

УДК 538.911, 539.32

**М.В. Симонов, И.Ю. Зубко**Пермский национальный исследовательский  
политехнический университет, Пермь, Россия**ОПРЕДЕЛЕНИЕ РАВНОВЕСНЫХ ПАРАМЕТРОВ РЕШЕТКИ  
РАЗЛИЧНЫХ ГПУ-МОНОКРИСТАЛЛОВ С ПОМОЩЬЮ  
ПОТЕНЦИАЛА МЕЖАТОМНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МИ**

Обосновывается выбор безразмерных параметров (показатели степени) потенциала Ми, обобщающего потенциал Леннарда-Джонса, для описания механических свойств металлических монокристаллов с ГПУ-решеткой. Таким материалам соответствует два равновесных параметра кристаллической решетки, один из них представляет собой расстояние между слоями с одинаковой укладкой атомов, а второй – межатомное расстояние в слое. В качестве критерия выбора параметров потенциала Ми используется совпадение известного из экспериментов отношения параметров кристаллической решетки и их отношение, полученное теоретически. Показано, что любой паре значений показателей степени в потенциале Ми соответствует определенное отношение параметров кристаллической ГПУ-решетки. Приведены показатели степени потенциала Ми, соответствующие известным металлам с ГПУ-решеткой: титану, цинку, магнию, кобальту, цирконию, бериллию и ряду других материалов. С помощью найденных значений параметров потенциала Ми может быть выполнена оценка упругих свойств ГПУ-монокристаллов. Сравняются два подхода к определению равновесных расстояний кристаллической решетки – более простой с вычислительной точки зрения – силовой (равенство нулю результирующих сил на гранях образца) и энергетический (обеспечивается минимум потенциальной энергии всего образца). Показано, что оба подхода дают значения равновесных параметров решетки с отличием, составляющим менее 1 %. Обнаружена зависимость равновесных параметров ГПУ-решетки от размеров образца.

**Ключевые слова:** ГПУ-монокристалл, метод атомарной статики, параметры потенциала Ми, равновесные параметры решетки, зависимость механических свойств от размеров тела.

**M.V. Simonov, I.Yu. Zubko**Perm National Research Polytechnic University,  
Perm, Russia**FINDING EQUILIBRIUM LATTICE PARAMETERS  
OF DIFFERENT HCP-MONOCRYSTALS  
WITH USE OF MIE INTERATOMIC POTENTIAL**

The approach to developing numerical identification of two dimensionless parameters (exponents of powers) of interatomic Mie potential for monocrystalline HCP-metals was validated. Two equilibrium lattice parameters exist for such materials. One of them is the distance between atom layers with the same distribution of the atoms. The other one is the interatomic spacing at the layer. Equality of the ratio between two lattice parameters known from experiments with the ratio obtained from simulation

was taken as a criterion for choosing potential Mie exponents. Any pair of Mie potential indexes of power was shown to be corresponded to the definite value of HCP-lattice parameters ratio. The power exponents of Mie potential for some HCP-metals were obtained, e.g. for titan, magnesium, cobalt, zirconium, beryllium and others. An estimation of elastic properties of different HCP-metals would be given further using the found Mie exponents. Comparison of two approaches to find equilibrium interatomic distances was made. The first approach is based on the interatomic forces consideration. From numerical point of view it gives a simpler way to calculate lattice parameters. The second approach is based on the specimen potential energy minimization. It was shown that the difference between equilibrium interatomic distances in HCP-lattice obtained with the use of both mentioned approaches is lower than 1%. The dependence of mechanical properties on the specimen size was also found.

**Keywords:** HCP-monocrystal, the method of atom statics, Mie interatomic potential power exponents, equilibrium lattice parameters, dependence of mechanical properties on specimen size.

## **1. Определение равновесных параметров ГПУ-решетки: постановка численного эксперимента**

Одним из наиболее распространенных типов кристаллической решетки металлов наряду с гранцентрированной и объемно-центрированной кубической (ГЦК и ОЦК) решетками является гексагональная плотноупакованная (ГПУ) решетка. Такое строение имеют титан, цинк, цирконий, бериллий, магний, кобальт и ряд других металлов. Плотноупакованными называются решетки, в которых при заданном минимальном расстоянии между центрами атомов достигается максимальное число атомов в единице объема. Такие решетки изображают с помощью набора шаров, уложенных слоями. В металлических кристаллах связи сферически симметричны [1]. Из этого следует, что чем выше в металлах плотность упаковки атомов, тем меньше их потенциальная энергия. Большинство металлов имеют наиболее плотноупакованные ГЦК- или ГПУ-решетки. Используя представление решеток в виде набора шаров, можно сказать, что ГПУ-решетка обладает двухслойной периодичностью. Последовательность ее слоев записывают в виде ...АВАВАВ..., причем слои, условно обозначаемые как А и В, соответствуют наиболее плотному периодическому расположению шаров на плоскости (их центры лежат в узлах плоской периодической сетки из правильных треугольников). Структуры этих слоев не различаются, но один слой сдвинут относительно другого так, что атомы слоя А расположены напротив центров пустот слоя В (рис. 1, б, в). ГЦК-решетка является трехслойной и представляется последовательностью слоев ...АВСАВС..., в которой структуры слоев А, В, С также не различаются. Отличие расположения атомов ГЦК-решетки от описанного выше расположения атомов состоит в том, что если взять слой А в качестве основного слоя, то слои с такой же плотнейшей плоской упаковкой В и С будут

различаться типом соответствующих им лунок на слоях типа А, в которых располагаются атомы слоев В и С.

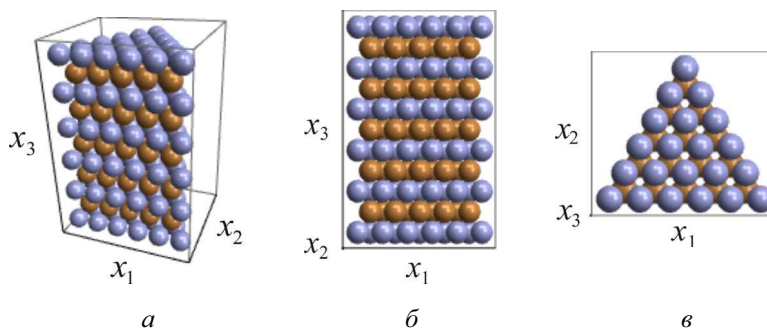


Рис. 1. Пример образца с ГПУ-решеткой: *а* – общий вид, *б* – вид спереди, *в* – вид сверху (атомы слоя А изображены серым, атомы слоя В – коричневым цветом)

Плотность упаковки определяется как отношение объема, занимаемого шарами в элементарной ячейке, к ее полному объему, для ГПУ- и ГЦК-решеток она одинакова. Но ГЦК-решетка является простой – атомы всех слоев находятся в одинаковом положении по отношению к соседям, а ГПУ-решетка является сложной, так как по отношению к атомам из разных слоев (А или В) окружающие их атомы в смежных слоях расположены по-разному относительно кристаллографического базиса. Атомы из слоев А и В часто считают атомами разного типа, хотя их физико-химические свойства не различимы и отличие состоит только в геометрии их окружения. Любая сложная решетка может быть представлена как несколько вложенных одна в другую простых подрешеток. Для ГПУ-решетки выделяют две простые подрешетки, они являются объединением слоев атомов типа А или В. Для материалов с ГЦК-решеткой расстояния между ближайшими атомами всегда одинаковы вне зависимости от их принадлежности к одному или разным слоям, что является следствием кубической симметрии. Каждый атом ГПУ-решетки, не лежащий на поверхности образца, окружен 6 (ближайшими) атомами из слоя, которому он сам принадлежит. Также он окружен 6 (ближайшими) атомами из двух соседних слоев (3 атома снизу и 3 атома сверху). Расстояния от выбранного атома до ближайших соседей из его собственного слоя и до ближайших соседей из других слоев различаются. Поэтому ГПУ-решетка в отличие от ГЦК- или ОЦК-решетки характеризуется не одним, а двумя

межатомными расстояниями. Переменную  $a$  будем использовать для обозначения равновесного расстояния между атомами одного слоя, а переменную  $b$  для обозначения равновесного расстояния между одноименными слоями (удвоенное расстояние между слоями А и В). Для проведения численных экспериментов над ГПУ-кристаллом по исследованию его физико-механических свойств необходимо определить равновесные межатомные расстояния.

Дискретные подходы к исследованию свойств металлических монокристаллов применяются многими авторами как в динамической, так и в статической постановках (например, [2–7]) с использованием различных, в ряде работ довольно сложных, потенциалов. В данной статье рассматриваются некоторые не обсуждавшиеся ранее вопросы о выборе формы образца для проведения вычислительных экспериментов, об исследовании зависимости механических свойств от размеров образца, о предельном переходе от рассмотрения нескольких элементарных ячеек кристалла к макроуровню. За основу взят подход атомарной статистики и простейшие степенные потенциалы: потенциал Леннарда-Джонса и обобщающий его потенциал Ми.

При исследовании механических свойств материала с ГПУ-решеткой для исключения влияния на результат наложения классов симметрий образца и решетки будем рассматривать тело, имеющее оси симметрии такого же порядка, что и сама кристаллическая решетка. Примером такого образца для ГПУ-решетки является прямоугольная призма с основанием в виде правильного треугольника (см. рис. 1) либо вариант прямоугольной призмы с правильным шестиугольным основанием (рис. 2). В качестве боковых граней выбираются наборы атомов и из слоя типа А, и из слоя типа В, то есть совокупность двух ближайших к геометрической боковой грани слоев, параллельных оси  $Ox_3$ . Тогда второй вариант призмы с шестиугольным основанием имеет боковые грани с различным расположением атомов. Например, это видно по «передней» и «задней» граням на рис. 2,  $z$ , ортогональным оси  $Ox_2$ . На этом рисунке передняя и задняя грани состоят из 16 атомов типа А (серый цвет) каждая, но передняя содержит 9 атомов типа В, а задняя грань – 12 атомов типа В (коричневый цвет). Расположение атомов типа В относительно атомов типа А на этих гранях также различается. Это приводит к тому, что при нахождении равновесной конфигурации образца невозможно удовлетворить требованию равенства

нулю поверхностных сил на всех гранях при сохранении формы образца. Этому требованию можно удовлетворить при искажении шестиугольника, лежащего в основании призмы, то есть, по сути, введением дополнительного параметра ГПУ-решетки. Такой путь не представляется конструктивным.

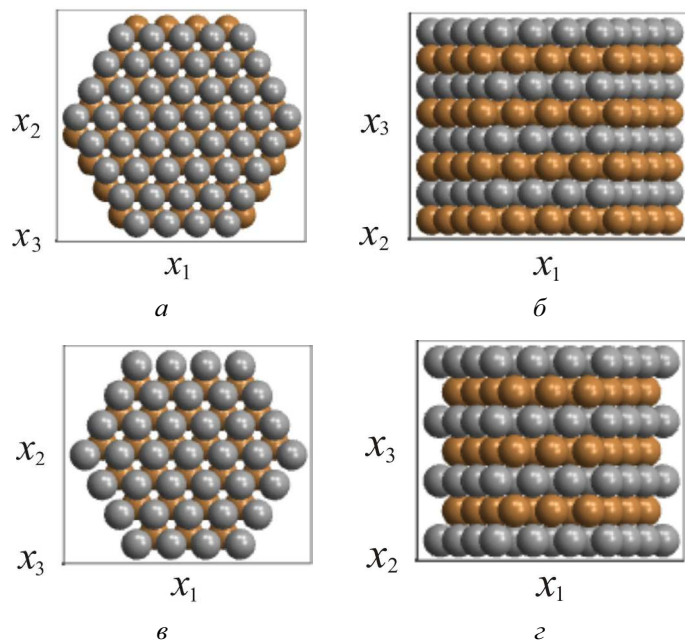


Рис. 2. Пример двух типов гексагонального образца с ГПУ-решеткой: первый тип:  $a$  – вид сверху,  $б$  – вид спереди; второй тип:  $в$  – вид сверху,  $г$  – вид спереди

Первый вариант призмы с правильным шестиугольным основанием дает одинаковое число атомов на каждой из боковых граней (рис. 2,  $a$ ,  $б$ ). Но центры масс этих граней чередуются по высоте расположения относительно центра масс образца. У передней грани центр масс лежит ниже центра масс образца, а у задней грани на ту же величину выше. Это приводит к тому, что при любом деформировании, даже при растяжении вдоль оси симметрии образца  $Ox_3$ , на боковых гранях появляются ненулевые касательные компоненты поверхностных сил вдоль  $Ox_3$ . Сумма этих компонент для всего образца равна нулю, но их наличие приводит к появлению недиагональных компонент тензора напряжений Коши даже при одноосном растяжении-сжатии вдоль  $Ox_3$ . Работа с такой формой образца также не представляется целесообразной. Образец в виде прямой призмы с основанием в виде пра-

вильного треугольника (см. рис. 1) лишен перечисленных недостатков, все его боковые грани состоят из одинакового числа атомов обоих типов, одинаково взаимно расположенных. Поэтому для исследования механических свойств материалов с ГПУ-решеткой в дальнейшем будет рассматриваться образец в виде прямой призмы (см. рис. 1).

Для определения упругих модулей ГПУ-монокристалла используется разработанная ранее модификация метода атомарной статики [2–3], в основе которой лежит рассмотрение состояния силового равновесия взаимодействующих частиц при использовании потенциала Леннарда-Джонса. Выбор потенциала обоснован тем, что при исследовании упругих свойств не рассматриваются процессы, идущие при сверхнизких температурах или при скоростном деформировании, когда важную роль во взаимодействии атомов могут играть квантовые эффекты. Использование статической постановки, в которой положения атомов строго определены, позволяет получить аналитическое решение задачи определения равновесного межатомного расстояния для различных кристаллических решеток и образцов различного размера. При этом точные значения межатомного расстояния получаются для объемов материала с небольшим числом атомов  $N$  на ребре основания образца (от 3 до 20). Далее, для перехода на макроуровень по этим точным решениям делается предельный переход при стремлении числа атомов  $N$  на ребре образца к бесконечности.

При определении параметров равновесной ГПУ-решетки для образца некоторого заданного размера требуется решить систему двух уравнений относительно двух параметров  $a$  и  $b$ . При выводе уравнений определяется суммарная сила, действующая на атомы нижней грани, а также на атомы одной из боковых граней призмы, например передней. Полученные силы скалярно умножаются на единичный вектор нормали к соответствующей грани, и результат приравнивается нулю. Заметим, что определяемые силы не имеют составляющих, касательных к граням образца.

Система двух уравнений, получаемая для определения двух параметров ГПУ-решетки для образца за счет использования потенциала Леннарда-Джонса (представляется в виде  $\varphi(r) = \beta \left( \left( \alpha / r \right)^{12} - 2 \left( \alpha / r \right)^6 \right)$ ,  $|\mathbf{r}| = r$ , где  $\mathbf{r}$  – вектор, соединяющий центры двух атомов) и учета взаимодействия атомов любой выбранной грани со всеми остальными ато-

мами образца, оказывается полиномиальной очень высокой степени. Аналитически эта система не может быть решена. Для численного решения была использована итерационная процедура. На первом шаге принималось, что второй параметр решетки  $b$  равен  $1,5a$  и из условия равенства нулю результирующей силы на боковых гранях находилось решение для  $a$ , имеющее вид  $a = k_0^a \alpha$ , где  $\alpha$  – параметр потенциала Леннарда-Джонса, равный равновесному расстоянию между двумя атомами, а  $k_0^a$  – коэффициент, найденный при численном решении уравнения для  $a$ . Далее при найденном значении  $a$  и произвольном  $b$  определялась результирующая сила на верхней грани. Из условия, что она также должна быть равна нулю, находилось нулевое приближение к значению  $b$  в виде  $b = k_0^b \alpha$ . Итерационная процедура поиска равновесных расстояний стартует с полученных нулевых приближений к искомым значениям параметров ГПУ-решетки. Найденное значение  $b$  подставляется в уравнение, обеспечивающее нулевую силу на боковой грани, и определяется новое приближение параметра  $a$ , которое подставляется в выражение для силы на верхней грани для получения следующего приближения параметра  $b$ . Такая процедура сходится достаточно быстро – через 8–10 итераций значения коэффициентов  $k_i^{a,b}$  не изменяются в первых 6 значащих цифрах. Для проверки сходимости проводилось 100 итераций, подтверждающих ее монотонность. Было показано, что все значения параметров  $a$  и  $b$  ложатся на гладкие кривые. Для них были построены аппроксимирующие зависимости, которые искались в классе функций вида  $y(x) = c_1(x + x_0)^k + c_2$ . Получено, что показатель степени  $k = -1$  с точностью до 4-го знака после запятой:

$$\begin{aligned} a(N) / \alpha &= 0,024(N - 1,246)^{-1} + 0,979, \\ b(N) / \alpha &= 0,060(N + 2,552)^{-1} + 1,599, \end{aligned} \tag{1}$$

где  $N$  – число атомов на ребре основания образца. Заметим, что с ростом  $N$  межатомное расстояние убывает, то есть образцы меньшего размера обладают меньшей плотностью, то есть состоят с точки зрения механики из другого материала, хотя химически они состоят из тех же атомов.

Таким образом, полученные зависимости равновесных межатомных расстояний  $a$  и  $b$  от размеров образца ( $N \geq 4$ ) проходят че-

рез все масштабы и их графики имеют горизонтальные асимптоты, выходящие на параметры, соответствующие известным из экспериментов макроскопическим значениям. Это позволяет идентифицировать параметр  $\alpha$  потенциала Леннарда-Джонса: при  $N \rightarrow \infty$  получаются теоретически рассчитанные значения равновесных параметров ГПУ-решетки:

$$a^* = 0,979\alpha, \quad b^* = 1,599\alpha, \quad \kappa \equiv b^* / a^* = 1,634.$$

Для титана известны параметры  $a^{\text{Ti}} = 2,951$  (А),  $b^{\text{Ti}} = 4,697$  (А), то есть  $b^{\text{Ti}} / a^{\text{Ti}} = 1,592$ , что неплохо соответствует расчетам (отклонение составляет 2,6 %). Для циркония  $a^{\text{Zr}} = 3,231$  (А),  $b^{\text{Zr}} = 5,148$  (А), то есть  $b^{\text{Zr}} / a^{\text{Zr}} = 1,593$ . Для цинка  $a^{\text{Zn}} = 2,665$  (А),  $b^{\text{Zn}} = 4,947$  (А), то есть  $b^{\text{Zn}} / a^{\text{Zn}} = 1,856$  (значительное отклонение). Для бериллия отношение составляет 1,567, для магния – 1,624, для гафния – 1,580, для рутения – 1,582, для кобальта – 1,632 (лучшее соответствие), для кадмия – 1,886 (снова большое отклонение). Для проведения расчетов по теоретическому определению физико-механических свойств материалов с ГПУ-решеткой, например их упругих модулей, коэффициента теплового расширения и зависимости упругих свойств от температуры для каждого конкретного материала необходимо достичь известного соотношения параметров решетки. Потенциал Леннарда-Джонса, как видно из полученных результатов, не всегда подходит для такого анализа.

## **2. Определение равновесных параметров ГПУ-решетки с помощью потенциала Ми**

Потенциал Леннарда-Джонса не позволяет описывать разнообразие металлов с ГПУ-решеткой. Его важным преимуществом по сравнению с часто используемым трехпараметрическим потенциалом Морзе (например, в [4]), является степенная форма, позволяющая получать аналитические решения, что затруднительно сделать при выборе потенциала Морзе. В качестве альтернативы рассматривается потенциал более общего вида, чем потенциал Леннарда-Джонса, но также имеющий степенной вид – потенциал Ми [4], содержащий дополнительные безразмерные параметры  $m$  и  $n$ :

$$\varphi(r) = \beta \left( n(a/r)^m - m(a/r)^n \right) / (m-n), \quad m > n. \quad (2)$$



Потенциал Ми содержит четыре параметра и дает большую свободу по сравнению с потенциалом Леннарда-Джонса при теоретическом исследовании свойств материалов. В рассматриваемой задаче использование потенциала Ми позволяет получать различные отношения параметров решетки для разных металлов с ГПУ-решеткой.

Исследовалась зависимость значений параметров ГПУ-решетки от значений параметров потенциала Ми. Из условия, что параметр  $m > n$ , последовательно брались значения параметра  $n$  из интервала  $2 \leq n < 51$  и перебирались значения параметра  $m$  от  $n+1$  до 50. В результате оказалось, что отношение равновесных параметров ГПУ-решетки для макроскопического уровня изменяется в пределах  $k \in [1,621; 1,637]$ , что не позволяет описать все металлы с ГПУ-решеткой, но дает возможность выбрать параметры потенциала Ми, подходящие для ряда таких материалов. Результаты соответствия значений параметров потенциала Ми и отношения  $k$  приведены в таблице. Приведенные параметры позволяют получать равновесные межатомные расстояния ГПУ-монокристалла различных металлов и проводить дальнейшие исследования их механических свойств.

№ п/п	Металл	Параметр $m$	Параметр $n$	$\alpha$ (мкм)	$b/a$	Погрешность $b/a$
1	Гафний	5	3	0,4344	1,577	2,69%
2	Цирконий	5	3	0,4392	1,594	1,65%
3	Магния	5	3	0,4353	1,624	0,20%
4	Титан	5	3	0,4011	1,592	1,77%
5	Рутений	5	3	0,3678	1,583	2,32%
6	Бериллий	5	3	0,3107	1,567	3,31%
7	Цинк	6	4	0,3978	1,856	11,8%
8	Кадмий	6	4	0,3441	1,889	13,3%
9	Кобальт	13	12	0,2513	1,632	0,06%
10	Гелий	14	9	0,3591	1,633	0,00%

Таким образом, с использованием потенциала Ми появляется возможность с большей точностью описывать геометрические характеристики кристаллов с ГПУ-решеткой – равновесные межатомные расстояния и их отношение. При этом удалось определить три параметра потенциала Ми: два показателя степени  $m$  и  $n$ , а также параметр  $\alpha$ , задающий равновесное расстояние для изолированной пары атомов

выбранного материала. Параметр  $\beta$  может быть определен на основании подхода, изложенного в [2–3], при исследовании упругих свойств монокристаллов.

### **3. Определение равновесных параметров ГПУ-решетки с использованием энергетического подхода**

Использованный выше подход к нахождению равновесных значений параметров решетки не является единственным. Для определения равновесных параметров  $a$  и  $b$  ГПУ-монокристалла, кроме рассмотренного подхода, применяемого и в [2–3], в основе которого лежит равенство нулю сил, действующих на гранях образца, может быть применен анализ, основанный на минимизации потенциальной энергии взаимодействия всех атомов исследуемого образца. При этом будем обеспечивать сохранение однородности расположения атомов образца, когда межатомные расстояния вблизи граней не изменяются. Энергетический подход также может использоваться при исследовании зависимости механических свойств материалов с кристаллической решеткой от температуры, что выходит за рамки проводимого в работе исследования.

Для рассматриваемой формы образца (см. рис. 1) с помощью потенциала Леннарда-Джонса была найдена энергия  $E$  взаимодействия всех атомов решетки. Были получены значения энергии для решетки с вычисленными ранее равновесными параметрами ГПУ-решетки  $a$  и  $b$  (1), а также для образцов с произвольными параметрами решетки, которые подлежат определению из условия минимизации энергии. Для определения значений параметров ГПУ-решетки вторым способом находился минимум энергии взаимодействия атомов  $E$  по параметрам  $a$  и  $b$ .

В результате численного эксперимента с использованием полученных ранее с помощью первого подхода значений параметров решетки (1) для различного числа атомов на грани образца была найдена зависимость потенциальной энергии взаимодействия всех атомов от размера образца с  $N$  атомами на ребре основания (рис. 3).

Исследование асимптотического поведения показало, что предельное значение потенциальной энергии взаимодействия атомов ГПУ-решетки при  $N \rightarrow \infty$  (при значениях  $a = 0,979\alpha$ ,  $b = 1,599\alpha$ )

$$E / \beta = -8146,158. \quad (3)$$

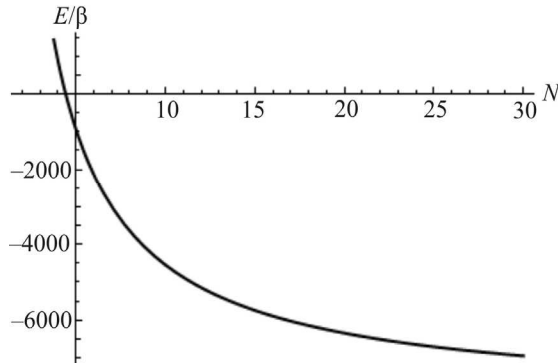


Рис. 3. Зависимость энергии  $E$  от числа атомов  $N$  при известных параметрах  $a$  и  $b$

Также была определена потенциальная энергия  $E$  взаимодействия атомов при произвольных параметрах решетки  $a$  и  $b$  для различного числа атомов  $N$  на ребре основания образца с использованием потенциала Леннарда-Джонса. Затем из условия минимума потенциальной энергии были определены параметры решетки для каждого числа  $N$ . После этого была построена функция, аппроксимирующая минимальное значение энергии  $E_{\min}(N)$  при каждом  $N$ , качественно имеющая такой же вид, как и на рис. 3, и определены предельные значения параметров решетки при  $N \rightarrow \infty$ .

«Макроскопическое» значение энергии решетки ГПУ металла, полученное в пределе при  $N \rightarrow \infty$

$$E_{\min} / \beta = -8151,16. \quad (4)$$

Отличие предельных значений (3) и (4) составляет 0,06 %. Таким образом, силовой подход к определению равновесных межатомных расстояний в ГПУ-решетке обеспечивает получение равновесного состояния образца при сохранении однородного распределения атомов в решетке, находящегося близко к состоянию с минимальной потенциальной энергией.

Зависимость параметров  $a$  и  $b$ , обеспечивающих минимум потенциальной энергии взаимодействия, от числа атомов  $N$  принимает вид

$$\begin{aligned} a(N) / \alpha &= 0,067(N - 1,196)^{-1} + 0,972, \\ b(N) / \alpha &= 0,101(N + 2,409)^{-1} + 1,585, \end{aligned}$$

предельные значения параметров решетки

$$a = 0,972 \alpha, \quad b = 1,585 \alpha.$$

Значения параметра  $a$ , полученные с помощью силового подхода и на основе минимизации потенциальной энергии взаимодействия атомов образца, отличаются на 0,72 % . Для параметра  $b$  отличие составляет 0,93 %. Эти различия пренебрежимо малы, и в расчетах по определению упругих модулей образцов с ГПУ-решеткой удобнее использовать первый метод, гарантирующий точное выполнение заданных статических граничных условий.

В данной работе были рассмотрены способы теоретической оценки равновесных параметров решеток ГПУ-монокристаллов с помощью потенциалов межатомного взаимодействия Леннарда-Джонса и Ми, а также силового и энергетического подходов. Показано, что использование этих подходов дает достаточно близкие результаты, что позволяет применять в аналогичных исследованиях более простой с вычислительной точки зрения силовой подход. Установлено, что при использовании потенциала Ми варьирование двух параметров потенциала  $m, n$  позволяет получать равновесные параметры  $a$  и  $b$  различных металлических ГПУ-монокристаллов. В работе получены значения указанных параметров для ряда металлов с ГПУ-решеткой.

Работа выполнена при финансовой поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009–2013 годы» (мероприятие 1.2.2, Соглашение 14.В37.21.0382).

### **Библиографический список**

1. Васильев Д.М. Физическая кристаллография. – М.: Металлургия, 1981. – 248 с.
2. Кривцов А.М. Упругие свойства одноатомных и двухатомных кристаллов: учеб. пособие. – СПб.: Изд-во С.-Петерб. гос. политехн. ун-та, 2010. – 144 с.
3. Кривцов А.М., Подольская Е.А. Моделирование упругих свойств кристаллов с гексагональной плотноупакованной решеткой // Механика твердого тела. – 2010. – № 3. – С. 77–86.
4. Атомно-дискретное описание влияния анизотропных межатомных взаимодействий на упругие свойства ГПУ металлов / М.А. Баранов, Е.А. Дубов, И.В. Дятлова, Е.В. Черных // Физика твердого тела. – 2004. – Т. 46, вып. 2. – С. 212–217.

5. Бертяев Б.И., Реут И.И. Об уравнении состояния, сжимаемости и внутреннем давлении в металлах с ОЦК-, ГЦК- и ГПУ-решетками // Вестн. Самар. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки. – 2008. – № 2(17). – С. 215–223.

6. Зубко И.Ю., Трусов П.В. Определение упругих постоянных ГЦК-монокристаллов с помощью потенциала межатомного взаимодействия // Вестник ПНИПУ. Механика. – Пермь: Изд-во Перм. нац. исслед. политех. ун-та, 2011. – № 1. – С. 147–169.

7. Вывод упругого закона монокристаллов металлов из потенциала межатомного взаимодействия / И.Ю. Зубко, О.В. Мелентьева, В.П. Морозова, В.И. Кочуров // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. – Н. Новгород: Изд-во Нижегород. гос. ун-та им. Н.И. Лобачевского. – 2011. – № 4. – Ч. 5. – С. 2181–2183.

### References

1. Vasiliev D.M. *Fisicheskaya kristallografiya* [Physical crystallographics]. Moscow: Metallurgiya, 1981, 248 p.

2. Krivtsov A.M. *Uprugie svoystva odnoatomnih i dvuhatomnih kristallov* [Elastic properties of monoatomic and biatomic crystals: Tutorial]. Sankt-Peterburg: Sankt-Peterburgskiy gosudarstvenniy politekhnicheskii universitet, 2010, 144 p.

3. Krivtsov A.M., Podolskaya E.A. *Modelirovanie uprugih svoystv kristallov s GPU-reshotkoi* [Modelling of elastic properties of crystals with hexagonal close packed lattice]. *Mehanika tverdogo tela*, 2010, no. 3, pp. 77–86.

4. Baranov M.A., Dubov E.A., Dyatlova I.V., Chernyh E.V. *Atomno-diskretnoe opisanie vliyaniya anizotropnih mezhatomnih vzaimodeystviy na uprugie svoystva GPU-metallov* [Discrete atomic description of influence of anisotropic interatomic interactions on elastic properties of HCP metals]. *Fizika tverdogo tela*, 2004, vol. 46, iss. 2, pp. 212–217.

5. Bertyaev B.I., Reut I.I. *Ob uravnenii sostoyaniya, szhimaemosti i vnutrennem davlenii v metallah s OZK, GZK i GPU reshetkami* [About state equation, compressibility and internal pressure in metals with BCC, FCC and HCP lattices]. *Vestnik Samarskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta. Seriya Fiz.-mat. nauki*, 2008, vol. 2(17), pp. 215–223.

6. Zubko I.Yu., Trusov P.V. *Opredelenie uprugih postoyannih GZK-monokristallov s pomotchyu potentsial mezhatomnogo vzaimodeystviya*

[Finding elastic moduli Finding elastic moduli of FCC monocrystals using interatomic interaction potential]. *Vestnik Permskogo nacionalnogo issledovatel'skogo politehnicheskogo universiteta. Mechanics*, 2011, no. 1, pp. 147–169.

7. Zubko I.Yu., Melent'eva O.V., Morozova V.P., Kochurov V.I. Vivod uprugogo zakona monokristallov metallov iz potentsiala mezhatomnogo vzaimodeystviya [Obtaining elastic law of metal monocrystals from interatomic interaction potential]. *Vestnik Nijegorodskogo universiteta im. N.I. Lobachevskogo*. N. Novgorod, 2011, no. 4, iss. 5, pp. 2181–2183.

### **Об авторах**

**Симонов Максим Владимирович** (Пермь, Россия) – студент кафедры математического моделирования систем и процессов Пермского национального исследовательского политехнического университета (614990, г. Пермь, Комсомольский пр., 29, e-mail: Stud-mmssp-mm09@yandex.ru).

**Зубко Иван Юрьевич** (Пермь, Россия) – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математического моделирования систем и процессов Пермского национального исследовательского политехнического университета (614990, г. Пермь, Комсомольский пр., 29, e-mail: zoubko@pstu.ru).

### **About the authors**

**Simonov Maksim Vladimirovich** (Perm, Russian Federation) – a student Mathematical Modeling of Systems and Processes, Perm National Research Polytechnic University (29, Komsomolsky av., Perm, 614990, Russian Federation, e-mail: Stud-mmssp-mm09@yandex.ru).

**Zubko Ivan Yurievich** (Perm, Russian Federation) – a doctor of physical and mathematical sciences, a docent of the Department of Mathematical Modeling of Systems and Processes, Perm National Research Polytechnic University (29, Komsomolsky av., Perm, 614990, Russian Federation, e-mail: zoubko@pstu.ru).

Получено 19.09.2012