

Расчет некоторых параметров никеля с использованием модельного потенциала Анималу

В.М. Силонов*, Л.Энхтор, Г.Шилагарди, Р.Галбадрах

*Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова

Модельный потенциал переходных металлов Анималу [1] успешно применяется в расчете устойчивости кристаллических структур переходных металлов. В [2] с помощью МППМ Анималу во втором порядке теории возмущений проведен расчет полных энергий и равновесных атомных объемов компактных (ГЦК, ГПУ, ОЦК) модификаций двадцати четырех 3d-, 4d-, 5d- переходных металлов. Удалось правильно рассчитать тип низкотемпературной фазы в Y, La, Zr, Nb, Ta, Re, Ni, Rh, Pd и Pt. В Co, Sc, Ti и Hf более стабильной при температуре 0K оказалась структура высокотемпературной фазы, наблюдаемой в этих металлах. Анализ полученных результатов, а также расчеты энергии связи показали, что потенциал Анималу лучше описывает переходные элементы, расположенные по краям изoeлектронных рядов. В [3] также применяя МППМ Анималу с учетом вклада третьего порядка возмущений в энергию, для Co расчетом полных энергий для конкурирующих ГЦК, ГПУ и ОЦК структур показали, что при T=0K наиболее устойчивой будет ГПУ структура, которая реально существует при низких температурах.

В [5,6] были предприняты попытки расчета силовых и упругих постоянных переходных металлов Ni, Pd, сплавов $\text{Ni}_{0.55}\text{Pd}_{0.45}$ и $\text{Co}_{0.92}\text{Fe}_{0.08}$ с использованием модельного потенциала Анималу. В этих работах с учетом взаимодействия до десятой координационной сферы и с использованием рассчитанных теоретически силовых постоянных рассчитывались фононные спектры, упругие постоянные, плотность фононных состояний и температурная зависимость характеристической температуры. Рассчитанные фононные спектры удовлетворительно совпали с экспериментальными данными [7-10].

В данной работе поставлена задача расчета стабильности кристаллической структуры, полной энергии, фононного спектра и упругих постоянных никеля с использованием МППМ Анималу.

1. Методика расчета стабильности кристаллической структуры и полной энергии кристалла методом псевдопотенциала.

Полную энергию кристалла в рамках теории псевдопотенциала можно представить в следующем виде:

$$E = E_0 + E_1 + E_{BS} + E_{ES} + \dots, \quad (1)$$

где E_{BS} - энергия зонной структуры, E_{ES} - электростатическая энергия взаимодействия, E_0 - есть энергия взаимодействия свободного газа электронов в приближении Нозьера - Пайнса [11], зависящая только от концентрации электронов и не зависящая от структур:

$$E_0 = Z \left[\frac{2.21}{R_s^2} - \frac{0.916}{R_s} - (0.115 - 0.0311 \ln R_s) \right]. \quad (2)$$

Здесь первый член в квадратных скобках соответствует средней кинетической энергии электронного газа, которая определяется через энергии Ферми невзаимодействующего электронного газа. Второй и третий члены - соответственно обменная и корреляционная энергии, а R_s - радиус сферы приходящейся на один электрон:

$$R_s = \left[\frac{3\Omega_0}{4\pi Z} \right]^{1/3}. \quad (3)$$

Следующий член в квадратных скобках E_1 в формуле (1) есть вклад первого порядка теории возмущений по псевдопотенциалу. Обычно члены E_0 и E_1 записываются вместе и

называются объемнозависящей частью полной энергии. Энергию E_1 можно представить в виде:

$$E_1 = \frac{bZ}{\Omega_0}, \quad (4)$$

где b - соответствует некулоновской части псевдопотенциала и определяется следующим образом:

$$b = \lim_{q \rightarrow 0} \left[\frac{\Omega_0}{Z} w(\bar{q}) + \frac{4\pi}{q^2} \right] Z. \quad (5)$$

Поэтому полную энергию в расчете на один атом можно представить в виде:

$$E = \left[\frac{2.21}{R_s^2} - \frac{0.916}{R_s} - (0.115 - 0.031 \ln R_s) \right] + \frac{bZ}{\Omega_0} + E_{RS} + E_{ES} + \dots \quad (6)$$

Параметр b можно не вычислять через конкретный вид потенциала, а рассматривать как дополнительный подгоночный [3,4,11]. В работах [3,4,11] при расчете полных энергий с использованием МППМ Анималу параметр b определялся из условия нулевого внешнего давления для экспериментально наблюдаемой низкотемпературной фазы при значении атомного объема Ω_0 .

При этом значение b отличалось от некулоновской части МППМ. Авторы [3,4,11] отметили, что такое определение b эквивалентно введению в $w(q)$ некоторой дельта-образной добавки, позволяющей независимо задавать значения формфактора при $q = 0$.

$$p = - \frac{\partial E}{\partial \Omega} \Big|_{\Omega_0} = 0. \quad (7)$$

Таким образом, выполняется условие равновесия кристаллической системы при $p=0$ и обеспечивается минимум полной энергии при значении атомного объема равного экспериментальному.

Электростатическую энергию в зависимости от типа кристаллической структуры можно представить в виде [12]:

$$E = \frac{1}{2} \frac{Z^2 e^2}{r_0} \alpha, \quad (8)$$

где α - постоянная, отличающаяся от постоянной Маделунга знаком, r_0 определяется следующим образом:

$$r_0 = (3\Omega_0 / 4\pi)^{1/3}.$$

В таблице 1 приведены значения для α для ряда кристаллических структур [12]. Подставляя соответствующие значения в (8) можно провести оценку электростатической энергии металлов.

Таблица 1. Значение α для ряда кристаллических структур.

Структура	c/a	α
ОЦК	1	-1.79186
ГЦК	1	-1.79175
ГПУ	1.633	-1.79168
Простая кубическая	1	-1.76012

Энергию зонной структуры в рамках теории псевдопотенциала можно записать в виде:

$$E_{BS} = \sum_{\vec{q}} S^*(\vec{q}) S(\vec{q}) F(\vec{q}); \quad (9)$$

где $F(q)$ - характеристическая функция зонной структуры, записанная через незранированные формфакторы $w(q)$ псевдопотенциала, которая равна:

$$F(\vec{q}) = -\frac{\Omega_0 q^2}{8\pi e^2} |w^0(\vec{q})|^2 \frac{\varepsilon(\vec{q}) - 1}{\varepsilon(\vec{q})}, \quad (10)$$

где Ω_0 - атомный объем, e -заряд электроны, $\varepsilon(q)$ - диэлектрическая проницаемость с учетом эффектов обмена и корреляции равная:

$$\varepsilon(q) = 1 + [1 - f(q)] \frac{4\pi Z e^2}{\Omega q^2} \chi(q). \quad (11)$$

В (11) фигурирует обменно-корреляционная поправка Хаббарда и Шэма [14]:

$$f(q) = q^2 / [2(q^2 + k_F^2 + k_s^2)]^2; \quad k_s^2 = 2k_F / \pi. \quad (12)$$

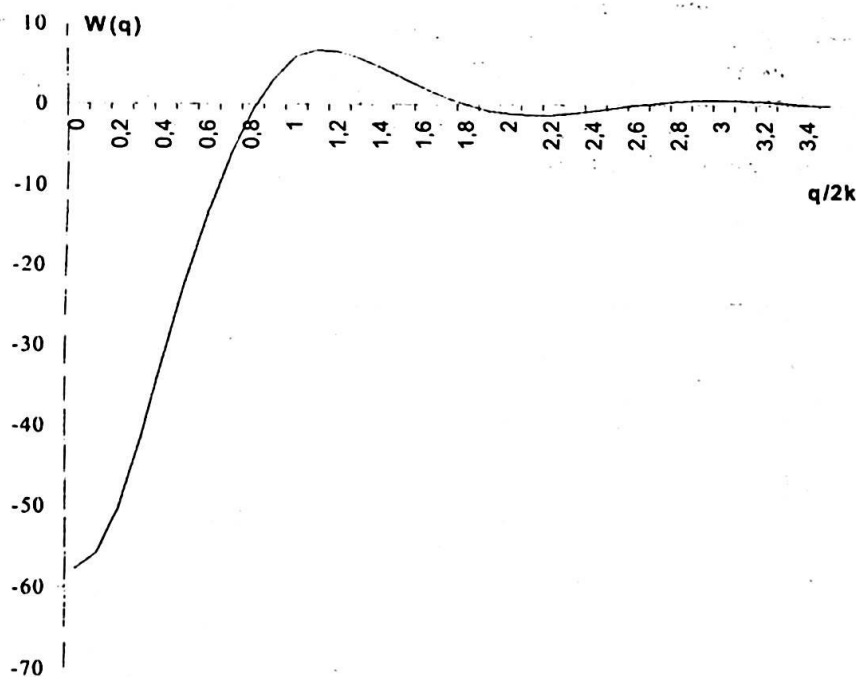


Рис.1. Зависимость формфактора $w(q/k_F)$ никеля.

Диэлектрическая функция $\chi(q)$ Линдхардта выражается через импульс Ферми k_F и энергию Ферми E_F :

$$\chi(q) = \left(\frac{2}{3} E_F \right)^{-1} \left(\frac{1}{2} + \frac{4k_F^2 - q^2}{8qk_F} \right) \ln \left| \frac{q + 2k_F}{q - 2k_F} \right|; \quad (13)$$

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}; \quad e^* = (1 + \alpha_{eff}) e^2.$$

Параметры формфакторов МППМ Анималу для никеля приведены в Таблице 2. На Рис. 1 приведена рассчитанная зависимость формфактора $w(q/k_F)$ никеля.

Рассчитанная по формуле (10) характеристическая функция $F(q)$ никеля приведена на Рис.2.

Таблица 2. Параметры формфактора МППМ Анималу для никеля [1].

	A_0	A_1	A_2	R_m	Ω	Z	M^*	R_c	α_{eff}	E_c
Ni	0.99	1.05	0.96	2.2	73.6	2	1	1.034	0.063	0.093

Выражение (9) энергии зонной структуры в случае расчета зонной энергии металла переписывается в следующем виде:

$$E_{KS} = \sum_{\vec{q}} P(\vec{q}) F(\vec{q}) \delta(\vec{q}_n, \vec{q}). \quad (14)$$

В данной формуле $P(q)$ есть структурный вес вектора q и равен:

$$P(\vec{q}) = P_{hkl} S(\vec{q}) S^*(\vec{q}), \quad (15)$$

где P_{hkl} -фактор повторяемости семейства плоскостей $\{hkl\}$, которая соответствует структурному вектору обратной решетки q_n , $S(q)$ - структурный фактор. В (14) суммирование идет фактически по структурным векторам обратной решетки q_n и штрих у знака суммы означает, что исключается член с $q_n = 0$. Исходя из быстро сходящегося характера зависимости $F(q)$, суммирование по формуле (14) ограничивалось первыми пятью координационными сферами для ГЦК и ОЦК структур, а для ГПУ- первыми десятью координационными сферами. Значения характеристической функции $F(q)$ никеля, соответствующие абсолютным величинам структурных векторов обратной решетки q_n , для различных структур приведены в Таблице 3.

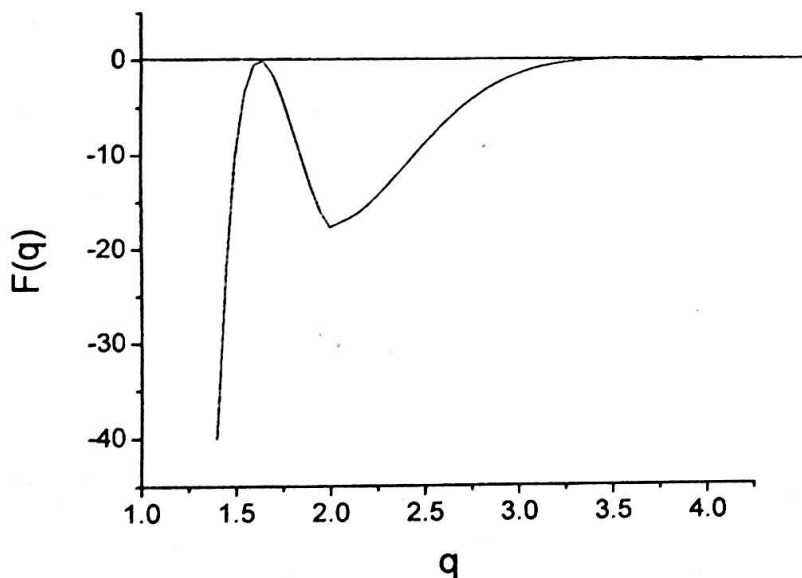


Рис. 2. Характеристическая функция $F(q)$ никеля.

Таблица 3. Значения характеристической функции $F(q)$ никеля для конкурирующих структур в 10^{-3} а.е.

ГПУ		ГЦК		ОЦК	
q_n	$F(q)$	q_n	$F(q)$	Q_n	$F(q)$
1.542	-0.4237	1.636	-0.0002	1.683	-0.0849
1.636	-0.0002	1.889	-1.2760	2.380	-1.1620
1.746	-0.3717	2.671	-0.5581	2.915	-0.229
2.248	-1.4470	3.133	-0.0751	3.366	-0.0107
2.671	-0.5581	3.272	-0.0275	3.763	-0.0048
2.898	-0.2457				
3.095	-0.0995				
3.133	-0.0751				
3.191	-0.0511				
3.272	-0.0275				

В Таблице 4 для ОЦК, ГЦК, ГПУ структур приведены значения факторов повторяемости P_{hkl} в зависимости от набора $\{hkl\}$ и в соответствии со значениями q_n . Там же для ГПУ решетки приведены рассчитанные значения $S(q)S'(q)$ и структурных весов $P(q)$. Для кубической решетки структурный фактор $S(q)=\delta(q, q_n)$, а для ГПУ решетки равен [15]:

$$S(q) = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \exp \left[-i \left(\frac{2}{3}h + \frac{1}{3}k + \frac{1}{2}l \right) \right] \right\} \delta(q, q_n), \quad (16)$$

где h, k, l являются индексами Миллера семейства плоскостей $\{hkl\}$.

Таблица 4. Факторы повторяемости P_{hkl} для ГЦК, ОЦК и ГПУ структур, значения $S(q)S'(q)$ и структурные веса $P(q)$ для ГПУ структур.

ГЦК			ОЦК			ГПУ				
q_n а. е.	$\{hkl\}$	P hk	Q n а. е.	$\{hkl\}$	P hk	q_n а. е.	$\{hkl\}$	P hk	$S \cdot S'$	P (q)
1.	1	8	1.	1	1	1.	0	6	j	1.
636	11	6	683	10	2	542	01	2	1	5
1.	2	1	2.	2	6	1.	0	1	s	2
889	00	2	380	00	2	636	02	2	j	9
2.	2	2	2.	2	4	1.	0	1	1	3
671	20	4	915	11	1	746	11	2	s	6
3.	3	8	3.	2	2	2.	0	6	j	6
133	11		366	20	2	248	12	8	1	1.
3.	2		3.	3	4	2.	1	6	s	5
272	22		763	10		671	10	1	1	1
						2.	0	2		2
						898	13	1		9
						3.	2	2		2
						095	00	2		
						3.	1			
						133	12			
						3.	2			
						191	01			
						3.	0			
						272	04			

Результаты расчета полной энергии N_i для конкурирующих структур представлены в Таблице 5. В той же таблице для сравнения представлены результаты работы [12]. Видно, что результаты наших расчетов близки к результатам [12]. В нашем случае ГЦК структура

имеет наименьшую энергию, что указывает на устойчивость этой структуры для Ni. Этот результат согласуется с экспериментом. Рассчитанное значение полной энергии ГЦК структуры никеля равно $E = -2.33522 \text{ Ry/ат.} = -31,77253 \text{ эВ}$, что хорошо согласуется с экспериментальным значением $E = -30,22 \text{ эВ}$ [16].

Таблица 5. Результаты расчета полной энергии Ni для конкурирующих структур. Значения энергий в Ry/ат.

	Наши расчеты			Расчеты [12]		
	ГЦК	ОЦК	ГПУ	ГЦК	ОЦК	ГПУ
E_0	-	-	-	-	-	-
	0.03482	0.03482	0.03482	0.03481	0.03481	0.03481
E_1	0.662	0.662	0.662	0.681	0.681	0.681
	80	80	80	64	64	64
E_{ES}	-	-	-	-	-	-
	2.93044	2.93068	2.93038	2.93045	2.93067	2.93038
E_{BS}	-	-	-	-	-	-
	0.03276	0.02746	0.02942	0.02995	0.02633	0.03002
E	-	-	-	-	-	-
	2.33522	2.33016	2.33182	2.31357	2.31017	2.31357
ΔE	0	0.005	0.003	0	0.003	0
		06	40		39	
$\Omega_0 = 73.6 \text{ а.е.}$				$\Omega_0 = 73.6 \text{ а.е.}$		

Таким образом, из результатов расчета полной энергии никеля для конкурирующих структур можно заключить, что МППМ Анималу во втором порядке теории возмущений применим для расчета полной энергии и стабильности кристаллической структуры никеля.

2. Методика расчета фононного спектра и упругих постоянных никеля.

Рассмотрим методику расчета фононного спектра и упругих постоянных через силовые постоянные, которые можно рассчитать в рамках теории псевдопотенциала из межатомного взаимодействия атомов кристалла [5,6].

Энергию межатомного взаимодействия атомов кристалла можно представить в виде [17]:

$$V(r) = \frac{Z^2 e^2}{r} + \frac{2Z^2 e^2}{\pi} \int_0^\infty G(q) \frac{\sin(qr)}{qr} dq, \quad (17)$$

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

$$G(q) = - \left[\frac{4\pi Z e^2}{\Omega q^2} \right]^{-2} \frac{|w^0(q)|^2}{1 - f(q)} \left[1 - \frac{1}{\varepsilon(q)} \right], \quad (18)$$

где $w^0(q)$ - незранированный ионный потенциал, $\varepsilon(q)$ - диэлектрическая функция, Ω - атомный объем, $f(q)$ -обменнокорреляционная поправка.

В случае нецентрального взаимодействия, исходя из межатомного потенциала $V(q)$, можно определить два типа независимых силовых постоянных [18]:

$$\frac{1}{r} \frac{dV}{dr} = - \frac{Z^2 e^2}{r^3} - \frac{2Z^2 e^2}{\pi r^2} \int_0^\infty G(q) \left[\cos(qr) - \frac{\sin(qr)}{qr} \right] dq; \quad (19)$$

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

Эти силовые постоянные соответственно обозначаются $\alpha_i = \left(\frac{d^2 V}{dr^2} \right)_r$ -радиальные

силовые постоянные и $\beta_i = \left(\frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \right)_r$ -тангенсиальные силовые постоянные, где индекс i

обозначает номер координационной сферы, на которой расположен атом.

Используя рассчитанные значения силовых постоянных металла, можно составить динамическую матрицу $D(q)$, которая в свою очередь позволяет рассчитать значения фононных частот при решении секулярного уравнения:

$$|D(q) - 4\pi M v^2 I| = 0, \quad (20)$$

где q - волновой вектор, v - фононная частота, I - единичная матрица, M - масса иона.

Динамическая матрица $D(q)$ в случае ГЦК и ОЦК кристаллических решеток имеет размерность 3×3 . Ее элементы $D_{\alpha\beta}(q)$ для первых 10-ти ближайших соседей ГЦК систем с использованием 20 силовых постоянных α_i, β_i ($i=1,10$) имеют вид:

$$\begin{aligned} D_{11} = & 2(\alpha_1 + \beta_1)(2 - C_1 C_2 - C_1 C_3) + 4\beta_1(1 - C_2 C_3) + 2(\alpha_2 + \beta_2)(1 - C_{21}) + \\ & + 2\beta_2(3 - C_{21} - C_{22} - C_{23}) + \frac{4}{3}(\alpha_3 - \beta_3)(6 - C_1 C_2 C_{23} - C_1 C_{22} C_3 - 4C_{21} C_2 C_3) + \\ & + 8\beta_3(3 - C_1 C_2 C_{23} - C_1 C_{22} C_3 - C_{21} C_2 C_3) + 2(\alpha_4 - \beta_4)(2 - C_{21} C_{22} - C_{21} C_{23}) + \\ & + 4\beta_4(3 - C_{21} C_{22} - C_{21} C_{23} - C_{22} C_{23}) + \frac{18}{5}(\alpha_5 - \beta_5)(2 - C_{31} C_2 - C_{31} C_3) + \\ & + \frac{2}{5}(\alpha_5 - \beta_5)(2 - C_1 C_{32} - C_1 C_{33}) + 4\alpha_5(6 - C_{31} C_2 - C_{31} C_3 - C_1 C_{32} - C_1 C_{33} - C_{32} C_3 - C_1 C_{33}) + \\ & + \frac{8}{3}(\alpha_6 - \beta_6)(1 - C_{21} C_{22} C_{23}) + 8\alpha_6(1 - C_{21} C_{22} C_{23}) + \frac{36}{7}(\alpha_7 - \beta_7)(2 - C_{31} C_{22} C_3 - C_{31} C_2 C_{23}) + \\ & + \frac{16}{7}(\alpha_7 - \beta_7)(2 - C_{21} C_{32} C_3 - C_{21} C_2 C_{33}) + \frac{4}{7}(\alpha_7 - \beta_7)(2 - C_1 C_{22} C_{33} - C_1 C_{32} C_{23}) + \\ & + 8\beta_7(6 - C_{31} C_{22} C_3 - C_{31} C_2 C_{23} - C_{21} C_{32} C_3 - C_{21} C_2 C_{33} - C_1 C_{22} C_{33} - C_1 C_{32} C_{23}) + \\ & + 2(\alpha_8 - \beta_8)(1 - C_{41}) + 2\beta_8(3 - C_{41} - C_{42} - C_{43}) + \frac{4}{9}(\alpha_9 - \beta_9)(2 - C_1 C_2 C_{43} - C_1 C_{42} C_3) + \\ & + \frac{64}{9}(\alpha_9 - \beta_9)(1 - C_{41} C_2 C_3) + 8\beta_9(3 - C_1 C_2 C_{43} - C_1 C_{42} C_3 - C_{41} C_2 C_3) + \\ & + 2(\alpha_9 - \beta_9)(2 - C_{31} C_{32} - C_{31} C_{33}) + 4\beta_9(3 - C_{31} C_{32} - C_{31} C_{33} - C_{23} C_{33}) + \\ & + \frac{4}{5}(\alpha_{10} - \beta_{10})(2 - C_{21} C_{42} - C_{21} C_{43}) + \frac{16}{5}(\alpha_{10} - \beta_{10})(2 - C_{41} C_{22} - C_{41} C_{23}) + \\ & + 4\beta_{10}(6 - C_{21} C_{42} - C_{21} C_{43} - C_{41} C_{22} + C_{41} C_{23} - C_{22} C_{43} - C_{42} C_{23}); \end{aligned} \quad (21)$$

$$\begin{aligned}
D_{12} = & 2(\alpha_1 - \beta_1)S_1S_2 + \frac{4}{3}(\alpha_3 - \beta_3)(S_1S_2C_{23} + 2S_1S_{22}C_3 + 2S_{21}S_2C_3) + \\
& (\alpha_4 - \beta_4)S_{21}S_{22} + \frac{6}{5}(\alpha_5 - \beta_5)(S_{31}S_2 + S_1S_{32}) + \frac{8}{3}(\alpha_6 - \beta_6)S_{21}S_{22}C_{23} + \\
& + \frac{24}{7}(\alpha_7 - \beta_7)(S_{31}S_{22}C_3 + S_{21}S_{32}C_3) + \frac{8}{7}(\alpha_7 - \beta_7)(S_{21}S_2C_{33} + S_{22}S_1C_{33}) + \\
& + \frac{12}{7}(\alpha_7 - \beta_7)(S_1S_{32}C_{23} + S_2S_{31}C_{23}) + 2(\alpha_9 - \beta_9)S_{31}S_{32} + \frac{4}{9}(\alpha_9 - \beta_9)S_1S_2C_{43} + \\
& + \frac{16}{9}(\alpha_9 - \beta_9)(S_{41}S_2C_3 + S_1S_{42}C_3) + \frac{8}{5}(\alpha_{10} - \beta_{10})(S_{21}S_{42} + S_{41}S_{22}),
\end{aligned} \quad (22)$$

где

$$\begin{aligned}
C_i &= \cos \frac{aq_i}{2}; & S_i &= \sin \frac{aq_i}{2}; & C_{2i} &= \cos aq_i; & S_{2i} &= \sin aq_i; \\
C_{3i} &= \cos \frac{3aq_i}{2}; & S_{3i} &= \sin \frac{3aq_i}{2}; & C_{4i} &= \cos 2aq_i; & S_{4i} &= \sin 2aq_i.
\end{aligned}$$

При этом индекс $i=1,2,3$.

Для расчета упругих постоянных с использованием элементов динамической матрицы $D(q)$ применяется длинноволновое приближение $q \rightarrow 0$, в результате которого получаются соотношения:

$$\begin{aligned}
C_{11} = & \frac{1}{a} [2\alpha_1 + 2\beta_1 + 4\alpha_2 + 12\alpha_3 + 12\beta_3 + 8\alpha_4 + 8\beta_4 + \frac{164}{5}\alpha_5 - \frac{328}{5}\beta_5 + \frac{16}{3}\alpha_6 + \\
& + \frac{32}{3}\beta_6 + 56\alpha_7 + 32\alpha_8 - 16\alpha_8 + \frac{226}{3}\alpha_9 - \frac{136}{3}\beta_9 + \frac{256}{5}\alpha_{10} + \frac{144}{5}\beta_{10}];
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
C_{12} = & \frac{1}{a} [\alpha_1 - 5\beta_1 - 4\beta_2 + 6\alpha_3 - 30\beta_3 + 4\alpha_4 - 20\beta_4 + \frac{54}{5}\alpha_5 + \frac{16}{3}\alpha_6 + \\
& + 22\beta_5 - \frac{64}{3}\beta_6 - \frac{268}{7}\alpha_7 + \frac{124}{7}\beta_7 - 16\beta_8 + \frac{49}{3}\alpha_9 + \frac{139}{3}\beta_9 + 80\beta_{10}]; \quad (23)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
C_{44} = & \frac{1}{a} [\alpha_1 + 3\beta_1 + 4\beta_2 + 6\alpha_3 + 18\beta_3 + 4\alpha_4 + 12\beta_4 + \frac{18}{5}\alpha_5 - \frac{182}{5}\beta_5 + \frac{16}{3}\alpha_6 + \\
& + \frac{32}{3}\beta_6 + 28\alpha_7 + 84\beta_7 + 16\beta_8 + \frac{49}{3}\alpha_9 + \frac{41}{3}\beta_9 + \frac{64}{5}\alpha_{10} + \frac{336}{5}\beta_{10}].
\end{aligned}$$

По вышеописанной методике в настоящей работе рассчитаны фононный спектр и упругие постоянные никеля. Зависимость потенциала межатомного взаимодействия $V(r)$ никеля, рассчитанная по формуле (17), приведена на Рис. 3. Из рисунка видно, что кривая $V(r)$ носит знакопеременный характер. При малых r она резко падает до нуля. В области r от 5.3 до 9.0 а.е. на этой кривой имеется область отрицательных значений. Вне этого интервала на кривой $V(r)$ имеются области малых положительных и отрицательных значений. Подобное поведение кривой потенциала парного межатомного взаимодействия

в зависимости от межатомного расстояния свидетельствует о знакопеременном характере силовых постоянных. Рассчитанные значения силовых постоянных никеля приведены в Таблице 6. Там же даны значения α_i и β_i , рассчитанные в [6]. Видно, что результаты практически совпадают.

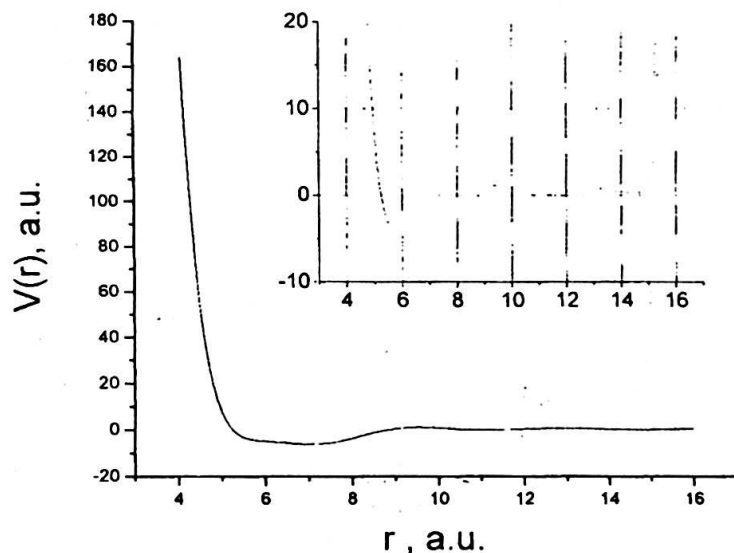


Рис 3. Зависимость потенциала межатомного взаимодействия $V(r)$ никеля. (В правом верхнем углу фрагмент графика).

Таблица 6. Силовые постоянные α_i и β_i для никеля (10^{-3} Н/м).

	Наш расчет	Расчет [6]		Наш расчет	Расчет [6]
α_1	41100.0	42076.8	β_1	-3453.0	-3503.4
α_2	299.7	292.9	β_2	-36.1	-28.2
α_3	56.8	60.3	β_3	62.9	92.3
α_4	-645.8	-652.3	β_4	9.0	10.8
α_5	186.9	182.7	β_5	-15.1	-14.3
α_6	161.3	160.4	β_6	8.2	8.3
α_7	-168.1	-167.6	β_7	5.6	6.0
α_8	-89.8	-91.9	β_8	-5.1	-4.6
α_9	100.9	97.9	β_9	-3.96	-3.75
α_{10}	85.6	83.7	β_{10}	1.98	2.03

С использованием рассчитанных значений силовых постоянных по формулам (20)-(22) проведен расчет фононного спектра никеля. Результаты расчета приведены на Рис.4. Видно, что рассчитанные значения фононных частот достаточно хорошо совпадают с экспериментальными данными [19].

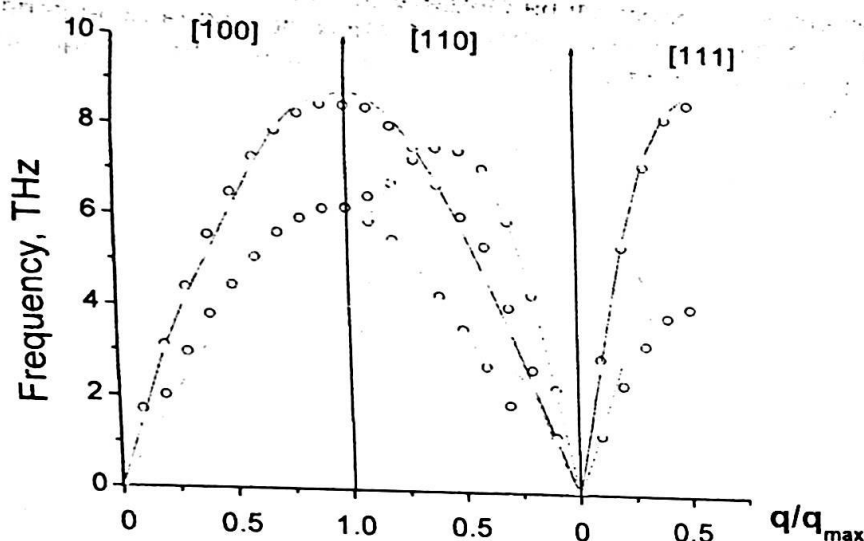


Рис. 4. Фононный спектр никеля.

--- - рассчитанная кривая;
 o - эксперимент [19].

Результаты расчета упругих постоянных никеля приведены в Таблице 7. Там же даны для сравнения результаты расчета [6] и экспериментальные данные [19]. Из сравнения наших результатов с данными [6] видно, что они очень близки. Но рассчитанные значения упругих постоянных отличаются от экспериментальных. Так рассчитанные значения C_{11} отличаются от экспериментальных на 6%, C_{12} - на 18 %. Наибольшее отличие наблюдается для C_{44} . Оно составляет 27%. Может показаться, что подобные расхождения говорят о беспочвенности рассматриваемого подхода. Однако, известно, что сами экспериментальные значения различаются между собой.

Таблица 7. Упругие постоянные никеля (10^{10} Н/м²).

	Расчет			Эксперимент [19]		
	C ₁₁	C ₁₂	C ₄₄	C ₁₁	C ₁₂	C ₄₄
Ni	2 3.2	1 8.3	8 .9	2 4.6	1 5.0	1 2.2
Ni [6]	2 2.8	1 7.8	8 .7			

Выводы.

1. МППМ Анималу во втором порядке теории возмущений применим для расчета полной энергии и стабильности кристаллической структуры никеля.
2. Применение МППМ Анималу в расчетах фононного спектра и упругих постоянных дает удовлетворительные результаты.
3. МППМ Анималу может успешно применяться для расчетов параметров чистого никеля.

Литература.

- [1] Animalu A.O.E. Electronic structure of transition metals.1. Quantum defects and model potential. Phys.Rev.B., v.8, n.8, 1973, p.3542-3554.
- [2] Animalu A.O.E. Electronic structure of transition metals.1. Phonon spectra. Phys.Rev.B., v.8, n.8, 1973, p.3555-3562.
- [3] Кацнельсон А.А., Татаринская О.М., Хрущов М.М. Модельные потенциалы Анималу и проблема стабильности структур переходных металлов. ФММ, 1987, т.64, в.4, с.655.
- [4] Татаринская О.М., Хрущов М.М., Кацнельсон А.А. Расчет характеристик полиморфного превращения в кобальте методом модельного потенциала. ФММ, 1984, т.58, в.5, с. 890-896.
- [5] R.Shyam, S.C.Upadhyaya, J.C.Upadhyaya. First-principles calculation of the lattice dynamics. Phys.Stat.Sol. B161, 565(1990).
- [6] S.C.Upadhyaya, J.C.Upadhyaya, R.Shyam. Model potential study of the lattice4 dynamics. Phys. Rev., B44, 122-129 (1991).
- [7] R.J.Birgeneau, J.Cordes, G.Dalling, A.Dalling, A.S.Woods. Normal modes of vibrations in Nickel. Phys.Rev., 136, n.5, A359(1964).
- [8] Miller A.P., Brockhouse B.N. Crystal Dynamics and Electronic Specific Heats of Palladium and Copper. Can.J.Phys., 1971, v.49, p.704.
- [9] Kamitahara W.A., Brockhouse B.N. Vibration of mixed crystal: Neutron Scattering from $Ni_{55}Pd_{45}$. Phys. Phys. B, 1974, v.10, p.1200.
- [10] Shapiro. S.M., Moss S.C. Lattice Dynamics of face-centered cubic $Co_{0.92}Fe_{0.08}$. Phys. Rev.B, 1977, v.15, 2726.
- [11] Пайнс Д., Нозьер Ф. Теория квантовых жидкостей. М.Мир, 1967, 382 с.
- [12] Татаринская О.М. Теоретическое изучение стабильности кристаллических структур переходных металлов. Дисс. к.ф.м.н. 1984г.
- [13] Sholl C.A. The calculation of electrostatic energies of metals by plane wave summation. Proc.Roy.Soc., 1967, v.92, p.434.
- [14] Sham L.J. A calculation of the phonon frequencies in Sodium. Proc.Roy.Soc., 1965, v.283, n. 1392, p. 33-39.
- [15] Cogachi M., Matsuo Y. Phase changes of the disordered IN-Mg and Al-Mg alloys. J.Phys. and Chem. of Solids, 1971, v.32, p. 2393.
- [16] Киттель С. Введение в физику твердого тела. 1978.
- [17] Харрисон У. Псевдопотенциалы в теории металлов. М.Мир, 1968, 366 стр.
- [18] Wei-Mei Shyu, G.D.Gaspari. Screened interionic potential of the simple metals. Phys.Rev.170, 687 (1968).
- [19] R.J.Birgeneau, J.Cordes, G.Dalling, A.D.Woods. Normal modes of vibration in Nickel. Phys.Rev., 136, n. 5, A359(1964).