

## РОЗРАХУНОК МІЖАТОМНИХ СИЛОВИХ КОНСТАНТ ПРОСТОЇ КУБІЧНОЇ ГРАТКИ В ДОВГОХВИЛЬОВОМУ НАБЛИЖЕННІ

О. В. Кнігініцький

*Кафедра теоретичної фізики, Львівський національний університет імені Івана Франка,  
вул. Драгоманова, 12, Львів, 79005, Україна*

(Отримано 30 травня 2003 р.; в остаточному вигляді — 22 березня 2004 р.)

За допомогою методу довгих хвиль обчислено міжатомні силові константи простої кубічної ґратки для перших та других найближчих сусідів. Отримано вирази для визначення 1-ї та 2-ї похідних двочастинкового потенціалу міжатомної взаємодії з пружних констант кристала. Чисельним методом розраховано параметри степеневі моделі потенціалу.

**Ключові слова:** довгохвильове наближення, модулі пружності, міжатомні силові константи.

PACS number(s): 62.20.Dc, 62.30.+d, 63.10.+a

### I. ВСТУП

Інформація про міжатомні силові константи та параметри потенціалів міжатомної взаємодії є важливою при дослідженні різноманітних фізичних властивостей твердих тіл, розв'язуванні широкого кола задач у динамічній теорії кристалічної ґратки та спектроскопії. Відсутність однозначної та точної інформації про характер силових полів, суттєво різні підходи до опису міжатомних взаємодій у різних типах кристалів певною мірою зумовлюють використання значної кількості обчислювальних методів з різними вимогами до технічного забезпечення процесу обчислень і співвідношенням між простотою обчислень та якістю кінцевих результатів. Серед способів розрахунку міжатомних силових констант можна виділити ті, які пов'язані з теорією збурень функціонала густини [1–3] та наближенням локальної густини [4–6]. Широко використовують методи визначення параметрів силових полів у твердих тілах з перших принципів [7–10]. У цій статті запропоновано метод розрахунку міжатомних силових констант та параметрів двочастинкового потенціалу взаємодії між атомами на основі рівнянь довгохвильового наближення в теорії коливань кристалічної ґратки. Основна суть цього методу полягає в тому, що, розв'язуючи згадані рівняння, на основі макроскопічних характеристик неперервного середовища (пружних констант) можна отримати в тому чи іншому вигляді інформацію про мікроскопічні характеристики кристалічної ґратки, такі, як силові константи, похідні потенціалів міжатомної взаємодії тощо. Тому одержана таким способом потенціальна енергія кристала повинна добре описувати його пружні властивості. Пружні константи кристалів, як відомо, є величинами, значення яких легкодоступні й вимірюються експериментально з порівняно високою точністю. Обчислювальну схему, описану нижче, можна застосувати до кристалічних ґраток, що мають центр інверсії.

### II. РОЗРАХУНОК МІЖАТОМНИХ СИЛОВИХ КОНСТАНТ ЯК ДИСКРЕТНИХ ВЕЛИЧИН

Розглянемо рівняння руху атома сорту  $k$  в елементарній комірці  $l$  (де  $l$  — сукупність індексів комірки  $l_1, l_2, l_3$ ) у гармонічному наближенні [11]:

$$m_k \ddot{u}_\alpha \left( \begin{matrix} l \\ k \end{matrix} \right) = - \sum_{l'k'\beta} \Phi_{\alpha\beta} \left( \begin{matrix} l & l' \\ k & k' \end{matrix} \right) u_{\beta} \left( \begin{matrix} l' \\ k' \end{matrix} \right), \quad (1)$$

де  $u_{\beta} \left( \begin{matrix} l' \\ k' \end{matrix} \right)$  —  $\beta$ -компонента відхилення атома сорту  $k'$  в комірці  $l'$  від положення рівноваги, а  $\Phi_{\alpha\beta} \left( \begin{matrix} l & l' \\ k & k' \end{matrix} \right)$  — міжатомна силова константа, що є похідною від потенціальної енергії  $\Phi$  кристала по двох якихось зміщеннях, які після диференціювання покладаються рівними нулеві:

$$\Phi_{\alpha\beta} \left( \begin{matrix} l & l' \\ k & k' \end{matrix} \right) = \left( \frac{\partial^2 \Phi}{\partial u_{\alpha} \left( \begin{matrix} l \\ k \end{matrix} \right) \partial u_{\beta} \left( \begin{matrix} l' \\ k' \end{matrix} \right)} \right)_{00}. \quad (2)$$

Тут і далі грецькі індекси означають номер проєкції в декартовій системі координат та пробігають значення 1,2,3. Переходячи стандартно до рівнянь на власні вектори і власні значення динамічної матриці та застосовуючи розклади теорії збурень за степенями модуля хвильового вектора (чи вектора хвильового числа), у довгохвильовій межі можна отримати рівняння, які збігаються з рівняннями закону Гука для пружних хвиль у середовищі. Для такого збігу повинна виконуватися умова:

$$P_{\alpha\gamma\beta\lambda} + P_{\alpha\lambda\beta\gamma} = 2[\alpha\beta, \gamma\lambda] + (\alpha\gamma, \beta\lambda) + (\alpha\lambda, \beta\gamma), \quad (3)$$

де  $P_{\alpha\gamma\beta\lambda}$  — пружні постійні кристала, для яких у цій статті вживатиметься також термін “модулі пружності”, як це зазвичай прийнято в англомовній літературі на означення коефіцієнтів лінійного розкладу компонент тензора напружень через компоненти тензора

деформації (а не навпаки). Доданки “в дужках” визначаються так:

$$[\alpha\beta, \gamma\lambda] = \frac{1}{8\pi^2 v_a} \sum_{kk'} \sqrt{m_k m_{k'}} C_{\alpha\beta, \gamma\lambda}^{(2)}(kk'), \quad (4)$$

$$\begin{aligned} (\alpha\gamma, \beta\lambda) &= -\frac{1}{4\pi^2 v_a} \sum_{kk'} \sum_{\mu\nu} \Gamma_{\mu\nu}(kk') \\ &\times \left( \sum_{k''} C_{\mu\alpha, \gamma}^{(1)}(kk'') \sqrt{m_{k''}} \right) \\ &\times \left( \sum_{k'''} C_{\nu\beta, \lambda}^{(1)}(k'k''') \sqrt{m_{k'''}} \right), \quad (5) \end{aligned}$$

$$C_{\alpha\beta, \gamma}^{(1)}(kk') = -\frac{2\pi}{\sqrt{m_k m_{k'}}} \sum_l \Phi_{\alpha\beta} \left( \begin{matrix} l \\ kk' \end{matrix} \right) x_\gamma \left( \begin{matrix} l \\ kk' \end{matrix} \right), \quad (6)$$

$$\begin{aligned} C_{\alpha\beta, \gamma\lambda}^{(2)}(kk') &= -\frac{4\pi^2}{\sqrt{m_k m_{k'}}} \sum_l \Phi_{\alpha\beta} \left( \begin{matrix} l \\ kk' \end{matrix} \right) \\ &\times x_\gamma \left( \begin{matrix} l \\ kk' \end{matrix} \right) x_\lambda \left( \begin{matrix} l \\ kk' \end{matrix} \right), \quad (7) \end{aligned}$$

$$x_\alpha \left( \begin{matrix} l \\ kk' \end{matrix} \right) = x_\alpha(l) + \eta_\alpha(k) - \eta_\alpha(k'). \quad (8)$$

Верхні індекси в дужках у правих частинах — це індекси комірок, нижні індекси ( $k, k'$  і т. д.) нумерують підґратки, тобто сорти атомів в елементарних комірках,  $v_a$  — об'єм елементарної комірки. У виразах для  $\Phi_{\alpha\beta}(\dots)$  другий індекс комірки  $l'$  опущено, оскільки силові константи залежать тільки від взаємного розташування двох атомів, отже,  $\Phi_{\alpha\beta} \left( \begin{matrix} l \\ kk' \end{matrix} \right) = \Phi_{\alpha\beta} \left( \begin{matrix} l \\ kk' \end{matrix} \right) = \Phi_{\alpha\beta} \left( \begin{matrix} l \\ kk' \end{matrix} \right)$  ( $l'$  можна покласти рівним нулеві). У рівнянні (8)  $x_\alpha(l)$  —  $\alpha$ -компонента радіус-вектора комірки  $l$ , тобто  $\mathbf{r}(l) = \sum_{\alpha=1}^3 x_\alpha(l) \mathbf{n}_\alpha$ ,  $\eta_\alpha(k)$  —  $\alpha$ -компонента вектора рівноважного положення атома сорту  $k$  в локальній системі координат комірки  $l$ . Таким чином,  $x_\alpha \left( \begin{matrix} l \\ kk' \end{matrix} \right)$  —  $\alpha$ -компонента вектора, що сполучає рівноважні положення атома сорту  $k$  в комірці з індексом  $l(l_1, l_2, l_3)$  та атома сорту  $k'$  в комірці з індексом  $0(0, 0, 0)$ . Матриця  $\Gamma_{\mu\nu}(kk')$  обернена до матриці  $C_{\mu\nu}^{(0)}(kk')$ :

$$C_{\mu\nu}^{(0)}(kk') = \frac{1}{\sqrt{m_k m_{k'}}} \sum_l \Phi_{\mu\nu} \left( \begin{matrix} l \\ kk' \end{matrix} \right), \quad (9)$$

але, окрім цього, заповнена нулями при  $k = k'$ , тобто має 3 рядки і 3 стовпці з нулів.

Рівняння (3) фактично й визначають зв'язок між макро- та мікроскопічними характеристиками кристала (пружного середовища) у довгохвильовому наближенні. Їх потрібно доповнити умовами, які повинна задовольняти потенціальна енергія кристала та її похідні за зміщеннями атомів, зокрема умови мінімуму потенціальної енергії кристала в рівноважному положенні всіх атомів. Її незмінності при переміщеннях та поворотах кристала як єдиного цілого дають такі співвідношення:

$$\left( \frac{\partial \Phi}{\partial u_\alpha \left( \begin{matrix} l \\ k \end{matrix} \right)} \right)_0 = 0, \quad (10)$$

$$\sum_{lk'} \Phi_{\alpha\beta} \left( \begin{matrix} l \\ kk' \end{matrix} \right) = 0, \quad (11)$$

$$\sum_{lk'} \Phi_{\alpha\beta} \left( \begin{matrix} l \\ kk' \end{matrix} \right) x_\gamma \left( \begin{matrix} l \\ kk' \end{matrix} \right) = \sum_{lk'} \Phi_{\alpha\gamma} \left( \begin{matrix} l \\ kk' \end{matrix} \right) x_\beta \left( \begin{matrix} l \\ kk' \end{matrix} \right). \quad (12)$$

Крім цього, здійснюючи деяку однорідну деформацію ідеальної ґратки, отримуємо тотожність:

$$\sum_{lk'} \Phi_{\alpha\beta} \left( \begin{matrix} l \\ kk' \end{matrix} \right) x_\gamma \left( \begin{matrix} l \\ kk' \end{matrix} \right) = 0. \quad (13)$$

У загальному випадку, коли кристалічна ґратка не має центра інверсії, розв'язування рівнянь (3) веде до складних і громіздких обчислень, тому що в доданки (...) у правих частинах уходять матричні елементи невідомої матриці та оберненої до неї. Розмірність цих матриць  $3(n-1) \times 3(n-1)$ , де  $n$  — кількість сортів атомів в елементарній комірці. Далі у статті буде розглянуто випадок, коли кристал має центр інверсії. У цій ситуації, як легко показати,  $C_{\alpha\beta, \gamma}^{(1)}(kk') = 0$ , тому величини  $(\alpha\beta, \gamma\lambda)$ , які входять у (3), дорівнюють нулеві при всіх можливих значеннях індексів. Унаслідок цього обчислення, пов'язані зі знаходженням міжатомних силових констант із пружних модулів, значно спрощуються, оскільки тепер (3) перетворюється на систему лінійних рівнянь стосовно невідомих  $\Phi_{\alpha\beta} \left( \begin{matrix} l \\ kk' \end{matrix} \right)$ , яка доповнюється лінійними однорідними рівняннями (10)–(13).

Отже, розгляньмо модель простої кубічної ґратки з періодом  $a$ , у кожному вузлі якої знаходиться атом з масою  $m$ , причому 0-вий вузол поміщено на початку координат. Очевидно, що тепер у наведених виразах зникнуть індекси сортів атомів та сумування по них. Далі зробимо ще припущення, що сили взаємодії між атомами є центральними й потенціальна енергія кристала є сумою двочастинкових потенціальних енергій взаємодії:

$$\Phi = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(r_{ij}). \quad (14) \quad \text{тут позначено}$$

Тепер міжатомні силові константи для випадку  $l \neq 0$  наберуть вигляду:

$$\begin{aligned} \Phi_{\alpha\beta}(l) &= \frac{V'(l)}{r(l)} \left( \frac{x_\alpha(l)x_\beta(l)}{r(l)^2} - \delta_{\alpha\beta} \right) \\ &\quad - V''(l) \frac{x_\alpha(l)x_\beta(l)}{r(l)^2}, \end{aligned} \quad (15)$$

$$V'(l) = \left. \frac{dV(r)}{dr} \right|_{r=r(l)},$$

$$V''(l) = \left. \frac{d^2V(r)}{dr^2} \right|_{r=r(l)},$$

$r(l)$  — модуль радіус-вектора атома у вузлі  $l$ . Для випадку  $l = 0$  силові константи можна отримати зі співвідношення (11). Ураховуючи, що  $v_a = a^3$ , запишемо рівняння (3), (11)–(13) так:

$$\sum_l' \left\{ V''(l) \frac{x_\alpha(l)x_\beta(l)x_\gamma(l)x_\lambda(l)}{r(l)^2} - \frac{V'(l)}{r(l)} \left( \frac{x_\alpha(l)x_\beta(l)x_\gamma(l)x_\lambda(l)}{r(l)^2} - \delta_{\alpha\beta}x_\gamma(l)x_\lambda(l) \right) \right\} = (P_{\alpha\gamma\beta\lambda} + P_{\alpha\lambda\beta\gamma})a^3, \quad (16)$$

$$\sum_l' V'(l) \frac{x_\alpha(l)}{r(l)} = 0, \quad (17)$$

$$\Phi_{\alpha\beta}(0) = \sum_l' \left\{ V''(l) \frac{x_\alpha(l)x_\beta(l)}{r(l)^2} - \frac{V'(l)}{r(l)} \left( \frac{x_\alpha(l)x_\beta(l)}{r(l)^2} - \delta_{\alpha\beta} \right) \right\}, \quad (18)$$

$$\sum_l' \left\{ V''(l) \frac{x_\alpha(l)x_\beta(l)x_\gamma(l)}{r(l)^2} - \frac{V'(l)}{r(l)} \left( \frac{x_\alpha(l)x_\beta(l)x_\gamma(l)}{r(l)^2} - \delta_{\alpha\beta}x_\gamma(l) \right) \right\} = 0. \quad (19)$$

Тут ураховано, що рівняння (12) не дають жодної нової інформації. Штрихи коло знаків сум означають відсутність доданків з  $l = 0$ . Симетрія кристалічної ґратки дає змогу встановити певну кількість незалежних пружних модулів та співвідношення між ними, які добре відомі і просто виводяться [12]. Зокрема для кубічної сингонії незалежними є лише 3 модулі пружности з 21:

$$\begin{aligned} P_{xxxx} &= P_{yyyy} = P_{zzzz}, \\ P_{xxyy} &= P_{xxzz} = P_{yyzz}, \\ P_{xyxy} &= P_{xzzz} = P_{yzyz}, \end{aligned} \quad (20)$$

всі інші  $P_{\alpha\beta\gamma\lambda}$  дорівнюють нулеві. З цього випливає, що співвідношення (16) дають 3 лінійно незалежні рівняння, (17) та (19) унаслідок симетрії ґратки задовольняються як тотожності. З умови (17) можна отримати ще одне рівняння. Якщо змістити кристал як єдине ціле в напрямку якої-небудь із координатних

осей, то вимога мінімальності потенціальної енергії залишиться, звичайно, в силі, але розташування вузлів уже не буде симетричним щодо початку координат, якщо величина зміщення не є кратною до періоду ґратки. Тому з (17) одержуємо дещо іншу умову:

$$\sum_l' \frac{V'(l)}{r(l)} = 0. \quad (21)$$

Таким чином, для простої кубічної ґратки можна отримати 4 лінійно незалежні рівняння, у яких невідомими величинами можна вважати  $V''(l)$  та, для зручності,  $V'(l)/r(l)$ . Це будуть похідні потенціалу міжатомної взаємодії для перших та других найближчих сусідів. Взаємодія між атомами, які перебувають на більших відстанях один від одного, вважається в межах такої моделі відсутньою. Отже, підсумовування здійснюється по 18-ти вузлах першої та другої координаційних сфер простої кубічної ґратки, у яких є атоми з радіус-векторами  $\mathbf{r}_1(a, 0, 0), \dots, \mathbf{r}_6(0, 0, -a)$ ,

$\mathbf{r}_7(a, a, 0), \dots, \mathbf{r}_{18}(0, -a, -a)$ . Якщо ввести позначення:

$$\begin{aligned} A_1 &= V''(l)|_{r(l)=a}, \quad A_2 = V''(l)|_{r(l)=\sqrt{2}a}, \\ B_1 &= \frac{V'(l)}{r(l)} \Big|_{r(l)=a}, \quad B_2 = \frac{V'(l)}{r(l)} \Big|_{r(l)=\sqrt{2}a}, \end{aligned} \quad (22)$$

то після підсумовування систему рівнянь (16), (21) запишемо так:

$$\begin{cases} A_1 + 2A_2 + 2B_2 = aP_{xxx} \\ 2A_2 + B_1 + 2B_2 = aP_{xyy} \\ 2(A_2 - B_2) = a(P_{xyy} + P_{xyx}) \\ B_1 = -2B_2. \end{cases} \quad (23)$$

Її розв'язки:

$$\begin{aligned} A_1 &= V''(a) = a(P_{xxx} + P_{xyy} - P_{xyx}), \\ A_2 &= V''(\sqrt{2}a) = \frac{a}{2}P_{xyy}, \\ B_1 &= \frac{V'(a)}{a} = aP_{xyy}, \\ B_2 &= \frac{V'(\sqrt{2}a)}{\sqrt{2}a} = -\frac{a}{2}P_{xyy}. \end{aligned} \quad (24)$$

Маючи ці величини, можна отримати міжатомні силові константи для будь-якої пари атомів ґратки, що перебувають у межах двох найменших відстаней. Якщо, скажімо, один із атомів є у вузлі  $0(0,0,0)$ , а інший у вузлі  $1(1,0,0)$ , то силові константи матимуть вигляд:

$$\begin{aligned} \Phi_{xy}(0) &= \Phi_{xz}(0) = \Phi_{yz}(0) = 0, \\ \Phi_{xx}(0) &= \Phi_{yy}(0) = \Phi_{zz}(0) = 2(A_1 + A_2 + B_2), \\ \Phi_{xx}(1) &= -A_1, \\ \Phi_{yy}(1) &= \Phi_{zz}(1) = \Phi_{xy}(1) = \Phi_{xz}(1) = \Phi_{yz}(1) = 0. \end{aligned} \quad (25)$$

Якщо накласти на двочастинкову функцію потенціальної енергії  $V$  сильнішу умову, а саме, що  $V' = 0$  для будь-якої пари атомів, то можна розв'язати систему рівнянь (16), вважаючи невідомими величинами  $V''$  для 3-х найменших міжатомних відстаней, тобто сумування здійснюється вже по 26-ти вузлах і ми приходимо до умови Коші для кубічної ґратки:

$$P_{xxy} = P_{xyx}, \quad (26)$$

як і має бути, тому що тепер додається умова відсутності напружень у кристалі у вихідній конфігурації.

Пониження симетрії кристалічної ґратки веде до збільшення кількості лінійно незалежних рівнянь у співвідношеннях (16), (17), (19), а це дає змогу розраховувати першу та другу похідні потенціалу, а отже, і силові константи для більшої кількості відстаней між атомами.

### III. РОЗРАХУНОК ПАРАМЕТРІВ ЗАДАНОЇ МОДЕЛІ ПОТЕНЦІАЛУ МІЖАТОМНОЇ ВЗАЄМОДІЇ

Використовуючи описаний вище метод, можна також обчислювати параметри міжатомних потенціалів, які задаються як деякі аналітичні вирази. З аналізу загального вигляду формул (16)–(19) виходить, що найпростіші обчислення можна здійснювати тоді, коли є можливість невідомі параметри двочастинкового потенціалу взаємодії виносити за знаки сум. Далі розглянемо найзручніший у цьому плані потенціал, а саме, степеневий ряд з невідомими коефіцієнтами. Кількість таких коефіцієнтів дорівнює кількості рівнянь, які можна використати. Для простої кубічної ґратки це 4. Отже, задамо двочастинковий потенціал взаємодії як функцію міжатомної відстані у вигляді:

$$V(r) = \frac{A_1}{r^{n_1}} + \frac{A_2}{r^{n_2}} + \frac{A_3}{r^{n_3}} + \frac{A_4}{r^{n_4}}, \quad (27)$$

$A_i$  — невідомі коефіцієнти відповідної розмірності. Підставляючи похідні функції  $V(r)$  у ті ж самі рівняння, що і в попередньому розділі, після нескладних перетворень отримаємо загальний вигляд системи для визначення параметрів  $A_i$ :

$$\begin{cases} f_1 A_1 + f_2 A_2 + f_3 A_3 + f_4 A_4 = v_a(P_{xyy} + P_{xyx}) \\ g_1 A_1 + g_2 A_2 + g_3 A_3 + g_4 A_4 = v_a(P_{xyy} - P_{xyx}) \\ k_1 A_1 + k_2 A_2 + k_3 A_3 + k_4 A_4 = v_a(2P_{xxx} + P_{xyy} - P_{xyx}) \\ h_1 A_1 + h_2 A_2 + h_3 A_3 + h_4 A_4 = 0. \end{cases} \quad (28)$$

Усі коефіцієнти при невідомих у системі (28) є ґратковими сумами :

$$\begin{aligned} f_i &= n_i(n_i + 2) \sum_l' \frac{x(l)^2 y(l)^2}{r(l)^{n_i+4}}, \\ g_i &= n_i \sum_l' \frac{x(l)^2}{r(l)^{n_i+2}}, \\ k_i &= n_i(n_i + 2) \sum_l' \frac{x(l)^4}{r(l)^{n_i+4}}, \\ h_i &= n_i \sum_l' \frac{1}{r(l)^{n_i+2}}. \end{aligned} \quad (29)$$

Використання симетрії кубічних ґраток дає змогу отримати такі співвідношення:

$$\sum_l' \frac{x(l)^2}{r(l)^{n_i+2}} = \frac{1}{3} \sum_l' \frac{1}{r(l)^{n_i}}, \quad (30)$$

$$\sum_l' \frac{x(l)^4}{r(l)^{n_i+4}} = \frac{1}{3} \sum_l' \frac{1}{r(l)^{n_i}} - 2 \sum_l' \frac{x(l)^2 y(l)^2}{r(l)^{n_i+4}}, \quad (31)$$

тому достатньо обчислювати лише два з чотирьох типів ґраткових сум. У таблиці 1 наведено значення двох видів сум простої кубічної ґратки для деяких натуральних значень  $n_i$ , обчислені комп'ютерним способом на основі методу, викладеного в [11]. У таблиці подано “знерозмірені” значення:

$$S_n = a^n \sum_l' \frac{1}{r(l)^n}, \quad Q_{n+4} = a^n \sum_l' \frac{x(l)^4}{r(l)^{n+4}}, \quad (32)$$

де  $a$  — період ґратки. Значення безрозмірних сум для  $n = 4$  обрховано з точністю до 4-го знака після коми.

Для  $n \geq 5$  ці суми досить швидко збігаються і можуть обчислюватися зі значно більшою точністю. Також ці та інші типи ґраткових сум можна вираховувати за допомогою перетворення еліптичних  $\theta$ -функцій [13, 14]. Ряди, які виникають при цьому, добре збігаються навіть при  $n = 4$ .

$n$	$S_n$	$Q_{n+4}$	$n$	$S_n$	$Q_{n+4}$
4	16.5323	3.9695	10	6.4261	2.0707
5	10.3775	2.7859	11	6.2923	2.0484
6	8.4019	2.4177	12	6.2021	2.0334
7	7.4670	2.2497	13	6.1405	2.0232
8	6.9458	2.1588	14	6.0981	2.0162
9	6.6288	2.1048	15	6.0687	2.0114

Таблиця 1. Значення деяких ґраткових сум простої кубічної ґратки.

Розв'язімо систему рівнянь (28) для конкретних значень степеней  $n_i$ . Виберімо, наприклад, потенціал міжатомної взаємодії таким:

$$V(r) = \frac{A_1}{r^5} + \frac{A_2}{r^6} + \frac{A_3}{r^{12}} + \frac{A_4}{r^{13}}, \quad (33)$$

який можна трактувати, скажімо, як “модифікований” потенціал Леннарда-Джонса. Зрозуміло, що чим більша кількість доданків у степеневому ряді, тим адекватніше описуватиме такий потенціал взаємодію між атомами. Для обраної моделі потенціалу система (28) набере такого вигляду:

$$\begin{cases} 11.7821 \frac{A_1}{a^8} + 9.1927 \frac{A_2}{a^9} + 2.8531 \frac{A_3}{a^{15}} + 2.3042 \frac{A_4}{a^{16}} = P_{xyxy} + P_{xyxy} \\ 17.2958 \frac{A_1}{a^8} + 16.8038 \frac{A_2}{a^9} + 24.8084 \frac{A_3}{a^{15}} + 26.6068 \frac{A_4}{a^{16}} = P_{xyxy} - P_{xyxy} \\ 97.5065 \frac{A_1}{a^8} + 116.0448 \frac{A_2}{a^9} + 341.6112 \frac{A_3}{a^{15}} + 394.5340 \frac{A_4}{a^{16}} = 2P_{xxxx} + P_{xyxy} - P_{xyxy} \\ 37.3350 \frac{A_1}{a^8} + 41.6748 \frac{A_2}{a^9} + 73.1772 \frac{A_3}{a^{15}} + 78.8931 \frac{A_4}{a^{16}} = 0. \end{cases} \quad (34)$$

Розв'язки цієї системи такі:

$$\begin{aligned} A_1 &= -a^8(0.0181P_{xxxx} + 0.8863P_{xyxy} + 0.2344P_{xyxy}), \\ A_2 &= a^9(0.0398P_{xxxx} + 2.1079P_{xyxy} - 0.0059P_{xyxy}), \\ A_3 &= a^{15}(0.9231P_{xyxy} - 0.1667P_{xxxx} - 4.7925P_{xyxy}), \\ A_4 &= a^{16}(0.1422P_{xxxx} + 3.7514P_{xyxy} - 0.7422P_{xyxy}). \end{aligned}$$

На основі цих результатів міжатомні силові константи простої кубічної ґратки можна розрахувати для будь-яких віддалей. Аналогічно можна проводити розрахунки параметрів двочастинкових потенціалів у реальних кубічних кристалах, причому співвідношення (30), (31) для об'ємноцентрованих та гранецентрованих простих кубічних ґраток також виконуються. Однак цей метод можна застосувати до реальних кристалів кубічної сингонії з певними застереженнями. Як правило, такі кристали є йонними за типом міжатомної взаємодії. По-перше, якщо описувати таку взаємодію кулонівським потенціалом, нехай навіть із закріпленими зарядами, але без екрануючих множників у вигляді функцій від відстані, то у виразах (16)–(19) і т. д. з'являються розбіжні суми. Це ж слід мати на увазі при виборі моделі потенціалу з невідомими параметрами.

По-друге, взагалі кажучи, в йонних ґратках їхні пружні властивості не можна розглядати окремо від електричних. Тому, застосовуючи метод довгих хвиль, потрібно вводити в загальній теорії додаткові параметри, такі, як напруженість макроскопічного електричного поля та вектор поляризації. Отже, узагальнюючи, стверджуємо, що описаний у цій статті метод можна застосувати у такому ж вигляді і без суттєвих обмежень до кристалічних сполук, у яких характер міжатомної взаємодії допускає використання потенціалів без кулонівських складових (кристали з ковалентною та ван-дер-ваальсівською взаємодією) і ґратки яких мають центр інверсії. Стосовно ж кубічної симетрії, то це може бути деякі інертні елементи у твердому стані.

- 
- [1] X. Gonze, Phys. Rev. A **52**, 1096 (1995).  
 [2] C. Lee, Phys. Rev. B **54**, 8973 (1996).  
 [3] X. Gonze, J.-C. Charlier, D. C. Allan, M. P. Teter, Phys. Rev. B **50**, 13035 (1994).  
 [4] S. Wei, M. Y. Chou, Phys. Rev. Lett. **69**, 2799 (1992).  
 [5] A. Fleshar, R. Resta, Phys. Rev. B **34**, 7140 (1986).  
 [6] A. A. Quong, B. M. Klein, Phys. Rev. B **46**, 10734 (1992).  
 [7] J. M. Recio, E. Francisco, M. Flórez, A. Martín Pendás, J. Phys: Condens. Matter **5**, 4975 (1993).  
 [8] S. Tsuneyuki, M. Tsukada, H. Aoki, Y. Matsui, Phys. Rev. Lett. **61**, 869 (1988).  
 [9] P. Vashishta, R. K. Kalia, G. A. Antonio, I. Ebbsjö, Phys. Rev. Lett. **62**, 1651 (1988).  
 [10] G. J. Kramer, N. P. Farragher, B. W. H. van Beest, R. A. van Santen, Phys. Rev. B **43**, 5068 (1990).  
 [11] М. Борн, Х. Кунь, *Динамическая теория кристаллических решеток* (ИЛ, Москва, 1958).  
 [12] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика. В 10-ти т. Т. VII. Теория упругости* (Наука, Москва, 1987).  
 [13] R. Dh. Misra, Proc. Cambr. Philos. Soc. **36**, 173 (1940).  
 [14] Л. С. Дубровский, Г. О. Пилоян, В. С. Урусов, Кристаллография **31**, 1214 (1986).

## CACULATION OF THE INTERATOMIC FORCE CONSTANTS FOR A CUBIC LATTICE IN THE LONG-WAVELENGTH APPROXIMATION

O. V. Knihinitskyi

*Department for Theoretical Physics, Ivan Franko National University of Lviv,  
 12 Drahomanov St., Lviv, UA-79005, Ukraine  
 E-mail: knih@ktf.franko.lviv.ua*

The long-wavelength method is applied to calculate interatomic force constants for a cubic lattice with the nearest and next-to-nearest neighbours taken into account. In the final expressions the interatomic potential parameters in the two-particle approach are represented via elastic modules of crystal. Using the numerical method the parameters of a power potential are obtained.