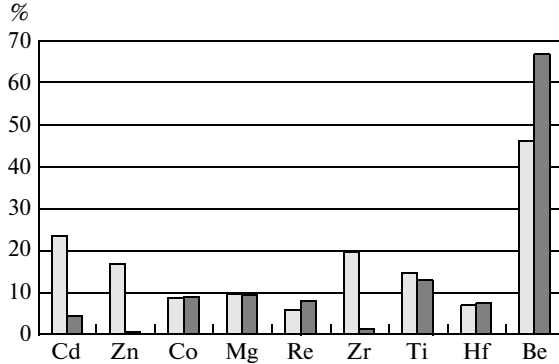
Здесь $C_{2323} = C_{44}$, $C_{3131} = C_{55}$, $C_{1212} = C_{66}$.

Остальные компоненты могут быть получены из приведенных выше перестановкой индексов, например, $C_{21} = C_{12}$. Модуль объемного сжатия определяется по формуле

$$\mathbf{K}^{(1)} = \frac{1}{9} \mathbf{E} \cdot \cdot {}^4\mathbf{C} \cdot \cdot \mathbf{E} = \frac{2\sqrt{2}c}{3a} \quad (3.8)$$

Далее, для ряда ГПУ металлов (бериллий, гафний, кадмий, кобальт, магний, рений, титан, цинк, цирконий) на основании экспериментальных данных [17] для компоненты тензора жесткости C_{11} и длины связи a была вычислена жесткость связи c , а затем осуществлена следующая проверка: два экспериментальных значения модуля объемного сжатия K и \tilde{K} [17, 24] сравнивались с модулем объемного сжатия $K^{(1)}$, вычисленным по формуле (3.8). Поскольку разница между K и \tilde{K} находится в пределах 20%, то удовлетворительным считался результат, отклоняющийся от обоих значений не более, чем на 20%. Этот критерий выполняется для металлов, у которых длины связи приблизительно одинаковы по всем направлениям (фиг. 3). На фиг. 3 светло-серым показано относительное отклонение $|K^{(1)} - K|/K$, темно-серым $|K^{(1)} - \tilde{K}|/\tilde{K}$.

4. Двухпараметрическая силовая модель. Обратимся к модели, учитывающей геометрическую неидеальность решетки различных металлов, в которой расстояние между



Фиг. 4

атомами, лежащими в одном слое, отличается от расстояния между атомами из смежных слоев. Таким образом, в рассмотрение вводятся две длины связи, и, соответственно, две жесткости связи, поэтому модель становится двухпараметрической. Так же, как и при построении однопараметрической силовой модели, получаем аналитические выражения компонент тензора жесткости и модуля объемного сжатия

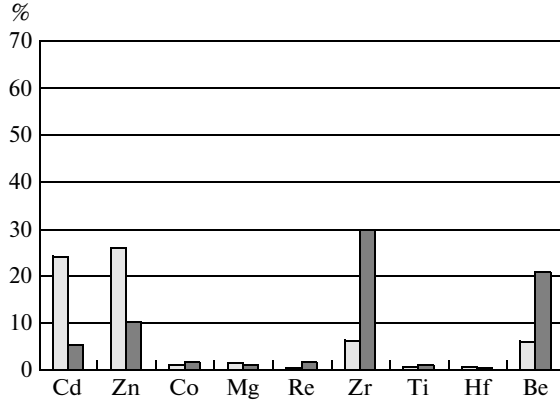
$$\begin{aligned}
 C_{11} &= \frac{\sqrt{3}}{3a_0\eta} \left(\frac{9}{2}c_0 + \frac{4}{4+3\eta^2}c \right), & C_{13} &= C_{55} = \frac{2\sqrt{3}\eta c}{a_0(4+3\eta^2)} \\
 C_{12} &= \frac{\sqrt{3}}{3a_0\eta} \left(\frac{3}{2}c_0 + \frac{4}{4+3\eta^2}c \right), & C_{33} &= \frac{3\sqrt{3}\eta^3 c}{a_0(4+3\eta^2)} \\
 K^{(2)} &= \frac{\sqrt{3}}{9a_0\eta} \left(4c_0 + \frac{4+3\eta^2}{3}c \right), & C_{66} &= \frac{\sqrt{3}c_0}{2a_0\eta}
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

где a_0 и c_0 – длина и жесткость связи между соседними атомами, принадлежащими одному слою; a и c – длина и жесткость связи между соседними атомами, принадлежащими различным слоям; $\eta = 2h/a_0$, $h = \sqrt{a^2 - a_0^2/3}$ – расстояние между соседними слоями (в случае идеальной геометрии $\eta = \eta_0 = 2\sqrt{2/3}$).

Далее, на основании экспериментальных данных [17] для компонент тензора жесткости C_{11} , C_{33} и длины связи a_0 были вычислены жесткости связи c_0 и c , а затем проведено сравнение модулей объемного сжатия (фиг. 4). На фиг. 4 светло-серым показано относительное отклонение $|K^{(2)} - K|/K$, темно-серым $|K^{(2)} - \tilde{K}|/\tilde{K}$. Здесь K и \tilde{K} – экспериментальные значения [17, 24], $K^{(2)}$ определяется из (4.1).

Оказалось, что учет геометрической неидеальности помог сблизить экспериментальные и расчетные значения этого модуля, особенно для тех металлов, у которых длины связи по разным направлениям отличаются на 13–15% (цинк, кадмий). В ходе анализа обеих силовых моделей было замечено, что жесткость связи тем меньше, чем больше длина связи.

Исключение из рассмотренных металлов составил лишь бериллий, для которого обе силовые модели дают расхождение в 2–3 раза больше, чем принятое допустимое. Известно, что большая часть рассмотренных ГПУ металлов относится к d -элементам,



Фиг. 5

во взаимодействии которых участвует как внешний, так и предвнешний электронный слой. Бериллий же имеет всего две электронные оболочки и относится к s -элементам.

5. Моментная модель. Рассмотрим теперь моментную модель идеальной ГПУ решетки. Она также является двухпараметрической, поскольку вместо пружин вводятся стержни, обладающие жесткостью как на растяжение, так и на изгиб.

С помощью формул (2.1) и (2.3) вычисляем компоненты тензора жесткости

$$\begin{aligned}
 C_{11} &= \frac{\sqrt{2}}{4a} \left(5c_A + 3c_D - \frac{(c_A - c_D)^2}{6(c_A + 5c_D)} \right), & C_{13} &= \frac{\sqrt{2}}{3a} (c_A - c_D) \\
 C_{12} &= \frac{\sqrt{2}(c_A - c_D)(11c_A + 49c_D)}{24a(c_A + 5c_D)}, & C_{33} &= \frac{2\sqrt{2}}{3a} (2c_A + c_D) \\
 C_{66} &= \frac{\sqrt{2}}{12a} \left(5c_A + 7c_D - \frac{(c_A - c_D)^2}{2(c_A + 5c_D)} \right), & C_{44} &= \frac{\sqrt{2}}{3a} (c_A + 2c_D) \\
 K^{(3)} &= 2\sqrt{2}c_A/(3a)
 \end{aligned} \tag{5.1}$$

где c_A и c_D – продольная и поперечная жесткости связи, a – длина связи.

Сравнение с экспериментальными данными показало, что моментная модель работает лучше, чем однопараметрическая для всех металлов, и лучше, чем двухпараметрическая для всех, кроме цинка и кадмия, у которых слишком сильна геометрическая неидеальность (фиг. 5). На фиг. 5 светло-серым показано относительное отклонение $|K^{(3)} - K|/K$, темно-серым $|\tilde{K}^{(3)} - \tilde{K}|/\tilde{K}$. Здесь K и \tilde{K} – экспериментальные значения [17, 24], $K^{(3)}$ определяется из (5.1).

Важным результатом является то, что эта модель позволяет описать бериллий.

6. Результаты и выводы. В таблице приведены результаты расчетов для ряда ГПУ металлов. Обозначено: $\zeta = (\eta - \eta_0)/\eta_0$ – безразмерный параметр, характеризующий геометрию решетки (для геометрически идеальной решетки $\zeta = 0$); $c^{(1)}$ – жесткость межатомной связи, вычисленная на основе однопараметрической модели; $c_0^{(2)}$ и $c^{(2)}$ – жесткости связи в плоскости слоя и между слоями соответственно (двухпараметриче-

	Металл (группа, подгруппа)	ζ , %	$c^{(1)}$, N/m	$c_0^{(2)}$, N/m	$c^{(2)}/c_0^{(2)}$	c_A , N/m	c_D/c_A
I	Cd (II B)	15.49	12.6	15.4	0.262	8.7	-0.893
	Zn (II B)	13.67	15.7	18.9	0.232	9.5	-0.863
II	Co (VIII B)	-0.006	28.2	28.1	1.062	31.3	-0.096
	Mg (II A)	-0.55	7.0	7.0	0.946	7.4	-0.243
	Re (VII B)	-1.11	61.8	60.8	1.045	66.7	-0.129
III	Zr (IV B)	-2.48	16.9	16.3	1.127	23.1	-0.476
	Ti (IV B)	-2.72	17.5	16.9	1.096	20.8	-0.298
	Hf (IV B)	-3.06	21.1	20.3	1.081	23.2	-0.207
	Be (II A)	-3.25	24.4	23.2	1.156	18.4	0.766

ская силовая модель); c_A и c_D – жесткости продольной и поперечной связей соответственно (моментная модель). Все жесткости определялись на основании экспериментальных данных для C_{11} и C_{33} с учетом известных размеров элементарной ячейки [17, 24].

В зависимости от значения параметра ζ , рассмотренные металлы можно разделить на три группы, обозначенные в таблице римскими цифрами I, II и III. Для первой группы (Cd и Zn) выполняется неравенство $\zeta > 0$ (решетка вытянута вдоль вертикальной оси симметрии), и жесткость связи, выходящей из плоскости, примерно в 4 раза меньше жесткости связи, лежащей в плоскости. Для второй группы (Mg, Co и Re) можно считать $\zeta \approx 0$, и разница между $c^{(2)}$ и $c_0^{(2)}$ составляет около 5%. Для третьей группы (Zr, Ti, Hf) имеем $\zeta < 0$ (решетка сжата вдоль вертикальной оси симметрии), и разница между $c^{(2)}$ и $c_0^{(2)}$ возрастает до 8–16%.

В моментной модели для всех рассмотренных металлов, кроме бериллия, жесткость поперечной связи получилась, во-первых, меньше, чем жесткость продольной связи, во-вторых, отрицательной. Таким образом, введение моментного взаимодействия немного дестабилизировало решетку (хотя устойчивость не была потеряна), видимо, для компенсации неучтенной геометрической неидеальности. Отрицательность c_D может свидетельствовать о ненаправленности металлической связи. В случае бериллия поперечная жесткость положительна.

Таким образом, можно сделать следующие выводы: во-первых, правильный выбор взаимодействия в большинстве случаев важнее, чем учет геометрических особенностей конкретной решетки; во-вторых, выбор взаимодействия зависит от типа электронной оболочки металла, в частности, d -элементы достаточно точно могут быть описаны чисто силовыми моделями.

Работа выполнена при поддержке гранта правительства Санкт-Петербурга (решение от 20.06.08 № 68), грантов РФФИ 08-01-00865-а и 09-01-12096-офи-м.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кривцов А.М. Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой. М.: Физматлит, 2007. 301 с.
2. Hockney R.W., Eastwood J.W. Computer simulation using particles. N.Y.: A. Hilger, 1988. 540 p.
3. Allen M.P., Tildesley A.K. Computer Simulation of Liquids. Oxford: Clarendon Press, 1987. 385 p.
4. Гольдштейн Р.В., Ченцов А.В. Дискретно-континуальная модель нанотрубки // Изв. РАН. МТТ. 2005. № 4. С. 57–74.

5. Гольдштейн Р.В., Городцов В.А., Лисовенко Д.С. Мезомеханика многослойных углеродных нанотрубок и наносуов // Физическая мезомеханика. 2008. Т. 11. № 6. С. 25–42.
6. Кривцов А.М., Морозов Н.Ф. Аномалии механических характеристик наноразмерных объектов // Докл. РАН. 2001. Т. 381. № 3. С. 345–347.
7. Гудилин Е.А., Гаршев А.В., Баранчиков А.Е. и др. Богатство Наномира. Фоторепортаж из глубин вещества // Под ред. Ю.Д. Третьякова. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2009. 171 с.
8. Kuksin A.Yu., Norman G.E., Stegailov V.V., Yanilkin A.V. Molecular simulation as a scientific base of nanotechnologies in power engineering // J. Eng. Thermophys. 2009. V. 18. № 3. P. 197–226.
9. Аннин Б.Д., Коробейников С.Н., Бабичев А.В. Компьютерное моделирование выпучивания нанотрубки при кручении // Сиб. ж. индустр. математики. 2008. Т. 11. № 1. С. 3–22.
10. Пул-мл. Ч., Оуэнс Ф. Нанотехнологии. Издание 4-е, исправленное и дополненное. М.: Техносфера, 2009. 335 с.
11. Кривцов А.М. Упругие свойства одноатомных и двухатомных кристаллов. СПб.: Изд-во Политех. ун-та, 2009. 124 с.
12. Беринский И.Е., Двас Н.Г., Кривцов А.М. и др. Теоретическая механика. Упругие свойства одноатомных и двухатомных кристаллов // Под ред. А.М. Кривцова. СПб.: Изд-во Политех. ун-та, 2009. 144 с.
13. Chen Y. Local stress and heat flux in atomistic systems involving threebody forces // J. Chem. Phys. 2006. V. 124. P. 054113.
14. Zimmerman J.A., Jones R.E., Templeton J.A. A material frame approach for evaluating continuum variables in atomistic simulations // J. Comp. Phys. 2010. V. 229. P. 2364–2389.
15. Fomin V.M., Golovnev I.F., Utkin A.V. Relation between the atomistic picture and continuum mechanics description of detonating solid-state explosives // Shock Waves. 2003. V. 13. № 1. P. 155–165.
16. Иванова Е.А., Кривцов А.М., Морозов Н.Ф., Фирсова А.Д. Описание кристаллической упаковки частиц с учетом моментных взаимодействий // Изв. РАН. МТТ. 2003. № 4. С. 110–127.
17. Баранов М.А., Дубов Е.А., Дятлова И.В., Черных Е.В. Атомно-дискретное описание влияния анизотропных межатомных взаимодействий на упругие свойства ГПУ металлов // Физика твердого тела. 2004. Т. 46. № 2. С. 212–217.
18. Головнева Е.И., Головнев И.Ф., Фомин В.М. Моделирование квазистатических процессов в кристаллах методом молекулярной динамики // Физическая мезомеханика. 2003. Т. 6. № 6. С. 5–10.
19. Васильев Д.М. Физическая кристаллография. М.: Metallurgy, 1981. 248 с.
20. Силонов В.М., Евлюхина Е.В., Красько О.В., Евлюхин А.Б. Влияние межатомных корреляционных эффектов на ближний порядок в поликристаллических ГПУ-сплавах // Физика твердого тела. 1999. Т. 41. № 12. С. 2009–2015.
21. Жилин П.А. Векторы и тензоры второго ранга в трехмерном пространстве. СПб.: Нестор, 2001. 276 с.
22. Лурье А.И. Нелинейная теория упругости. М.: Наука, 1980. 512 с.
23. Иванова Е.А., Кривцов А.М., Морозов Н.Ф. Получение макроскопических соотношений упругости сложных кристаллических решеток при учете моментных взаимодействий на микроуровне // ПММ. 2007. Т. 71. Вып. 4. С. 595–615.
24. Физические величины. Справочник // Под ред. Григорьева И.С. и Мейлихова Е.З. М.: Энергоатомиздат, 1991. 1232 с.