

УДК 539.2

РАСЧЕТ СИЛОВЫХ И УПРУГИХ ПОСТОЯННЫХ АЛЮМИНИЯ

В. М. Силонов, М. В. Шанькова

(кафедра физики твердого тела)

E-mail: sols333@phys.msu.ru

Рассчитаны упругие постоянные алюминия. Расчет основан на вычислении методом модельного потенциала десяти радиальных и десяти тангенциальных силовых постоянных. Значения упругих постоянных алюминия удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными.

В [1] предложена модель, основанная на расчете силовых постоянных (СП), позволяющая рассчитать фоновые спектры, упругие постоянные кристаллов и другие характеристики. В [2–5] были предприняты попытки расчета силовых и упругих постоянных никеля и ряда сплавов методом модельного потенциала [6]. Однако для алюминия подобные расчеты не проводились. В [7–14] приведены выражения поправок на обмен и корреляцию, различным образом зависящие от волнового вектора. Их влияние на рассчитываемые значения упругих постоянных ранее также не оценивалось.

Целью настоящей работы было изучение влияния поправок на обмен и корреляцию на рассчитываемые значения силовых и упругих постоянных алюминия.

В рамках теории псевдопотенциала энергию межатомного взаимодействия атомов кристалла можно представить в виде [15]

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

где Z — валентность, e — заряд электрона, $G(q)$ — нормированная характеристическая функция

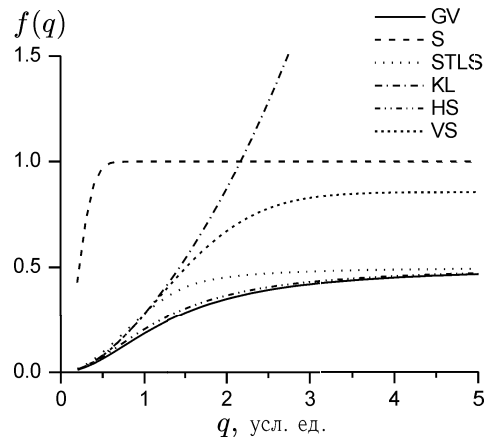
$$G(q) = - \left(\frac{4\pi Z e^2}{\Omega_0 q^2} \right)^{-2} \frac{|w^0(q)|^2}{\varepsilon(q)} [\varepsilon(q) - 1],$$

где Ω_0 — атомный объем, $\varepsilon(q)$ — диэлектрическая проницаемость с учетом эффектов обмена и корреляции, $w^0(q)$ — неэкранированный ионный потенциал.

В случае нецентрального взаимодействия из выражения для межатомного потенциала $V(r)$ можно определить два типа независимых силовых постоянных [15]: $\beta_i = \left(\frac{d^2 V}{dr^2} \right)_{r_i}$ — тангенциальные силовые постоянные, $\alpha_i = \left(\frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \right)_{r_i}$ — радиальные силовые постоянные, где индекс i обозначает номер коор-

динационной сферы, на которой расположен атом. Выражения, связывающие упругие постоянные с силовыми, приведены в [2].

Следует отметить, что рассчитываемые СП сильно зависят от точности определения радиусов координационных сфер, т.е. от точности измерения параметров кристаллической решетки. Значения параметра кристаллической решетки алюминия принимались равными 4.0496 Å. Расчеты проводились и для шести других различных поправок на обмен и корреляцию, зависимости которых от волнового вектора приведены на рисунке. Наиболее близкими к экспериментальным данным оказались значения упругих постоянных с поправкой на обмен и корреляцию Гелдарта и Воско.



Зависимости поправок на обмен и корреляцию от волнового вектора. GV — Гелдарт и Воско [9], S — Шоу [13], STLS — Сингви, Тоси, Сьеландер и Ланд [12], KL — Кляйман и Лангрез [11], HS — Хаббард и Шем [7, 8], VS — Вашишта и Сингви [14]

В табл. 1 приведены значения радиальных и тангенциальных силовых постоянных, рассчитанных с поправкой на обмен и корреляцию по Гелдарту и Воско.

Таблица 1

Радиальные α_i и тангенциальные β_i силовые постоянные алюминия (в дин/см)

i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
α_i	21246.4	2456.1	-1203.5	70.7	403.8	-427.9	36.3	221.7	-87.1	-151.7
β_i	300.3	-166.1	106.3	-51.9	21.7	5.7	-8.1	13.4	-0.14	-0.9

Обращает на себя внимание тот факт, что вклад первой координационной сферы превышает вклады большинства других координационных сфер.

В табл. 2 приведены значения упругих постоянных для алюминия, вычисленные с поправкой на обмен и корреляцию по Гелдарту и Воско.

Таблица 2

Упругие постоянные алюминия
(в 10^{11} дин/см²)

	C_{11}	C_{12}	C_{44}
Эксперимент [16]	10.8	6.1	2.9
Расчет	10.8	2.6	2.8

Можно отметить, что рассчитанные значения упругих постоянных C_{11} и C_{44} практически совпадают с экспериментом, что нельзя сказать о C_{12} . Это расхождение может быть связано с недостатками использованного локального приближения. В целом для алюминия наблюдается удовлетворительное согласие вычисленных и экспериментальных значений.

Литература

1. *Launey J. de* // Solid Staty Phys. 1956. **2**. P. 219.
2. *Shyam R., Upadhyaya S.C., Upadhyaya J.C.* // Phys. Stat. Solidi (b). 1990. **161**. P. 565.

3. *Upadhyaya S.C., Upadhyaya J.C., Shyam R.* // Phys. Rev. 1991. **B44**. P. 122.
4. *Силонов В.М., Гляненко И.А.* // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1998. №3. С. 38.
5. *Силонов В.М., Родин С.Ю., Энхтор Л.* // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2000. №3. С. 28.
6. *Animalu A.O.E.* // Phys. Rev. 1973. **B8**. P. 3542.
7. *Hubbard J.* // Proc. Roy. Soc. (London). 1957. **A240**. P. 359; **A243**. P. 336.
8. *Sham L.J.* // Proc. Roy. Soc. (London). 1965. **A283**. P. 3.
9. *Geldart D.T.W., Vosko S.H.* // J. Phys. Soc. Japan. 1965. **70**. P. 20.
10. *Noziers P., Pines D.* // Phys. Rev. 1958. **109**. P. 741.
11. *Langreth D.* // Phys. Rev. 1969. **181**. P. 753.
12. *Singwi K.S., Tosi M.P., Sjolander A., Land R.H.* // Phys. Rev. 1968. **176**. P. 589.
13. *Shaw R.W.* // J. Phys. 1970. **C3**. P. 1140.
14. *Vashista P., Singwi K.S.* // Phys. Rev. 1972. **B6**. P. 875.
15. *Харрисон У.* Псевдопотенциалы в теории металлов. М., 1968.
16. *Францевич И.Н., Воронов Ф.Ф., Бакута С.А.* Упругие постоянные и модули упругости металлов и наметаллов. Киев, 1982.

Поступила в редакцию
04.07.05