

Шаповал Наталья Александровна, к.т.н., доцент,
доцент кафедри фізики та математики
Національний університет кораблебудування імені
адмірала Макарова

Shapoval Natalia Oleksandrivna,
PhD in Technical Sciences, Associate Professor
Admiral Makarov National University of Shipbuilding, <http://>
orcid.org/0000-0002-5452-8148

**ОБГРУНТУВАННЯ ОБЧИСЛЕННЯ КОЕФІЦІЄНТА ЖОРСТКОСТІ МІЖАТОМНИХ ЗВ'ЯЗКІВ У СТРУКТУРНИХ
ОДИНИЦЯХ РЕЧОВИНИ**
**JUSTIFICATION OF THE CALCULATION OF THE STIFFNESS COEFFICIENT OF INTERATOMIC BONDS IN STRUCTURAL
UNITS OF MATTER**

Шаповал Н. А. Обґрунтування обчислення коефіцієнта жорсткості міжатомних зв'язків у структурних одиницях речовини. *Український журнал прикладної економіки та техніки*. 2026. Том 11. № 2. С. 148 – 152.

Shapoval N. O. Justification of the calculation of the stiffness coefficient of interatomic bonds in structural units of matter. *Ukrainian Journal of Applied Economics and Technology*. 2026. Volume 11. № 2. pp. 148 – 152.

У статті розглянуто теоретико-експериментальний підхід до математичного моделювання міжатомної взаємодії у твердих тілах на мікрорівні. Проаналізовано особливості використання потенціалів міжатомної взаємодії для визначення сил взаємодії та коефіцієнтів жорсткості міжатомних зв'язків у структурних одиницях речовини. Показано, що застосування класичних континуальних моделей є недостатнім для опису фізичних властивостей матеріалів на атомарному рівні, де суттєвий вплив мають міжатомні сили та структурні характеристики речовини. У роботі використано потенціал Морзе для опису міжатомної взаємодії. На основі запропонованої математичної моделі отримано залежності для визначення коефіцієнтів жорсткості міжатомних зв'язків у гравітаційних та електростатичних полях. Розглянуто можливість використання експериментальних даних для уточнення параметрів потенціалів міжатомної взаємодії та підвищення точності математичного моделювання. Запропонована модель дозволяє визначати розподіл коефіцієнтів жорсткості в структурних одиницях речовини, розраховувати частоти коливань атомів, а також досліджувати деформаційні процеси у твердих тілах. Отримані результати можуть бути використані для дослідження фізичних властивостей матеріалів, прогнозування поведінки мікроструктур під дією зовнішніх навантажень та вдосконалення методів математичного моделювання міжатомної взаємодії.

Ключові слова: міжатомна взаємодія, коефіцієнт жорсткості, математичне моделювання, структурні одиниці речовини, міжатомні зв'язки.

The article presents a theoretical and experimental approach to the mathematical modeling of interatomic interactions in solids at the microscale, an important area of modern materials science, condensed matter physics, and solid mechanics. Existing approaches to describing interatomic forces are analyzed, demonstrating that classical continuum models are insufficient to accurately characterize the physical and mechanical properties of materials at the atomic scale, where interatomic bond characteristics, atomic arrangements, and interaction features play a decisive role. Attention is paid to the use of interatomic interaction potentials to determine interaction forces between atoms and to calculate the stiffness coefficients of interatomic bonds in structural units of matter. The Morse potential is employed to describe the energy state of the atomic system and to reproduce the fundamental features of interatomic interactions. This potential adequately accounts for both attractive and repulsive forces acting between atoms at different interatomic distances. Based on an analytical investigation of the Morse potential, mathematical relationships are derived to determine the force characteristics and stiffness coefficients of interatomic bonds in the presence of external gravitational and electrostatic fields. The proposed mathematical model combines the theoretical foundations of the atomistic approach with the ability to incorporate experimental data to refine the parameters of interatomic interaction potentials. Such an approach improves the accuracy of calculations and enhances the agreement between simulation results and the actual physical processes occurring in materials. The model enables the determination of the spatial distribution of stiffness coefficients within structural elements of matter, the calculation of natural frequencies of atomic vibrations, and the analysis of the influence of external forces on the dynamics of atomic systems. The obtained provide a basis for investigating the mechanical, elastic, and dynamic properties of materials at the micro- and nanoscale levels, predicting the behavior of microstructures under external loads and thermal and electromagnetic effects, and improving methods for mathematical modeling of interatomic interactions. The proposed approach can be applied to the development of new materials with tailored physical and mechanical properties, optimization of their structure, and assessment of their reliability under various operating conditions.

Keywords: interatomic interaction, stiffness coefficient, mathematical modeling, structural units of matter, interatomic bonds.



This is an Open Access article distributed under the terms of the Creative Commons CC-BY 4.0

© Шаповал Наталья Александровна, 2026

Вступ

Сучасний етап розвитку фізики конденсованого стану, нанотехнологій та прецизійного матеріалознавства ставить перед фундаментальною і прикладною наукою критично важливу задачу: розробку та впровадження новітніх аналітичних і чисельних методів дослідження, які здатні безпосередньо поєднувати математичне моделювання внутрішніх фізичних властивостей матеріалів із прямими інструментальними експериментами. Особливу складність і водночас наукову цінність становлять дослідження гетерогенних та монокристалічних матеріалів на мікро-, субмікро- та наноструктурних рівнях. Оскільки безпосереднє експериментальне вимірювання локальних фізико-механічних характеристик окремих структурних одиниць (кристалітів, міжкристалітних границь, атомних площин) супроводжується значними технічними труднощами та високою похибкою, виникає потреба у створенні надійних теоретико-експериментальних моделей.

Необхідно чітко констатувати, що традиційне використання класичних континуальних рівнянь для суцільних середовищ виявляється повністю неприйнятним і методологічно помилковим під час переходу на мікрорівень. Континуальний підхід ігнорує дискретність матерії, розглядаючи речовину як макроскопічно однорідне середовище з усередненими характеристиками (такими, як модуль Юнга, коефіцієнт Пуассона тощо). Проте на мікрорівні локальні пружні та пластичні властивості матеріалу починають повністю визначатися силами безпосередньої міжатомної взаємодії та просторовою конфігурацією кристалічної решітки. Спроба застосувати класичну теорію пружності до об'єктів, чий лінійні розміри співрозмірні з періодом решітки, призводить до фізичних парадоксів і хибних результатів.

Базуючись на аналізі потенціалу міжатомної взаємодії, стає можливим з високою точністю обчислити результуючу силу взаємодії між атомами та коефіцієнт жорсткості міжатомних зв'язків, який математично є градієн-

том сили (першою похідною сили за координатою або другою похідною потенціалу) в кожній конкретній точці простору структурної одиниці речовини. Ці мікроскопічні коефіцієнти жорсткості є базовими параметрами в динамічних математичних моделях деформації кристалічних ґраток, а також у моделях поширення фононних спектрів і теплових збурень. Фізичні властивості таких мікрооб'єктів мають виражений дискретний і анізотропний характер. Запропонований у даній роботі підхід дозволяє детально розрахувати просторовий розподіл потенціалу й локального коефіцієнта жорсткості міжатомних зв'язків у будь-якій точці об'єму, що відкриває шлях до точного визначення частот коливань структури у відповідних точках міжатомного простору, де відомий коефіцієнт жорсткості $k(\Delta r)$.

Історично склалося так, що під час розробки математичних моделей міжатомної та міжмолекулярної взаємодії реальні закони фундаментальних фізичних полів – гравітаційного та електростатичного – практично не враховуються в явному вигляді. Замість аналізу цих об'єктивно існуючих фізичних полів дослідники традиційно використовують широкий спектр штучно сконструйованих емпіричних або напівемпіричних потенціалів взаємодії, серед яких найбільш відомими є потенціали Леннард-Джонса, Морзе, Лі, Тейта, Бакінгема та їх багатоатомні модифікації [1]. Головна привабливість таких модельних потенціалів полягає виключно в їхній математичній зручності: вони є багатопараметричними (дво-, три-, чотири- або більше параметрів), що надає досліднику значну свободу дій.

Можливість довільного варіювання та підгону цих параметрів дозволяє авторам штучно досягати надзвичайно високого ступеня збігу результатів теоретичних розрахунків із макроскопічними даними конкретного фізичного експерименту (наприклад, збігу за енергією сублімації чи модулем об'ємного стиснення). Проте з точки зору фундаментальної фізики такий методологічний підхід не має жодного відношення до розкриття істинної фізичної сутності міжатомних процесів, а отже, подібні емпіричні залежності не можуть претендувати на статус об'єктивних законів природи.

Обчислені в рамках таких підходів параметри не є фундаментальними константами; вони є новими феноменологічними функціями, які залишаються справедливими лише для конкретної ізолюваної моделі та конкретного матеріалу в вузьких інтервалах температур і тисків. Вони не мають властивості універсальності та переносності – їх неможливо без втрати точності застосувати для опису інших речовин або фазових станів. Як наслідок, отримані результати математичного моделювання з використанням потенціалів взаємодії, які спочатку позбавлені глибокого фізичного змісту, також виявляються відірваними від реальної фізичної сутності досліджуваних систем.

Отримані величини застосовуються у математичних моделях деформації структурних елементів речовини, а також у моделях перенесення теплових збурень у мікроструктурах, фізичні властивості яких істотно відрізняються від характеристик суцільних середовищ. Це дозволяє визначити розподіл потенціалу та коефіцієнта жорсткості міжатомних зв'язків у довільних точках об'єму структурних одиниць і, відповідно, розраховувати частоти коливань структури в певних точках міжатомного простору, де відомий коефіцієнт жорсткості $k(\Delta r)$, $\left(\omega = \sqrt{\frac{k(\Delta r)}{m_{\text{ат}}}}\right)$.

Формулювання цілей статті

Розробити теоретико-експериментальну математичну модель визначення коефіцієнтів жорсткості міжатомних зв'язків у твердих тілах на основі потенціалів міжатомної взаємодії та експериментальних даних для дослідження деформаційних і коливальних процесів у структурних одиницях речовини на мікрорівні.

Виклад основного матеріалу дослідження

Коефіцієнт жорсткості визначає характер зміни сили взаємодії при варіюванні відстані між частинками та є фізично обґрунтованим параметром. Використання цього показника є особливо доцільним у межах методу структурних одиниць, згідно з яким атоми взаємодіють на відстанях порядку 10^{-10} м через гравітаційні, електростатичні та електромагнітні поля.

Для гравітаційного поля коефіцієнт жорсткості визначається на основі закону всесвітнього тяжіння з урахуванням геометричних характеристик тіл, їхньої густини та відносної відстані між ними. У результаті математичних перетворень отримуємо диференціальне рівняння зміни коефіцієнта жорсткості залежно від безрозмірної координати δ : $\frac{dk_0}{d\delta} = -\frac{2k_0}{(1+\delta)^3}$.

Розв'язком даного рівняння є вираз: $k_0 = \frac{1}{(1+\delta)^2}$.

Подібний підхід може бути застосований і до електростатичної взаємодії. Оскільки електричні заряди здебільшого зосереджені на поверхні тіл, силу електростатичної взаємодії можна подати через поверхневу густину заряду та геометричні параметри оболонок. У результаті коефіцієнт жорсткості електростатичної взаємодії описується аналогічною функціональною залежністю, як і у випадку гравітаційного поля.

На основі цього рівняння можна визначити залежність коефіцієнта жорсткості від відносної відстані δ , що подана графічно (рис. 1).

Для визначення коефіцієнта жорсткості міжатомних зв'язків конкретної речовини використаємо залежність між силою міжатомної взаємодії та коефіцієнтом жорсткості цих зв'язків $F_{\text{пр}} = \int_0^x k(x) dx = -k(x)$, де $F_{\text{пр}}$ – є результуючою силою взаємодії атомів, розташованих у перерізі, перпендикулярному до зовнішньої сили F [1, 2].

Диференціальне рівняння, що описує взаємозв'язок експериментальних параметрів і коефіцієнта жорсткості міжатомних зв'язків у безрозмірній формі, у прирістах величин $\Delta\sigma(\delta)_i$, $\Delta S(\delta)$, $\delta_i = i \cdot \Delta\delta$, $\Delta k(\delta)_i$ записується у вигляді:

$$\frac{d(\Delta\sigma)_i}{d(\Delta\delta)} \cdot \delta_i + \delta_i \frac{d(\Delta S_i)}{d(\Delta\delta)} = \frac{d(\Delta k_i)}{d(\Delta\delta)} \cdot \delta_i + (\delta_{i-1} + \Delta\delta k_i) \cdot i, \quad (1)$$

Припустимо, що значення величин у лівій частині рівняння (1) відомі з експериментальних досліджень на кожному етапі обчислень. Також вважаємо, що

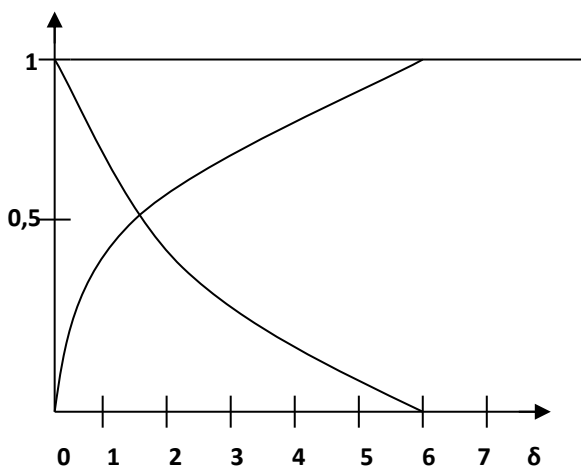


Рис. 1. Зміна відносного коефіцієнта жорсткості залежно від відносної відстані δ .

результуючий коефіцієнт жорсткості зразка $k \cdot (\delta)$, відповідно до принципу адитивності, дорівнює сумі сил взаємодії всіх атомів, розташованих на грані структурної комірки, та визначається типом кристалічної структури речовини.

Для кубічної та гранецентрованої структур кількість атомів у поперечному перерізі обчислюється відповідними співвідношеннями. Наведені залежності дають змогу перейти від сумарного експериментального коефіцієнта жорсткості міжатомних зв'язків у структурній одиниці до коефіцієнта жорсткості окремого міжатомного зв'язку. Кількість атомів, що знаходяться в перерізі зразка, обчислюється залежно від структури ґрадки.

Розв'язавши рівняння (1), враховуючи структуру ґрадки, відносно Δk_i шуканої величини для i -го кроку розбиття, отримуємо:

$$\Delta k_i = \frac{1}{i} \left(\frac{d(\Delta \sigma_i)}{d(\Delta \delta)} \cdot \dot{\sigma}_i - \dot{\sigma}_i \frac{d(\Delta \dot{\sigma}_i)}{d(\Delta \delta)} - k_{i-1} \right), \quad (3)$$

Вираз (3) дозволяє визначати коефіцієнт жорсткості міжатомних зв'язків у твердому тілі на основі експериментальних даних, за рахунок чого отримуємо сумарний коефіцієнт жорсткості Δk_i . Для переходу до атомарного коефіцієнта жорсткості необхідно скористатися співвідношенням (2) з урахуванням типу структурної комірки.

Із фізичної точки зору величина Δk_i буде відрізнятися від $\Delta k_{\text{ат}i}$ на постійне значення. Надалі під Δk_i будемо розуміти $\Delta k_{\text{ат}i}$.

Використаємо потенціал міжатомної взаємодії Морзе у загальному безрозмірному вигляді (фізичні константи наведені у [3, 4]). На його основі можна отримати теоретичні залежності для безрозмірного потенціалу $W(\Delta \delta)$ та сили міжатомної взаємодії $\dot{F}(\Delta \delta)$:

$$\frac{W(\Delta \delta)}{\varepsilon} = W(\Delta \delta) = (e^{-2a\Delta \delta} - 2e^{-a\Delta \delta}); \quad \frac{F(\Delta \delta)}{2a\varepsilon} = \dot{F}(\Delta \delta) = (e^{-2a\Delta \delta} - 2e^{-a\Delta \delta}); \quad (4)$$

у формі з розмірністю будемо мати такі вирази відповідно:

$$W(\Delta r) = \varepsilon(e^{-2a\Delta r} - 2e^{-a\Delta r}); \quad F(\Delta r) = 2a\varepsilon(e^{-2a\Delta r} - e^{-a\Delta r}).$$

Виберемо систему координат із початком у точці абсолютного нуля, де сили притягання та відштовхування врівноважуються. При зміщенні атома з положення рівноваги у напрямку Δr^+ діють сили притягання, а у напрямку Δr^- – сили відштовхування.

Враховуючи фізичну природу коефіцієнта жорсткості міжатомних зв'язків у точці рівноваги, його значення має бути відмінним від нуля, тобто $k(0) \neq 0$, що не суперечить положенням квантової механіки. Нульове значення $k(0)$ приймемо $\left. \frac{dF(\Delta r)}{d(\Delta r)} \right|_{\Delta r^{\pm}=0} = 2a^2\varepsilon$. Із цього випливає, що необхідно розглядати два коефіцієнти жорсткості: $k^+(\Delta r^+)$ – для розтягу та $k^-(\Delta r^-)$ – для стиску матеріалу. Тоді результуючий коефіцієнт жорсткості при зміщеннях Δr^+ або Δr^- можна записати так:

$$\Delta k^+(\Delta r^+) = k(0) + k^+(\Delta r^+) = 2a^2\varepsilon + k^+(\Delta r); \quad \Delta k^-(\Delta r^-) = k(0) + k^-(\Delta r^-) = 2a^2\varepsilon + k^-(\Delta r) \quad (5)$$

Використовуючи співвідношення (4) для сили міжатомної взаємодії та вираз (5), отримуємо залежність для коефіцієнта жорсткості міжатомних зв'язків у природі $\Delta k(\Delta r)$:

$$\Delta k(\Delta r) = 2a^2\varepsilon \left[\frac{1}{a\Delta r} (e^{-2ar} - e^{-a\Delta r}) - 1 \right] \quad (6)$$

Після приведення виразу (8) до безрозмірного вигляду маємо:

$$\Delta k(\delta_i)_i = \frac{1}{a} (e^{-2a\delta_i} - e^{-a\delta_i}) - 1, \quad (7)$$

Поєднання експериментальної та теоретичної складових розрахунку дає змогу на основі експериментальних результатів уточнювати значення сталих ε та a , що входять до теоретичних залежностей $W(\Delta r)$ і $F(\Delta r)$.

Отримана залежність (9) є важливою з точки зору інтерпретації механічної поведінки твердого тіла на атомарному рівні. На відміну від класичних моделей пружності, у яких коефіцієнт жорсткості вважається сталою величиною, запропонований підхід дозволяє враховувати його зміну під час деформації. Це особливо важливо під час аналізу нелінійної поведінки матеріалів, коли міжатомні відстані істотно відхиляються від рівноважних значень.

Згідно з потенціалом Морзе, зі збільшенням міжатомної відстані переважають сили притягання, тоді як зі зменшенням відстані швидко зростають сили відштовхування. Відповідно, коефіцієнт жорсткості міжатомного зв'язку є асиметричною функцією відносного зміщення атомів.

У зоні стиску спостерігається значно швидше зростання жорсткості, ніж її зменшення у зоні розтягу. Така особливість добре узгоджується з експериментально встановленими закономірностями деформування металів, керамік та інших кристалічних матеріалів.

Аналіз виразу (9) показує, що параметр $(\Delta k(\delta_i)_i)$ визначає швидкість зміни коефіцієнта жорсткості при варіюванні міжатомної відстані. Фізично цей параметр характеризує ширину потенціальної ями в міжатомній взаємодії. Для матеріалів із вузькою потенціальною ямою навіть незначна зміна міжатомної відстані призводить до суттєвої зміни сили взаємодії та коефіцієнта жорсткості. Навпаки, для матеріалів із широкою потенціальною ямою зміна жорсткості відбувається більш плавно.

Енергетичний параметр $(e^{-2a\delta_i} - e^{-a\delta_i})$ визначає глибину потенціальної ями та характеризує енергію зв'язку між атомами. Чим більше значення цього параметра, тим вищою є енергія, необхідна для руйнування міжатомного зв'язку, а отже, тим більшими є значення коефіцієнта жорсткості та опору матеріалу деформуванню. Таким чином, параметри $(\Delta k(\delta_i)_i)$ та $(e^{-2a\delta_i} - e^{-a\delta_i})$ мають чіткий фізичний зміст і можуть бути безпосередньо пов'язані з механічними властивостями матеріалу.

Практична цінність запропонованого підходу полягає в можливості визначати характеристики міжатомної взаємодії безпосередньо за результатами стандартних механічних випробувань. Використовуючи експериментальні діаграми деформування та співвідношення (3), можна отримати функцію зміни коефіцієнта жорсткості міжатомних зв'язків, а подальше узгодження її з теоретичною залежністю (7) дає змогу визначити параметри потенціалу Морзе для конкретної речовини.

Такий підхід забезпечує зв'язок між макроскопічними характеристиками матеріалу та параметрами його атомної структури. На відміну від традиційних методів визначення параметрів міжатомної взаємодії, які потребують складних спектроскопічних або квантово-механічних досліджень, запропонована методика базується на експериментально доступних характеристиках напружено-деформованого стану.

Важливою перевагою методу є можливість його застосування до широкого класу кристалічних матеріалів. При цьому врахування типу кристалічної ґратки дозволяє коректно переходити від сумарних характеристик структурної комірки до параметрів окремих міжатомних зв'язків. Це створює передумови для порівняльного аналізу різних матеріалів на єдиній фізичній основі та прогнозування їхніх механічних властивостей за параметрами міжатомної взаємодії.

Таким чином, введення коефіцієнта жорсткості міжатомних зв'язків як фундаментальної характеристики взаємодії структурних одиниць дозволяє об'єднати опис гравітаційних, електростатичних і міжатомних взаємодій у межах єдиного підходу. Отримані співвідношення створюють теоретичну основу для побудови багаторівневих моделей деформування та руйнування твердих тіл, у яких макроскопічні властивості матеріалу визначаються еволюцією параметрів міжатомної взаємодії на мікро- та нанорівнях.

Висновки та перспективи подальших розвідок

Запропонована теоретико-експериментальна математична модель визначення коефіцієнта жорсткості міжатомних зв'язків у твердих тілах дозволяє на основі експериментальних даних проводити обчислювальні дослідження та отримувати уточнені значення сталих параметрів потенціалу міжатомної взаємодії $W(\Delta r) = \varepsilon(e^{-2a\Delta r} - 2e^{-a\Delta r})$. Це, у свою чергу, забезпечує точніше визначення коефіцієнта жорсткості міжатомних зв'язків $k^+(\Delta r)$, за допомогою якого можна розраховувати зміщення атомів у структурних елементах речовини під впливом різних зовнішніх чинників [2, 3].

Застосування запропонованої математичної моделі дає можливість встановити функціональні залежності $\varepsilon = f(\Delta r)$, $a = f(\Delta r)$ та взаємозв'язки між параметрами системи, що дозволить на основі експериментальних даних визначати потенціали та коефіцієнти жорсткості міжатомних зв'язків складних структурних комірок, утворених різнорідними атомами.

Основна практична та прикладна цінність розробленої математичної моделі полягає у безпосередньому розрахунку реальної просторової залежності коефіцієнта жорсткості міжатомних зв'язків кристалічної речовини $k(\delta)$ на основі інтеграції теоретичних положень із модифікованим методом механічних випробувань. Традиційний метод дослідження міцнісних і пружних властивостей матеріалів, що базується на фіксації кривої «навантаження-подовження», доповнюється безперервним прецизійним вимірюванням поточної площі поперечного перерізу зразка безпосередньо в зоні деформації. Фізичною основою розрахунку є фундаментальний взаємозв'язок між макроскопічною зовнішньою розтягуючою силою F та мікроскопічною внутрішньою силою пружності міжатомних зв'язків атомів, що утримують живий переріз зразка.

Література

1. Зачек, І. Р., & Кравчук, І. М. (2003). *Курс фізики* (І. Є. Лопатинський, Ред.). Бескид Біт.
2. Дудчак, Я. Й., Фрейн, Д. М., Чобанюк, В. М., & Галушчак, М. О. (2000). *Фізика металів* [Навчальний посібник]. НМК ВО.
3. Курик, М., & Цмоць, В. (1985). *Фізика твердого тіла*. Вища школа.
4. Зиман, З. З. (2008). *Основи структурної кристалографії* [Навчальний посібник]. ХНУ ім. В. Н. Каразіна.
5. Tewary, V. K., & Yang, B. (2009). A parametric interatomic potential for graphene. *Physical Review B*, 79(7). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.79.075442>
6. Nguyen, D. B., & Trinh, H. P. (2021). High-pressure study of thermodynamic parameters of diamond-type structured crystals using interatomic Morse potentials. *Journal of Engineering and Applied Science*, 68. <https://doi.org/10.1186/s44147-021-00010-8>
7. Girifalco, L. A. (2000). *Statistical mechanics of solids*. Oxford University Press.

References

1. Zachek, I. R., & Kravchuk, I. M. (2003). *Kurs fizyki* [Course of physics] (I. Ye. Lopatynskiy, Ed.). Beskyd Bit.
2. Dudchak, Ya. Y., Frein, D. M., Chobaniuk, V. M., & Halushchak, M. O. (2000). *Fizyka metaliv* [Physics of metals] (Study guide). NMK VO.
3. Kuryk, M., & Tsmots, V. (1985). *Fizyka tverdogo tila* [Solid state physics]. Vyshcha Shkola.
4. Zyman, Z. Z. (2008). *Osnovy strukturnoi krystalohrafi* [Fundamentals of structural crystallography] (Study guide). V. N. Karazin Kharkiv National University.
5. Tewary, V. K., & Yang, B. (2009). A parametric interatomic potential for graphene. *Physical Review B*, 79(7). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.79.075442>
6. Nguyen, D. B., & Trinh, H. P. (2021). High-pressure study of thermodynamic parameters of diamond-type structured crystals using interatomic Morse potentials. *Journal of Engineering and Applied Science*, 68. <https://doi.org/10.1186/s44147-021-00010-8>
7. Girifalco, L. A. (2000). *Statistical mechanics of solids*. Oxford University Press.

Стаття надійшла до редакції / Received 08.05.2026

Опубліковано / Published 31.05.2026

Прийнята до друку / Accepted 20.05.2026