УДК 539.3

СИММЕТРИЯ НЕПРИВОДИМОЙ ЭНЕРГИИ *N*-АТОМНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ И АТОМИСТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ МОДУЛЕЙ УПРУГОСТИ ВЫСОКОГО ПОРЯДКА

© 2021 г. Ю. М. Гуфан^{1, *}, Е. Н. Климова², Р. А. Кутуев³

¹Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Кабардино-Балкарский государственный университет имени Х.М. Бербекова", Нальчик, Россия ²Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Донской государственный технический университет", Ростов-на-Дону, Россия ³Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Чеченский государственный университет", Грозный, Россия

> **E-mail: marina.gufan@gmail.com* Поступила в редакцию 19.04.2021 г. После доработки 12.05.2021 г. Принята к публикации 28.05.2021 г.

На сегодняшний день не создана общепринятая теория построения микроскопических моделей межатомного взаимодействия даже в простых кристаллах, состоящих из одного элемента Периодической системы, которая бы позволяла с хорошей точностью вычислять модули упругости второго и более высоких порядков. Нами рассмотрены основные этапы построения теории модулей упругости высокого порядка. Первый этап заключается в развитии метода выявления зависимости неприводимых энергий взаимодействия атомов в каждом из кластеров, второй этап состоит в нахождении такого метода суммирования неприводимых потенциальных энергий всех кластеров, чтобы полученная сумма была равной полной потенциальной энергии кристалла, вне зависимости от того, что некоторые из кластеров содержат одни и те же атомы.

DOI: 10.31857/S036767652109012X

введение

В современной литературе рассматривается большое количество разнообразных квантовохимических моделей, потенциально позволяющих вычислять механические параметры различных кристаллов. Практически все эти модели, однако, обладают принципиальными недостатками, делающими их использование в таком качестве малопродуктивным. В настоящей работе рассмотрен иной подход к построению теории механических свойств кристаллов – подход, основанный на непосредственном учете потенциальных энергий взаимодействия атомов кристалла в двух- и более атомных кластерах для вычисления потенциальной энергии взаимодействия атомов для всего кристалла. Этот подход может быть использован как непосредственно, для модели на базе микроскопических соображений, так и для выработки формы представления суммарной энергии взаимодействия атомов, вычисленной на базе какой-либо квантово-химической модели или "из первых принципов". Такая форма представления энергии позволяет предъявить к ее аналитическому выражению требования, основанные исключительно на соображениях симметрии и потому обязательные независимо от того, какая модель лежит в основе вычислений.

Модули упругости, характеризующие способность кристаллических модификаций веществ упруго деформироваться при различных механических воздействиях, напрямую определяются силами межатомных взаимодействий и, следовательно, могут быть вычислены с использованием микроскопических моделей взаимодействия между атомами плотного вещества. В настоящее время создано большое количество моделей квантовой химии, позволяющих вычислять механические свойства кристаллов, в частности модули упругости второго и более высоких порядков. К таким моделям относятся различные варианты метода псевдопотенциала (РРТ), расчетов из первых принципов (ab initio calculations), моделей, основанных на методе функционала электронной плотности (DFT), метода погруженного атома (ЕАМ) и т.п. Однако до сих пор не создано общепринятой теории построения микроскопических моделей межатомного взаимодействия даже в простых кристаллах, состоящих из одного элемента Периодической Си-

	c ₁₁	c ₁₂	c ₄₄		
(А1) Эксперимент [1]	2.25 ± 0.25, (относительная погрешность 11%)	1.6 ± 0.2, (относительная погрешность 12.5%)	0.92 ± 0.15 (относительная погрешность 16.3%)		
(А1) Эксперимент [2]	2.23 ± 0.13, (относительная погрешность 5.8%)	1.86 ± 0.15 (относительная погрешность 8%)	1.1 ± 0.04 (относительная погрешность 4%)		
(А1) Эксперимент [3]	2.38 (относительное отли- чие от других: 5.8, 6.5%)	1.58 (относительное отли- чие от других: 0.1, 16.5%)	1.28 (относительное отли- чие от других: 45.5, 14.8%)		
(<i>A</i> 1) DFT-моделирование [4]	3.25 (относительное отли- чие от эксперимента: 36, 37, 31%)	1.89 (относительное отли- чие от эксперимента: 16.6, 3.2, 18%)	1.56 (относительное отли- чие от эксперимента: 64, 33.7, 19.7%)		
(A2) Эксперимент [5] ("толстая" пленка, h = 357 Å)	1.93 погрешность не указана)	1.7 (погрешность не указана)	0.48 (погрешность не указана)		
(<i>A</i> 2) DFT-моделирование [4]	1.93 (Принято "экспери- ментально установленное значение")	2.41 (относительное отли- чие от эксперимента 34.5%)	1.31 (относительное отли- чие от эксперимента 123.8%)		

Таблица 1. Иллюстрация различий в значениях модулей упругости второго порядка кристаллов Со со структурой *A*1 и *A*2, полученных экспериментально, и вычисленных в приближении DFT

стемы, которая бы позволяла с хорошей точностью вычислять модули упругости второго и более высоких порядков. Это очевидно из того факта, что существует множество попыток построить теорию модулей упругости наиболее изученных экспериментально кристаллов элементов таблицы Менделеева. Результаты этих попыток обычно плохо согласуются между собой и отличаются от результатов прямых измерений. Приведем в качестве иллюстрации результаты сравнения модулей упругости второго порядка кристаллов Со со структурой A1 и A2, полученных экспериментально, и вычисленных в приближении DFT (табл. 1).

Существуют сложности и неоднозначности в математическом аппарате теории. Во-первых, это сложности связанные с обоснованием применимости моделей квантовой химии. Дело в том, что все модельные расчеты проводятся в приближении самосогласованного поля. В этом приближении все многочастичные (многоатомные) взаимодействия заменяются эффективным полем. Таким образом, задача взаимодействия многих тел заменяется задачей вычисления спектра одной частицы в эффективном поле, зависимость которого от модельных характеристик частицы составляет суть всех моделей. Так, в приближении локальных взаимодействий большую роль играет характер их экранирования, который является функцией f(q) волнового числа q, которая должна удовлетворять некоторым общим условиям в пределе больших и малых импульсов. В литературе было предложено несколько вариантов [6-10] зависимости f(q) для модели популярного

до сих пор локального PPT Heine-Abarenkov [11]. В табл. 2 собраны результаты вычисления модулей упругости второго и третьего порядка кристаллов Na. Приведенные в табл. 2 данные взяты из работ [12–15]. Существенным для результатов теории, основанной на моделях PPT оказывается и выбор радиуса (R) энергетической "ямы" псевдопотенциала [14].

Существенным недостатком существующих микроскопических расчетов модулей упругости является большое число подгоночных параметров теории. При модельных расчетах модули упругости металлов вычисляются, как производные соответствующего порядка от полной потенциальной энергии кристалла по компонентам тензора деформаций. В изменении полной потенциальной энергии металлов под влиянием деформаций необходимо учитывать вклад энергии свободных электронов, возможное изменение зонной структуры, энергию изменения перекрытия электронных оболочек локализованных электронов, изменения энергии взаимодействия электронов и ядер, ядер и ядер. В последних двух вкладах в энергию возникает уже затронутый выше вопрос о влиянии вида функции экранирования. В основополагающей для приближения DFT работе [16], очевидно используется семь подгоночных параметров, таких как параметры электронной поляризуемости разных порядков электронного газа в твердом теле. В [13] для определения потенциала погружения в приближении ЕАМ, необходимы 13 подгоночных параметров. Для вычисления подгоночных параметров использованы экспериментальные данные, боль-

Na	<i>c</i> ₁₁	<i>c</i> ₁₂	<i>c</i> ₄₄	$-c_{111}$	$-c_{112}$	$-c_{123}$	$-c_{144}$	$-c_{166}$	$-c_{456}$
[12]	8.21	6.83	5.77	93.5	14.4	23.0	29.8	17.2	24.8
[13]	7.59	6.33	4.3	93.5	11.4	23.0	29.8	17.2	24.8
[14] $R = 1.79 \text{ Å}$	8.08	6.68	6.24	80.6	16.6	26.6	27.8	16.8	23.4
[15] (<i>f_H</i>)	13.6	11.8	6.5	110.7	18.8	20.8	33.0	20.5	24.8
[15] (<i>f</i> _S)	9.8	8.0	6.6	90.5	13.7	23.5	29.3	16.6	24.8

Таблица 2. Иллюстрация влияния вида функции экранирования псевдопотенциала Heine—Acarenkov на получаемые в результате расчетов значения модулей упругости кристаллов Na

шинство из которых известны с погрешностью ~(20–30). Значения подгоночных параметров, приводимые в [13], содержат 9 значащих цифр, что свидетельствует о структурной неустойчивости гамильтониана, используемого в теории. В [12] для получения результатов в приближении EAM, используется 22 подгоночных параметра. В [17], при расчетах в рамках модели нелокального псевдопотенциала методом Монте Карло используется 32 подгоночных параметра (табл. 2).

Наряду с широко распространенными моделями квантовой химии не менее широко используются, так называемые, "полуэмпирические" [18] или "молекулярные" [19] модели, в которых парные и многоатомные энергии взаимодействия постулируются, без привязки к квантовому состоянию изолированных атомов [20]. В этих, "классических" (не квантовых) моделях предполагается, что полную потенциальную энергию многоатомной системы можно представить в виде бесконечной суммы неприводимых потенциальных энергий взаимодействия атомов в кластерах, состоящих из всех пар, троек, четверок и т.д. атомов, которые можно мысленно выделить в структуре вещества. Существует большое число моделей, описывающих зависимость энергии неприводимых¹ парных взаимодействий между частицами от расстояния между их центрами [21]. Различия между этими моделями в предсказании уравнений состояния проявляются уже при изучении плотных газов [20]. Выбор адекватной модели парных потенциалов взаимодействия достаточно сложная задача, не имеющая прямого теоретического решения. Метод выбора парного потенциала на основе сравнения предсказаний теории с результатами эксперимента также не может рассматриваться как достоверный. Последнее обусловлено большим числом логически равноправных видов потенциала парных взаимодействий и сильной зависимостью значений параметров, определяющих аналитический вид потенциала парных взаимодействий от аналитического вида и значений параметров, например, трехатомных потенциалов взаимодействия.

Подчеркнем, что эти же гипотезы, о виде зависимости потенциалов парных взаимодействий от расстояний между центрами атомов, приходится принимать и в моделях квантовой химии. На этом, необходимом первом шаге теории, квантовые и молекулярные модели энергий парных взаимодействий совпадают. Отличие в том, что модели квантовой химии для своего определения требуют большего числа феноменологических параметров [12, 13, 17]. При включении в теорию неприводимых энергий взаимодействия троек, четверок и т.д. атомов, молекулярные модели обладают рядом преимуществ перед приближенными вычислениями в рамках моделей квантовой химии. Одно из преимуществ состоит в более полном учете структуры кристалла. В моделях квантовой химии энергию многоатомных взаимодействий (Е) заменяют функционалом электронной плотности (р), зависящим фактически от объема (v), прихо-

дящегося на один атом: $\rho(r) \sim v^{-1}$. При расчетах электронной плотности структура кристалла учитывается только путем рассмотрения структуры, образуемой ближайшими соседями, и пренебрегается значительной частью энергии анизотропии. В теориях, основанных на рассмотрении молекулярных моделей взаимодействия полную потенциальную энергию кристалла в адиабатическом приближении представляют в виде сумм неприводимых потенциальных энергий взаимодействия атомов во всех мысленно выделяемых кластерах, которые состоят из ограниченного выбранным

¹ Неприводимой энергией взаимодействия двух атомов называется та часть полной энергии их взаимодействия, которая зависит только от расстояния между центрами двух атомов, предполагаемых сферическими. Анизотропная часть энергии взаимодействия двух атомов, зависящая от их формы, например, энергия взаимодействия диполь-заряд, диполь-диполь и т.д. входит в неприводимую энергию взаимодействия пары атомов, зависящая от их окружения, так же может быть представлена, как сумма неприводимых энергий взаимодействия трех и/или большего числа атомов, в том числе атомов пары и атомов, расположенных на соседних узлах кристаллической решетки.

приближением числа $N \le N_0$ атомов, расположенных на узлах кристаллической решетки [29]. Таким образом, наиболее простое представление полной потенциальной энергии взаимодействия атомов в кристалле в виде сумм энергий неприводимых взаимодействий в кластерах в адиабатическом приближении имеет вид [22, 23]:

$$E\left(\vec{r}_{1}, \vec{r}_{2}, \dots, \vec{r}_{n}, \dots\right) = \sum_{i} E_{1}\left(\vec{r}_{i}\right) + \sum_{i < j} E_{2}\left(\vec{r}_{ij}\right) + \\ + \sum_{i < j < k} E_{3}\left(\vec{r}_{ji}, \vec{r}_{jk}, \vec{r}_{ki}\right) + \sum_{i < j < k < l} E_{4}\left(\vec{r}_{ii}, \vec{r}_{ik}, \vec{r}_{il}, \vec{r}_{jk}, \vec{r}_{jl}, \vec{r}_{kl}\right) + \\ + \dots + \sum_{i < j < \dots < N_{0}} E_{N_{0}}\left(\vec{r}_{ij}, \dots\right) + \dots$$

$$(1)$$

В (1) первое слагаемое $\sum_{i} E_{1}(\vec{r}_{i})$ представляет собой сумму потенциальных энергий отдельных атомов в самосогласованном поле всех остальных. Слагаемое, содержащее суммы, зависящие от координат двух атомов $\sum_{i < j} E_{2}(\vec{r}_{ij})$, имеет смысл полной неприводимой энергии взаимодействия всех пар атомов с номерами *i* и *j*. Слагаемое $\sum_{i < j < k} E_{3}(\vec{r}_{ji}, \vec{r}_{jk}, \vec{r}_{ki})$ учитывает полную неприводимую потенциальную энергию взаимодействия² в кластерах, содержащих все тройки атомов с номерами *i*, *j* и *k*. Аналогично, слагаемое $\sum_{i < j < k < l} E_{4}(\vec{r}_{ii}, \vec{r}_{ik}, \vec{r}_{jl}, \vec{r}_{kl})$ представляет собой полную неприводимую потенциальную энергию взаимодействия в кластерах, содержащих четверки атомов с номерами *i*, *j*, *k* и *l*... и т.д [27, 29].

Явный вид функций $E_N(\vec{r}_{12}, \vec{r}_{23}, ..., \vec{r}_{N-1,N})$ при N == 2, 3, 4, и т.д. неизвестен. Однако, в адиабатическом приближении, используя методы теории симметрии, можно установить вид зависимости слагаемых энергии от межатомных расстояний в кластерах, содержащих конечное число атомов. Для этого достаточно учесть, что энергия неприводимых взаимодействий атомов в кластере, состояшем из *N* атомов, инвариантна относительно любых перестановок одинаковых атомов, и не зависит от расположения кластера относительно всех остальных атомов кристаллической решетки, поскольку такая зависимость описывается слагаемыми, учитывающими неприводимые энергии взаимодействия в кластерах, содержащих N + 1, N + 2, и т.д. число атомов. Другими словами, неприводимая потенциальная энергия

кластера E_N , состоящего из N одинаковых атомов, является функцией $\varphi(\vec{r}_{12}, \vec{r}_{13}, \vec{r}_{23}, ..., \vec{r}_{mn}...)$, зависящей от (N(N + 1)/2) векторов \vec{r}_{ik} , соединяющих центры положения атомов, входящих в данный кластер: $E_N = \kappa(\vec{r}_{12}, \vec{r}_{13}, \vec{r}_{23}, ..., \vec{r}_{mn}...)$. Нижние индексы у векторов \vec{r}_{ik} обозначают номера атомов в кластере или задающие их координаты [27, 28].

Известно, что для наиболее полного учета влияния внешней симметрии на свойства функций необходимо, чтобы функция могла быть представлена в виде целых рациональных функций своих аргументов, то есть функции полиномов. Любые полиномиальные функции \vec{r}_{ik} , определенные на атомах, входящих в данный кластер можно записать в виде полиномиальной функции базисных инвариантов, образующих целый рациональный базис инвариантов (ЦРБИ) представления группы $G_N = O(3) \times P_N$, построенного на компонентах векторов, входящих в полный набор векторов \vec{r}_{ik} . Как ясно из предыдущего, ЦРБИ, который будет отражать влияние внешней симметрии на вид зависимости $\phi(\vec{r}_{12}, \vec{r}_{13}, \vec{r}_{23}, ..., \vec{r}_{mn}...)$, должен вычисляться на базисных векторах представления группы $G_N = O(3) \times P_N$. Здесь O(3)-группа трехмерных вращений в евклидовом пространстве, *P_N*-представление группы перестановок N одинаковых атомов в кластере. Релевантное представление G_N должно быть реализовано на полном наборе компонент векторов \vec{r}_{ik} , как на базисных функциях [27, 29].

Если функция $\phi(\vec{r}_{12}, \vec{r}_{13}, \vec{r}_{23}, ..., \vec{r}_{mn}...)$ содержит в качестве слагаемого и/или сомножителя полином, то эта часть $\phi(\vec{r}_{12}, \vec{r}_{13}, \vec{r}_{23}, ..., \vec{r}_{mn}...)$ может быть непосредственно выражена через полиномы, входящие в ЦРБИ.

Если функция $\varphi(\vec{r}_{12}, \vec{r}_{13}, \vec{r}_{23}, ..., \vec{r}_{mn}...)$ может быть разложена в бесконечный, сходящийся ряд, то возможность использования ЦРБИ для учета ее симметрии также очевидна.

Пусть $\phi(\vec{r}_{12}, \vec{r}_{13}, \vec{r}_{23}, ..., \vec{r}_{mn}...)$ содержит сингулярность, например, в энергию включены слагаемые, описывающие кулоновские взаимодействия или взаимодействия Ван-дер-Ваальса [21, 24]. В этом случае для использования ЦРБИ необходимо ввести в рассмотрение минимальное расстояние, до которого могут сближаться атомы под действием внешнего давления [25]. Гипотеза, о минимально возможном расстоянии между атомами, исключает из потенциальной энергии сингулярную часть, сводя задачу о возможности исследования симметрийных характеристик $\phi(\vec{r}_{12}, \vec{r}_{13}, \vec{r}_{23}, ..., \vec{r}_{mn}...)$, основываясь на ЦРБИ, к одной из двух, уже описанных выше. Заметим, что гипотеза, о минимально возможном расстоянии между атомами, может быть интер-

² Неприводимой энергией взаимодействия *n* атомов E_n называют ту часть полной потенциальной энергии системы *n* атомов $E(\vec{n}, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_n)$, которая не может быть представлена в виде суммы энергий взаимодействия пар, троек... и/или *n* – 1 атомов. Например, полная потенциальная энергия кластера, состоящего из трех атомов с номерами 1, 2 и 3 имеет вид: $E(\vec{n}, \vec{r}_2, \vec{r}_3) = E_2(\vec{n}, \vec{r}_2) + E_2(\vec{r}_2, \vec{r}_3) + E_2(\vec{r}_3, \vec{n}_1) + E_3(\vec{n}, \vec{r}_2, \vec{r}_3)$. Последнее слагаемое и есть неприводимая энергия взаимодействия томов.

претирована, как ограничение на давление, используемое в эксперименте по определению модулей жесткости высокого порядка.

Неприводимая энергия двухатомного кластера (ε_2) зависит от ЦРБИ группы $G_2 = O(3) \times P_2 = D_{\infty h}$. Базис инвариантов группы G_2 , составленных из компонент вектора $\vec{r_{12}}$, состоит всего из одного инвариантного полинома, представляющего собой функцию компонент \vec{r}_{12} : r_{12}^x , r_{12}^y , r_{12}^z , а именно: $(r_{12}^x)^2 + (r_{12}^y)^2 + (r_{12}^z)^2 = \vec{r}_{12}^2$. Очевидно, что количество разных по величине слагаемых, во втором слагаемом полной потенциальной энергии (1) кристалла, в адиабатическом приближении, равно числу не эквивалентных пар атомов [26, 29].

Рассмотрим кластер, состоящий из трех одинаковых атомов с номерами *i*, *k* и *l*. ЦРБИ группы $O(3) \otimes P_3$, построенный на векторах \vec{r}_{ij} , \vec{r}_{jk} и \vec{r}_{ki} , состоит из трех полиномов [22, 23, 29], которые могут быть записаны в виде:

$$I_{1} = \vec{r}_{ij}^{2} + \vec{r}_{jk}^{2} + \vec{r}_{ki}^{2}, \quad I_{2} = \vec{r}_{ij}^{2}\vec{r}_{jk}^{2} + \vec{r}_{jk}^{2}\vec{r}_{ki}^{2} + \vec{r}_{ki}^{2}\vec{r}_{ij}^{2}, \quad I_{3} = \vec{r}_{ij}^{2}\vec{r}_{jk}^{2}\vec{r}_{ki}^{2}.$$
(2)

ЦРБИ группы $G_4 = O(3) \times P_4$, построенный из компонент векторов \vec{r}_{ij} , \vec{r}_{ik} , \vec{r}_{il} , \vec{r}_{jk} , \vec{r}_{jl} и \vec{r}_{kl} , соединяющих атомы в кластере, состоящем из четырех атомов с номерами i, j, k и l, состоит из девяти полиномов, которые могут быть представлены в виде:

$$\begin{split} Y_{1} &= \vec{r}_{ij}^{2} + \vec{r}_{ik}^{2} + \vec{r}_{il}^{2} + \vec{r}_{jk}^{2} + \vec{r}_{jl}^{2} + \vec{r}_{kl}^{2}, \\ Y_{2} &= \vec{r}_{ij}^{2} \vec{r}_{ik}^{2} + \vec{r}_{ij}^{2} \vec{r}_{il}^{2} + \vec{r}_{ij}^{2} \vec{r}_{jk}^{2} + \vec{r}_{ij}^{2} \vec{r}_{jl}^{2} + \vec{r}_{ik}^{2} \vec{r}_{jl}^{2} + \vec{r}_{ik}^{2} \vec{r}_{jl}^{2} + \vec{r}_{ik}^{2} \vec{r}_{jl}^{2} + \vec{r}_{ik}^{2} \vec{r}_{jl}^{2} + \vec{r}_{il}^{2} \vec{r}_{kl}^{2} + \vec{r}_{il}^{2} \vec{r}_{jk}^{2} + \vec{r}_{il}^{2} \vec{r}_{jk}^{2} + \vec{r}_{il}^{2} \vec{r}_{jk}^{2} + \vec{r}_{il}^{2} \vec{r}_{jk}^{2} + \vec{r}_{il}^{2} \vec{r}_{jl}^{2} \vec{r}_{kl}^{2} + \vec{r}_{il}^{2} \vec{r}_{il}^{2} \vec{r}_{il}^{2} + \vec{r}_{il}^{2} \vec{r}_{il}^{2} \vec{r}_{kl}^{2} + \vec{r}_{il}^{2} \vec{r}_{il}^{2} \vec{r}_{kl}^{2} + \vec{r}_{il}^{2} \vec{r}_{il}^{2} \vec{r}_{il}^{2} \vec{r}_{il}^{2} + \vec{r}_{il}^{2} \vec{r}_{i$$

Инварианты (2–3) описывают все допустимые симметрией виды зависимости энергий неприводимых взаимодействий в кластерах, состоящих из троек и четверок одинаковых атомов. Любая модель потенциальной энергии кристалла, учитывающая взаимодействия только в парах, тройках и четверках атомов, может быть представлена в виде сложной, возможно трансцендентной иррациональной и/или дробной функцией полиномов (2–3) [24, 29].

Группа симметрии G_N неприводимой потенциальной энергии кластера, содержащего N частиц $E_N(\vec{r}_{12}, \vec{r}_{23}, ... \vec{r}_{N-1,N})$, равна прямому произведению группы вращений трехмерного пространства (O(3)) на группу перестановок (P_N) номеров N одинаковых атомов кластера: $G_N \equiv O(3) \otimes P_N$ [27, 28].

Если два кластера частично перекрываются, то есть включают в себя несколько совпадающих атомов, то прямое однозначное разделение потенциальных энергий этих кластеров невозможно. Поэтому первая задача теории предложить и развить метод выявления зависимости неприводимых энергий взаимодействия атомов в каждом из кластеров, солержащих мысленно фиксированный атом, от взаимного расположения всех атомов, составляющих кластер. Метод должен приводить к такому виду результатов расчета, который позволит сделать следующий шаг в построении микроскопической (молекулярной) теории макроскопических характеристик кристаллов. Второй шаг построения микроскопической теории состоит в том. чтобы найти такой метод суммирования неприводимых потенциальных энергий всех кластеров, чтобы полученная сумма была равна полной потенциальной энергии кристалла, вне зависимости от того, что некоторые из кластеров содержат одни и те же атомы [27, 28].

В работе были получены все полиномиальные по радиус-векторам атомов выражения, зависимость функции потенциальной энергии взаимодействия атомов кристалла от которых, позволяет утверждать, что в этой функции адекватно (с учетом соображений симметрии) учтены взаимодействия в кластерах размером до четырех атомов включительно. Также приведены соображения относительно того, как при дальнейшем построении теории механических параметров кристалла может быть учтено пересечение многоатомных кластеров, по которым производится суммирование при вычислении потенциальной энергии взаимодействия.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Gump. J., Xia H., Chirita M. et al. // J. Appl. Phys. 1999.
 V. 86. № 11. Art. No. 6005.
- Strauss B., Frey F., Perry W. // Phys. Rev. B. 1986. V. 33. Art. No. 7852.
- Bennett B.W., Shannette G.W. // Acoust. Lett. 1980. V. 4. P. 99.
- Guo G.Y., Wang H.H. // Chin. J. Phys. 2000. V. 38. No. 5. P. 948.

- 5. Subramanian S., Sooryakumar R., Prinz G.A. et al. // Phys. Rev. B. 1994. V. 49. No. 24. Art. No. 17319.
- Pennington G., Goldsman N. // Phys. Rev. B. 2001. V. 64. Art. No. 045104.
- Nogueira F., Fiolhais C., Perdew J.P. // Phys. Rev. B. 1999. V. 59. Art. No. 2570.
- Dalgiç S., Dalgiç S., Dereli G., Tomak M. // Phys. Rev. B. 1994. V. 50. Art. No. 113.
- 9. Ghorai A. // Phys. Rev. B. 1992. V. 46. Art. No. 5229.
- 10. Singh N., Singh S.P. // Phys. Rev. B. 1990. V. 42. Art. No. 1652.
- 11. Heine V., Abarenkov I. // Phil. Mag. 1964. V. 9. P. 451.
- Chantasiriwan S., Milstein F. // Phys. Rev. B. 1998.
 V. 58. No. 10. Art. No. 5996.
- Chantasiriwan S., Milstein F. // Phys. Rev. B. 1996.
 V. 53. No. 21. Art. No. 14080.
- Tetsuro S., Granato A.V., Tomas J.F. // Phys. Rev. 1963.
 V. 175. No. 3. Art. No. 766.
- Srinivasan K.S., Gerirajan J. // Phys. Chem. Sol. 1973.
 V. 34. P. 611.
- 16. Hohenberg P., Kohn W. // Phys. Rev. 1964. 136. Art. No. B864.
- Ouma C.N.M., Mapelu M.Z., Makau N.W., Amolo G.O., Maezono R. // Phys. Rev. B. 2012. V. 86. № 10. Art. No. 104115.
- Park H., Fellinger M.R., Lenosky T.J. et al. // Phys. Rev. B. 2012. V. 85. Art. No. 214121.

- 19. Смирнов А.А. Молекулярно-кинетическая теория металлов. М.: Наука, 1966. 448 с.
- Гирифельдер Д., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. М.: Изд. ИЛ, 1961. 915 с.
- 21. Erkoc S.S. // Phys. Rep. 1997. V. 278. P. 81.
- 22. Абаренков И.В., Антонова И.М. // Зап. научн. семин. ПОМИ. 2000. Т. 269. С. 21.
- 23. Бровман Е.Г., Каган Ю.М. // УФН. 1974. Т. 112. № 3. С. 369.
- 24. Бараш Ю.С., Гинзбург В.Л. // УФН. 1984. Т. 143. № 3. С. 345.
- 25. Матвеева Н.М., Козлов Э.В. Упорядоченные фазы в металлических системах. М.: Наука, 1989. 247 с.
- 26. Гуфан А.Ю., Кукин О.В., Гуфан Ю.М., Смолин А.Ю. // ФТТ. 2012. Т. 54. № 4. С. 770.
- 27. Осипенко И.А., Гуфан А.Ю., Кукин О.В. // Изв. РАН. Сер. физ. 2013. Т. 77. № 7. С. 1017; Osipenko I.A., Kukin O.V., Gufan A.Yu. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2013. V. 77. No. 7. Р. 913.
- Кукин О.В., Гуфан Ю.М., Фомин Г.В. и др. // Изв. РАН. Сер. физ. 2016. Т. 80. № 6. С. 777; Kukin O.V., Gufan Yu.M., Fomin G.V. et al. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2016. V. 80. No. 6. Р. 707.
- Гуфан А.Ю., Гуфан Ю.М., Кукин О.В. // Изв. РАН. Сер. физ. 2014. Т. 78. № 4. С. 476; Gufan A.Yu., Gufan Yu.M., Kukin O.V. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2014. V. 78. No. 4. P. 311.

Symmetry of the non-atomic interactions of *N*-atomic energy and the atomistic theory of high-order elastic modules

Yu. M. Gufan^{a, *}, E. N. Klimova^b, R. A. Kutuev^c

^aKabardino-Balkarian State University, Nalchik, 360004 Russia
^bDon State Technical University, Rostov-on-Don, 344000 Russia
^cChechen State University, Grozny, 364000 Russia
*e-mail: marina.gufan@gmail.com

To date, no generally accepted theory has been created for constructing microscopic models of interatomic interaction, even in simple crystals consisting of one element of the Periodic Table, which would allow calculating the elastic moduli of the second and higher orders with good accuracy. We have considered the main stages of constructing the theory of high-order elastic moduli. The first stage consists in the development of a method for revealing the dependence of the irreducible energies of interaction of atoms in each of the clusters, the second stage consists in finding such a method for summing the irreducible potential energies of all clusters so that the resulting sum is equal to the total potential energy of the crystal, regardless of the fact that some of the clusters contain the same atoms.