

PACS numbers: 81.40.Lm; 81.40.Lm; 62.20.F –

## ДИНАМИКА ДЕФОРМАЦИИ СТРУКТУРНОЙ ЕДИНИЦЫ ТВЕРДОГО ТЕЛА ОТ ВНЕШНЕГО ВОЗДЕЙСТВИЯ

А.А. Мочалов, А.А. Гайша, К.Д. Евфимко\*

Национальный университет кораблестроения им. адмирала Макарова,  
пр. Героев Сталинграда 9, 54025, Николаев, Украина

\*E-mail: [idept@usmtu.edu.ua](mailto:idept@usmtu.edu.ua)

*В работе представлена модель для исследования динамики деформации твердого тела на базе метода структурных единиц. Приведены результаты решения некоторых уравнений модели. Графически представлена временная зависимость относительного смещения сечений структурной единицы в процессе одноосной продольной деформации.*

**Ключевые слова:** ДЕФОРМАЦИЯ ТВЕРДОГО ТЕЛА, МЕТОД СТРУКТУРНОЙ ЕДИНИЦЫ, ОДНООСНАЯ ПРОДОЛЬНАЯ ДЕФОРМАЦИЯ, МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ, ОБОБЩЕННЫЙ ПОТЕНЦИАЛ.

(Получено 22.04.2009, в отредактированной форме –14.05.2009)

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Современный мир сегодня испытывает значительную потребность в новых конструкционных материалах, повышаются требования к их прочности, долговечности, жаропрочности, устойчивости к динамическим нагрузкам и другим характеристикам. В этих условиях задача фундаментальной и прикладной науки – разработка теоретического обоснования, практических методов исследования, анализа и синтеза, а также методов производства современных материалов. Существенное развитие получили вычислительные технологии, что, в свою очередь, дало возможность применения новых методов и моделей для теоретического исследования свойств твердых тел. Особенно актуальны исследования кинетических аспектов процесса деформации, влияния скорости и способа нагружения образца на коэффициенты его уравнения состояния и различных кратковременных процессов, протекающих на разных стадиях деформации. В этой области сегодня проводятся и экспериментальные исследования [1-3], которые можно использовать для теоретико-экспериментальных моделей, а также исследовать математические модели на адекватность реалиям.

### 2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Существующие методы математического моделирования процессов, протекающих в сплошных средах, предполагают использование континуальных уравнений сплошной среды в частных производных, при решении которых используются разностные схемы [4-6]. При таком подходе часто экспериментально отследить изменение данных частных производных от основных параметров системы и затруднительно разглядеть физическую сущность явления при переходе вещества из одного состояния в другое. Одним из новых методов в исследовании динамики процесса деформации является метод частиц, предлагаемый в работе [7], который основан на использовании обыкновенных

дифференциальных уравнений, при помощи которых описывается динамика движения самих частиц с учетом их взаимодействия. С появлением современных многопроцессорных вычислительных систем данный метод получил развитие, но его существенным недостатком является его неприменимость к реальным кристаллическим структурам металлов, обусловленная значительной сложностью перехода от плоской задачи к решению уравнений для объемных структур.

Цель данной работы – разработка метода, позволяющего на базе теоретической модели и экспериментальных данных исследовать динамику деформации твёрдого тела.

### 3. МЕТОД СТРУКТУРНЫХ ЕДИНИЦ

Предлагаемый в настоящей работе метод структурных единиц (ячеек) подобен методу частиц, отличаясь тем, что структурная единица состоит из отдельных частиц, конфигурация которых зависит от строения веществ и существенно влияет на его свойства. Конфигурацию можно получить, используя дифракционный метод [8, 9]. В нашей работе рассматривается динамика процесса одноосной деформации гранецентрированной кубической (ГЦК) структуры металлов и сплавов, однако данный метод применим и для других типов кристаллических структур [10-12]. В качестве потенциала взаимодействия между элементами структурной единицы (атомами) используется обобщенный потенциал вида  $\Pi(r) = -D(e^{-2Ar} - 2e^{-Ar})$ , который адаптирован к реальным экспериментальным исследованиям. Параметры потенциала существенно зависят от термодинамических параметров и связаны с макроскопическими свойствами исследуемого твердого тела:  $D(P, T)$  – энергия диссоциации (энергия разрыва связей);  $r$  – вектор смещения атома от положения равновесия;  $A$  – константа, зависящая от природы соответствующего вещества. Следует отметить, что возможно использование также других потенциалов, в частности: потенциала Леннарда-Джонса, Морзе, сплайнового, обобщенного потенциала и т.д., адаптированных к структуре данного вещества [13-14].

Рассмотрим гранецентрированную (ГЦК) решетку металла, к грани которой приложена сила внешнего растяжения  $F$ . Под действием этой силы структурная единица (ячейка ГЦК) деформируется в направлении действия силы, при этом постепенно изменяются межатомные расстояния, так как начинают действовать силы взаимодействия между атомами кристаллической решетки  $f(r) = -d\Pi(r)/dr$ , обусловленные потенциалом взаимодействия  $\Pi(r)$  где  $r$  – вектор изменения межатомного расстояния.

Результирующая сила взаимодействия, действующая на  $i$ -ый атом в ячейке, является векторной суммой всех сил, действующих на атом в направлении деформации.

$$\vec{f}_{Pi}(\vec{r}_{ik}) = \sum_{i=1, i \neq k}^n \vec{f}_{Pi}(\vec{r}_{ik}) \cos(\vec{r}_{ik}, \vec{F}), \quad (1)$$

где  $\cos(\vec{r}_{ik}, \vec{F})$  – между вектором  $\vec{r}_{ik}$  и вектором действующей силы;  $\vec{F}, \vec{r}_{ik}$ , – расстояние между  $i$ -ый и  $k$ -ый атомами в соответствующей грани ячейки ( $i \neq k$ );  $n$  – число атомов в ячейке;  $\vec{f}_i(\vec{r}_{ik})$  – вектор силы взаимодействия  $i$ -ого атома ячейки с атомами ячейки. В процессе деформации атомы в сечениях будут смещаться относительно положения равновесия, что

приведет к изменению межатомных расстояний и сил взаимодействия  $\vec{f}_i(\vec{r}_{ik})$ . Радиусы  $\vec{r}_{ik}$  взаимосвязаны с продольной  $\delta_{||}$  и поперечной  $\delta_{\perp}$  деформацией ячейки, определяющимися экспериментально, которые можно найти, рассмотрев силы, действующие в сечениях ячейки (рис. 1). В векторной форме взаимосвязь координатных векторов  $\vec{r}_{ik}, \vec{r}_{mj}$  с векторами перемещений  $\vec{\delta}_{||}, \vec{\delta}_{\perp}, \Delta\vec{r}_{ii}, \Delta\vec{r}_{jj}$  для взаимодействия  $i$  и  $k$ ,  $m$  и  $j$ ,  $l$  и  $i$  атомов, входящих в структурную единицу, запишется так:

$$\begin{aligned} \vec{r}_{ik}^C + \Delta\vec{r}_{ii} + \vec{\delta}_{II} &= \vec{r}_{ik}^H + \vec{\delta}_{\perp}, \\ \vec{r}_{li}^C + \vec{r}_{\perp} + \vec{\delta}_{II} &= \vec{r}_{li}^H, \\ \vec{r}_{mj}^C + \Delta\vec{r}_{jj} &= \vec{r}_{mj}^H + \vec{\delta}_{\perp}, \\ \Delta\vec{r}_{ii} &= \Delta\vec{r}_{jj} + \vec{r}_{\perp}, \\ \Delta\vec{r}_{jj} &= \vec{\delta}_{II} = \Delta\vec{r}_{ii}, \\ \vec{r}_{\perp} &= \vec{\delta}_{\perp}\sqrt{2}, \end{aligned} \quad (2)$$

где  $\vec{r}_{ik}^C, \vec{r}_{mj}^C$ , - радиус- векторы между соответствующими атомами ячейки до деформации (старые),  $\vec{r}_{ik}^H, \vec{r}_{mj}^H$ , - радиус-векторы между соответствующими атомами ячейки после деформации за данный промежуток времени (новые).

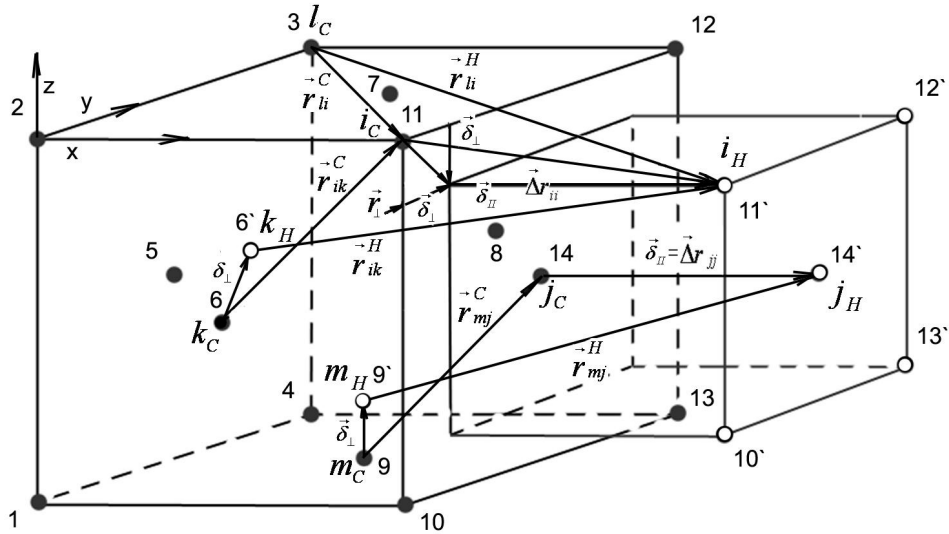


Рис. 1 – Схема сил, действующих в сечениях деформированной ячейки

На рисунке 1 показана взаимосвязь векторов, обуславливающих взаимодействие между соответствующими атомами, входящими в структурную единицу до и после взаимодействия  $i$ -  $k$ -,  $m$ -,  $j$ -,  $l$ - атомами (атомам присвоены номера 1...14, штрих обозначает положение после деформации соответственно), с векторами продольной  $\vec{\delta}_{||}$  и поперечной  $\vec{\delta}_{\perp}$  деформации ячейки, где  $i_C, k_C, m_C, j_C, l$  - обозначение частиц (атомов) в

предыдущем (начальном) состоянии, а  $i_H, k_H, m_H, j_H, l_C$  - обозначение соответствующих атомов в новом состоянии.  $\vec{r}_{ik}^C, \vec{r}_{mj}^C, \vec{r}_{li}^C, \vec{r}_{ik}^H, \vec{r}_{mj}^H, \vec{r}_{li}^H$  - радиус-векторы между соответствующими атомами, находящимися в предыдущем и новом (наступившем в результате деформации за данный промежуток времени) состоянии;  $\Delta\vec{r}_{ii}, \Delta\vec{r}_{jj}$  - результирующие векторы деформации соответствующих атомов.

Подставив значения  $\vec{r}_{ik}^H$  и  $\cos(\vec{r}_{ik}, \vec{F})$  в выражение (1) для силы  $\vec{f}_i(\vec{r}_{ik})$  и векторно просуммировав по направлениям  $x, y, z$  для всех атомов ячейки, получим:

$$\begin{aligned} \text{силы растяжения } \vec{f}_{xi} &= \sum_{i=1, i \neq k}^n \vec{f}_i(\vec{r}_{ik}) \cos(\vec{r}_{ik}, \vec{x}) - \text{ по оси } x; \\ \text{силы сжатия } \vec{f}_{yi} &= \sum_{i=1, i \neq k}^n \vec{f}_i(\vec{r}_{ik}) \cos(\vec{r}_{ik}, \vec{y}) - \text{ по оси } y; \\ \vec{f}_{zi} &= \sum_{i=1, i \neq k}^n \vec{f}_i(\vec{r}_{ik}) \cos(\vec{r}_{ik}, \vec{z}) - \text{ по оси } z. \end{aligned} \quad (3)$$

Гранецентрированная кубическая ячейка при рассмотрении общего процесса одноосной продольной деформации условно может быть поделена на 2 грани и одно сечение, соответственно грань 1, грань 3 и сечение 2 (см. рис. 2). Исходя из симметрии, результирующая сила, действующая, на грани и сечение в направлении вектора деформации с учётом (1), запишется соответственно:

$$\text{для грани 1} \quad \vec{f}_{x1} = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^4 \vec{f}_{xiP} + \vec{f}_{x5P};$$

$$\text{для сечения 2} \quad \vec{f}_{x2} = \frac{1}{2} \sum_{i=6}^9 \vec{f}_{xiP};$$

(4)

$$\text{для грани 3} \quad \vec{f}_{x3} = \frac{1}{4} \sum_{i=10}^{13} \vec{f}_{xiP} + \vec{f}_{x14P}.$$

Силы, действующие в поперечном направлении деформирующей силы  $F$ , в плоскостях ячеек 1, 2, 3, выраженные через векторы деформации и коэффициенты жесткости связей  $k_{\perp 1}, k_{\perp 2}$ , запишутся следующим образом: в гранях 1, 3:

$$\begin{aligned} f_{ik} &= -k_{\perp 1} \sqrt{\delta_y^2 + \delta_z^2} = -k_{\perp 1} \delta_{\perp} \sqrt{2} \quad (\text{для } i = 1-4 \text{ и } i = 11-14), \\ f_{ik} &= -k_{\perp 2} \delta_y = -k_{\perp 2} \delta_{\perp} \quad (\text{для } i = 6-9), \end{aligned} \quad (5)$$

где  $\delta_{\perp} = \delta_y = \delta_z$ ; а  $k_{\perp 1}$  и  $k_{\perp 2}$  - коэффициенты жесткости связи для атомов в сечении 2 и гранях 1, 2.

На рисунке 2 показано направление векторов деформации, действующих в поперечных сечениях 1, 2, 3 в структурной единице.

Из соотношения (5) следует, что силы сжатия в сечениях 1, 3 и 2 различны, соответственно и коэффициенты жесткости будут различными.

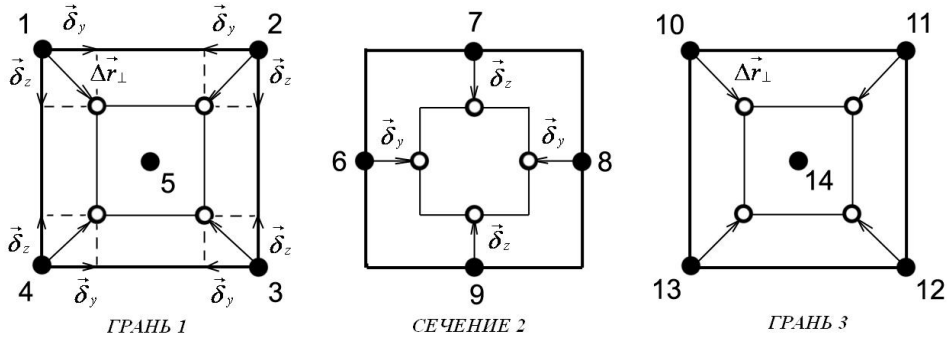


Рис. 2 – Схематическое изображение направлений векторов деформаций

Для изучения динамики (кинетики) деформации рассмотрим перемещение граней и сечений ячейки под действием внешней силы. При этом будем считать, что грани и сечения ячейки перемещаются вместе с атомами, расположенными в них, параллельно друг другу. Это дает возможность перейти к эквивалентной модели расчета перемещений граней и сечений ячейки.

Учитывая то, что коэффициент рассеяния энергии в ячейке  $\beta$  и коэффициент жесткости межатомной связи  $k$  являются функциями вектора деформации  $\beta(r)$ ,  $k(r)$ , то уравнение движения приведенных масс будет существенно нелинейным с переменными коэффициентами. В линеаризованном виде уравнения движения приведенных масс в ячейке (см. рис. 3), выраженных через скорость деформации  $d\Delta r/d\tau$  для  $i$ -го момента времени, с начальными условиями  $\tau = 0$  и  $\Delta \dot{r} = 0$ , запишутся следующим образом:

для массы  $m_1^*$

$$\frac{d\Delta \dot{r}_{1i}}{d\tau} + 2\beta_{1i-1}\Delta \dot{r}_{1i} + \int_0^\tau \frac{\Delta k_{1i-1}}{m_1^*} \Delta \dot{r}_{1i} dr = \frac{F(\tau)_i}{m_1^*}; \quad (6)$$

для массы  $m_2^*$

$$\frac{d\Delta \dot{r}_{2i}}{d\tau} + 2\beta_{2i-1}\Delta \dot{r}_{2i} + \int_0^\tau \frac{\Delta k_{2i-1}}{m_2^*} \Delta \dot{r}_{2i} dr = \frac{F(\tau)_i}{m_2^*}, \quad (7)$$

где:  $\Delta \dot{r}_i = d\Delta r_i/d\tau$  - скорость деформации в  $i$ -ый момент времени для соответствующих масс;

$\beta_{1i}$ ,  $\beta_{2i}$  - коэффициент рассеяния (диссипации) энергии при соответствующей деформации  $\Delta r_i$ ;

$\Delta k_{1i}$  и  $\Delta k_{2i}$  - коэффициент жесткости межатомной связи при соответствующей деформации  $\Delta r_i$ ;

$F(\tau)$  - внешняя сила, изменяющаяся со временем;

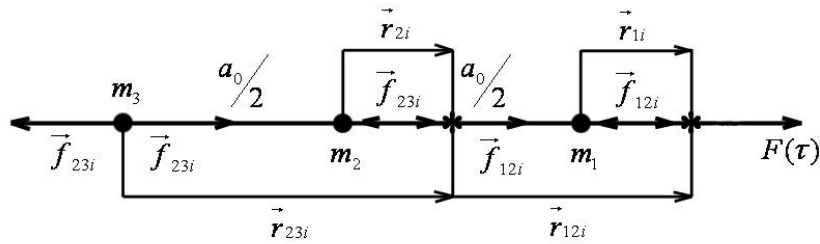
$f_{12}$  и  $f_{23}$  - силы межатомного взаимодействия, действующие в сечениях 1, 2, 3 по направлению силы деформации  $\vec{F}(\tau)$ .

Силы  $f_{12}$  и  $f_{23}$  вычисляются с использованием выражений (1) и (4) для каждого момента времени. Приращение вектора деформации в  $i$ -й момент времени для соответствующих масс можно вычислить с помощью выражения

$$\Delta r_i = \int_0^\tau \Delta r \, dr. \quad (8)$$

Связь межатомного расстояния  $r_{12}, r_{23}, r_{34}$  в произвольный  $i$ -ый момент времени при перемещении приведенных масс из положения равновесия можно выразить следующим образом:

$$r_{12i} = \frac{a_0}{2} + (\Delta r_{1i} - \Delta r_{2i}), \quad r_{23i} = \frac{a_0}{2} + (\Delta r_{2i} - \Delta r_{3i}). \quad (9)$$



**Рис. 3** - Действие сил на приведенные массы в произвольный момент времени при действии внешней силы  $\vec{F}(\tau)$ . Точками показаны начальные положения приведенных масс в ячейке; \* - положения приведенных масс в ячейке в произвольный момент времени

Работу деформации структурной единицы (ячейки) можно выразить через потенциалы взаимодействия в новом  $\Pi(r_{ik}^H)$  и старом состоянии  $\Pi(r_{ik}^C)$ , а также через векторы деформации  $\vec{r}_\perp = \vec{\delta}_\perp \sqrt{2}$ ,  $\Delta \vec{r}_{ij} = \vec{\delta}_{ij} = \Delta \vec{r}_{ji}$  используя выражения (2) и (3)

$$A_{деф}^T = \Pi(\vec{r}_{ik}^H) - \Pi(\vec{r}_{ik}^C) = \Delta \vec{r}_\parallel \left[ \sum_{i=1, i \neq k}^n \vec{f}_i(\vec{r}_{ik}^H) \cos(\vec{r}_{ik}^H, \hat{x}) - \sum_{i=1, i \neq k}^n \vec{f}_i(\vec{r}_{ik}^C) \cos(\vec{r}_{ik}^C, \hat{x}) \right] + \Delta \vec{r}_\perp \left[ \sum_{i=1, i \neq k}^n \vec{f}_i(\vec{r}_{ik}^H) \cos(\vec{r}_{ik}^H, \hat{y}) - \sum_{i=1, i \neq k}^n \vec{f}_i(\vec{r}_{ik}^C) \cos(\vec{r}_{ik}^C, \hat{y}) \right]. \quad (10)$$

С другой стороны, работу деформации можно вычислить из экспериментальных данных:

$$A_{деф}^E = \Delta \sigma \Delta V_c = \Delta \sigma (V_y^H - V_y^C), \quad (11)$$

где  $\Delta \sigma = \Delta F / S(\tau)$  - напряжение, действующее в сечении ячейки;  $\Delta F$  - внешняя сила, приложенная к грани ячейки;  $V_y^H, V_y^C$  - объем ячейки при действии силы  $\Delta F$  и до ее приложения.

Изменение объемов ячейки можно выразить через размер ячейки  $a_0$  (при  $T = T_0$ ) и модули векторов деформации.

$$\Delta V_y = 2a_0^2 (\Delta r_\parallel - \frac{2}{\sqrt{2}} \Delta r_\perp) + 4a_0 (\frac{\Delta r_\perp^2}{2} - \frac{2}{\sqrt{2}} \Delta r_\perp \Delta r_\parallel) + 4\Delta r_\perp^2 \Delta r_\parallel. \quad (12)$$

Экспериментально необходимо измерять скорость изменения сечения образца со временем  $dS(\tau)/d\tau = \dot{S}(\tau)$ , скорость деформации образца в направлении силы  $\Delta F$ ,  $dl/d\tau = \dot{l}(\tau)$ , зависимость напряжения, возникающего в сечении образца со временем  $dF(\tau)/dS(\tau) = \sigma(\tau)$ , или эти же зависимости, но как функции от векторов деформации.

На основе этих данных можно вычислить изменение объема ячейки со временем

$$\Delta V_{я}(\tau) = \int_{S_0}^S \dot{S}(\tau) d\tau \int_{l_0}^l \dot{l}(\tau) d\tau. \quad (13)$$

Уравнения (6), (7), (8) с учетом (1), (4), (9) позволяют исследовать динамику деформации тела на теоретической модели и создать совместно с экспериментальными данными функционалы: силовой, скоростной и деформационный. На базе выражений (3) и (10)-(13), с учётом  $d\Pi(r)/dr = -f$ , формируются энергетический и силовой функционалы, которые позволяют корректировать потенциал взаимодействия и силовой потенциал по экспериментальным данным.

#### 4. ВЫВОДЫ

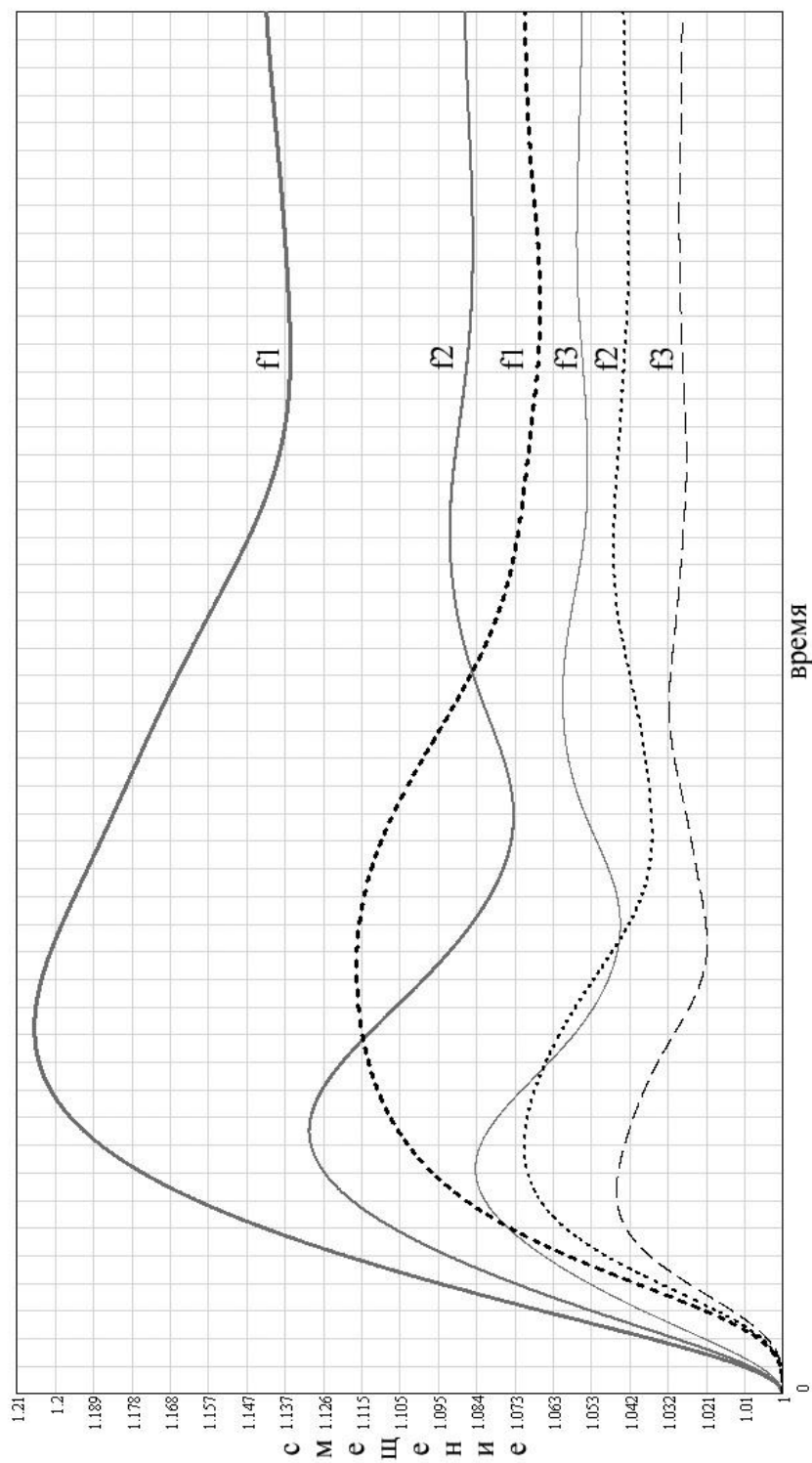
На базе силового функционала рассчитываются силы взаимодействия между атомами, входящими в элементарную ГЦК-ячейку, что позволило рассчитать смещение сечений ячейки со временем при воздействии на нее внешней силы  $F$ .

Энергетический функционал используется для описания энергетических характеристик твердого тела: теплоемкости, энтропии, внутренней энергии ячейки.

Скоростной и деформационный функционалы позволяют на базе экспериментальных исследований деформации образца (структурной единицы) корректировать теоретические энергетический и силовой функционалы относительно скорости деформации.

Минимизация этих функционалов даёт возможность вычислить значения ряда величин в зависимости от скорости нагружения образца и создать уравнение состояния вещества, которое наиболее точно определяет состояние материала в различных диапазонах деформаций, скоростей деформации и температур.

В результате решения уравнений (6), (7) получены зависимости относительного смещения сечений гранецентрированной ячейки со временем в процессе одноосной продольной деформации под воздействием внешней силы. Из рисунка 4 видно, что сила растяжения оказывает существенное влияние на переходный процесс. Запаздывание смещения сечений возникает за счет инерционных свойств материала. Данные уравнения позволяют с использованием параметров обобщенного потенциала (энергии диссоциации  $\Lambda$ ) и экспериментальных данных (структуры ячейки, межатомного расстояния, величины внешней силы) исследовать динамику деформации твердого тела при различных величинах внешней деформирующей силы. Предложенная модель позволяет объяснить природу стадий деформации с физической точки зрения.



**Рис. 4** - Зависимость относительного смещения сечения 2 (пунктир) и грани 3 (линия) гранцентрированной ячейки со временем в процессе одноосной продольной деформации под воздействием внешних сил различной величины  $f_1 > f_2 > f_3$



**DEFORMATION DYNAMICS OF THE SOLID STRUCTURAL UNIT  
FROM AN EXTERNAL ACTION**

*A.A. Mochalov, A.A. Gaisha, K.D. Evfimko*

Admiral Makarov National University of Shipbuilding,  
9, Geroev Stalingrada Ave., 54025, Nikolaev, Ukraine  
E-mail: [idept@usmtu.edu.ua](mailto:idept@usmtu.edu.ua)

*In this work we present the model for study the solid deformation dynamics based on the structural unit method. The solution results of some model equations are given. Time dependence of the sections relative displacement of a structural unit during the uniaxial longitudinal deformation is graphically represented.*

**Keywords:** SOLID DEFORMATION, STRUCTURAL UNIT METHOD, UNIAXIAL LONGITUDINAL DEFORMATION, MATHEMATICAL PROCESSES SIMULATION, GENERALIZED POTENTIAL.

**ДИНАМІКА ДЕФОРМАЦІЇ СТРУКТУРНОЇ ОДИНИЦІ ТВЕРДОГО ТІЛА  
ВІД ЗОВНІШНЬОЇ ДІЇ**

*О.О. Мочалов, О.О. Гайша, К.Д. Євфімко\**

Національний університет кораблебудування ім. адмірала Макарова  
пр. Героїв Сталінграда 9, 54025, Миколаїв, Україна  
\*E-mail: [idept@usmtu.edu.ua](mailto:idept@usmtu.edu.ua)

*У роботі представлено модель для дослідження динаміки деформації твердого тіла на базі методу структурних одиниць. Наведено результати розв'язання деяких рівнянь моделі. Графічно представлено залежність відносного зміщення структурної одиниці від часу у процесі одновісної прокольної деформації.*

**Ключові слова:** ДЕФОРМАЦІЯ ТВЕРДОГО ТІЛА, МЕТОД СТРУКТУРНИХ ОДИНИЦЬ, ОДНООСНА ПОЗДОВЖНІ ДЕФОРМАЦІЯ, МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ, УЗАГАЛЬНЕНИЙ ПОТЕНЦІАЛ.

**СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ**

1. Г. Кольский, *Механика* №4, 108 (1950).
2. А.М. Брагов, А.К. Ломунов, *Прикладные проблемы прочности и пластичности* №51, 127 (1995).
3. А.А. Мочалов, К.Д. Евfimко, *Вісник СумДУ. Серія: Фізика, математика, механіка* №1, 156 (2008).
4. В.К. Голубев, А.А. Селезнев, *Химическая физика* 2002 №10, 61 (2002).
5. В.П. Цымбал, *Математическое моделирование металлургических процессов* (М.: Металлургия, 1986).
6. И.Р. Венгеров, *ФТВД* 16 №1, 7 (2006).
7. А.М. Кривцов, Н.В. Кравцова, *Дальневосточный математический журнал ДВО РАН* 3 №2, 254 (2002).
8. Л.М. Утевский *Дифракционная электронная микроскопия в металловедении* (М.: Металлургия: 1973).
9. Я.С. Уманский, Ю.А. Скаков, А.Н. Иванов, Л.Н. Расторгуев *Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия* (М.: Металлургия: 1982).
10. А.С. Давыдов, *Теория твердого тела* (М.: Наука: 1976).
11. У. Харрисон, *Теория твердого тела* (М.: Мир: 1972).

12. А.М. Косевич, *Основы механики кристаллической решетки* (М.: Наука, 1972).
13. У. Харрисон, *Псевдопотенциалы в теории металлов* (М.: Мир: 1968).
14. Р.М. Morse, *Phys. Rev.* No34, 57 (1929).