

УДК 537.874.001.001.001.001.001
ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ
НАУЧНОЕ СООБЩЕНИЕ

ЕФН-66(74)

И.И. Глазман, П.С. Омарян

УСТОЙЧИВОСТЬ СИЛЬНО СЖАТОГО
ВЕЩЕСТВА, СОСТОЯЩЕГО ИЗ
АТОМОВ ДВУХ СОРТОВ



И.И.ГОЛЬДМАН, П.С.ОВНАНИАН

УСТОЙЧИВОСТЬ СИЛЬНО СЖАТОГО ВЕЩЕСТВА,
СОСТОЯЩЕГО ИЗ АТОМОВ ДВУХ СОРТОВ

Вычислена кулоновская энергия решеток типа NaCl , CsCl , ZnS и ряда других. Сравнение с энергией двух (Z_1 и Z_2) объемноцентрированных однородных фаз приводит к выводу об устойчивости решеток типа NaCl и CsCl в определенной области отношений Z_2/Z_1 .

Ереванский физический институт

Ереван, 1974

Scientific Report ВФИ-66(74)

I.I. GOLDMAN, P.S. OVNIANIAN

THE STABILITY OF STRONGLY COMPRESSED MATTER
CONSISTING OF TWO TYPES OF ATOMS

Coulomb energy of NaCl , CsCl , ZnS and some other lattices is calculated. Stability of NaCl , CsCl lattices (in definite ranges of Z_2/Z_1) follows from comparison of this energy with VCC energy of homogeneous phases.

Yerevan Physics Institute

Yerevan, 1974

© Ереванский физический институт, 1974

Введения

Вещество внутри звезд и планет находится под давлениями, которые во много раз больше получаемых в лабораториях. При таких давлениях, когда Томас-Фермиевский радиус атома $z^{-1/3} a = \frac{\hbar^2}{m e^2} z^{-1/3}$ становится много больше среднего расстояния между атомами вещество полностью ионизировано. Принятое условие означает, что можно ввести безразмерный малый параметр $r_s = \frac{r_0}{a}$:

$$r_s \ll z^{-1/3}.$$

При таких плотностях главный вклад в энергию вещества даёт кинетическая энергия электронов, которая в нерелятивистском случае равна $E^{(0)} = \frac{2V}{N} \int \frac{p^2}{2m} \frac{4\pi p^3}{(2\pi)^3} = \frac{V}{N} \frac{P_0^5}{10\pi^2 m^4} = 2,87 \frac{z^{5/2}}{r_s^2}$ (в единицах $m e^4 / \text{Å}^2$), а в релятивистском $\sim \frac{1}{\alpha} \frac{z^{4/3}}{r_s}$, где $\alpha = 1/137$. Следующим по величине членом является кулоновская энергия решетки $\sim \frac{z^2}{r_s}$, энергия взаимодействия электронов с решеткой, которая в релятивистском случае имеет порядок $\frac{z^2}{2r_s} \frac{z^{1/3}}{137}$ [1], а в нерелятивистском случае $\sim z^{2,7}$ [2], и энергия взаимодействия электронов между собой [3, 4].

Как было показано в работе [1, 2, 5, 6] ион-ионная и электрон-ионная энергия существенно зависят от того, какого вида решетку образуют ядра. В работе [6] были найдены типы устойчивых

решеток. Ими оказались объемноцентрированная кубическая, грани-
центрированная кубическая и решетка типа гексагональной плотной
упаковки. Простая кубическая решетка нестабильна относительно
ромбоэдрических деформаций.

Дайсон [1] рассмотрел энергию кулоновской решетки состоящей
из зарядов двух сортов Z_1 и Z_2 . Он показал, что ядра пред-
почитают составить решетку типа $NaCl$, нежели образовывать
слои объемноцентрированных решеток с зарядами Z_1 и Z_2 .
Наиболее устойчивой оказалась структура с отношением зарядов
 $Z_2/Z_1 = 0,07$. Этому факту было дано очень наглядное объяснение,
Ядра двух типов можно представить в виде шариков с объемами
пропорциональными зарядам. Наиболее плотная упаковка получает-
ся когда шарики образуют структуру типа $NaCl$ и касаются
друг друга. Отсюда нетрудно получить, что $Z_2/Z_1 = \sqrt{1/2} = 0,071$.
В той же работе было показано, что экранировка ядер электронами
не может заметно изменить энергию связи и мало влияет на тип
устойчивой структуры. Как было показано в работах [2, 5, 6]
ион-ионную и электрон-ионную энергию решеток удобно вычислять
с помощью некоторого интегрального представления для парного
потенциала. В этой работе тем же методом рассмотрена ион-ионная
энергия различных кристаллических структур, составленных из ядер
двух сортов. Эта энергия сравнивалась с энергией чистых слоев с
объемноцентрированной структурой. При этом для каждой структуры
были введены два параметра. Один из них показывал отношение за-
рядов ядер $\chi = \frac{Z_2}{Z_1}$, другой - α соответствовал сжатию или
растяжению структур. Численные расчеты, проведенные на основе
полученных формул показывают, что структуры типа $NaCl$ и
 $CsCl$ остаются устойчивыми еще при некоторых ромбоэдрических

деформациях. Но наиболее устойчивыми остаются недеформированные
системы. Остальные рассмотренные системы при всех χ и α ока-
зались неустойчивыми.

Кулоновская энергия решетки

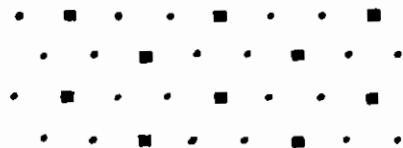
Как было показано в работах [2, 5, 6] энергию кристалличес-
кой решетки можно выразить через интегралы по эллиптическим
функциям Якоби $\mathcal{F}(z, q)$. Энергию решетки, состоящей из заря-
дов Z_1 и Z_2 мы будем сравнивать с энергией двух слоев объём-
ноцентрированной структуры, состоящей из ядер одного сорта при
том же давлении.

В приближении где плотность электронов однородна, давление
есть функция только электронной плотности и поэтому мы должны
сравнивать энергию смешанной структуры с энергией слоистой струк-
туры, содержащей то же число ядер при той же электронной плот-
ности.

Были рассчитаны модели решеток следующих типов:

- α) типа $NaCl$ т.е. две вложенные друг в друга гранецентриро-
ванные решетки со сдвигом на $(\frac{1}{2}, 0, 0)$,
- β) типа $CsCl$ - в вершинах куба ядра Z_1 , в центре Z_2
- γ) Z_1S' - тип алмаза - две вложенные гранецентрированные
решетки со сдвигом $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$,
- δ) гранецентрированная структура с соотношением числа ядер
1:3. В вершинах куба ядра Z_1 , в центрах граней - Z_2 ,
- ε) структура ромбоэдрическая I, где три плоскости содержащие
ядра Z_1 , перемежаются тремя плоскостями состоящими из ядер
 Z_2 .
- μ) структура ромбоэдрическая II, каждая из шести плоскостей ко-

торой устроена так:



Соотношения числа ядер одного сорта к числу ядер другого, в каждой плоскости равно 1 : 2, 2 : 1, 1 : 2 и т.д.

С помощью некоторого интегрального преобразования [2], выражение для энергии можно представить в виде суммы нескольких интегралов от эллиптических Ф-ий Якоби (см. приложение)

$$-E_{\text{нац}} = \frac{z_1^2 + z_2^2}{a^4 \alpha^2} \cdot 2 [T_0(\alpha, \alpha) + T_6(\alpha, \alpha) + 2T_6(\frac{1}{\alpha^2}, \alpha)] + \\ + \frac{4z_1 z_2}{a^4 \alpha^2} [T_c(\alpha, \alpha) + T_{12}(\alpha, \alpha) + 2T_c(\frac{1}{\alpha^2}, \alpha)], \quad (I)$$

где $\alpha = (\frac{c}{a})^{2/3}$ - параметр, изменение которого приводит к сжатию или растяжению решетки в одном направлении.

Энергия слоистой структуры при той же электронной плотности есть

$$-E_{\text{нац}}^+ = \frac{2^{4/3} (z_1 + z_2)^{4/3} (z_1^{5/3} + z_2^{5/3})}{a^4 \alpha^2} [T_0(\alpha, \alpha) + T_{12}(\alpha, \alpha)]. \quad (2)$$

Аналогично

$$-E_{\text{нац}} = \frac{z_1^2 + z_2^2}{2a^4 \alpha^2} T_0(\alpha, \alpha) + \frac{z_1 z_2}{a^4 \alpha^2} T_{12}(\alpha, \alpha); \quad (3)$$

$$-E_{\text{нац}}^+ = \frac{2^{-4/3} (z_1 + z_2)^{4/3} (z_1^{5/3} + z_2^{5/3})}{a^4 \alpha^2} [T_0(\alpha, \alpha) + T_{12}(\alpha, \alpha)] \quad (4)$$

$$\alpha = (c/a)^{2/3}.$$

$$-E_{2 \times 5} = 2 \frac{z_1^2 + z_2^2}{a^4 \alpha^2} [T_0(\alpha, \alpha) + 3T_6(\alpha, \alpha)] + \frac{z_1 z_2}{a^4 \alpha^2} 16K(\alpha, \alpha). \quad (5)$$

$$-E_{2 \times 5}^+ = \frac{2^{4/3} (z_1 + z_2)^{4/3} (z_1^{5/3} + z_2^{5/3})}{a^4 \alpha^2} [T_0(\alpha, \alpha) + T_{12}(\alpha, \alpha)] \quad (6)$$

$$\alpha = (c/a)^{2/3}$$

$$-E_{\text{рч.}} = \frac{z_1^2 + 3z_2^2}{2a^4 \alpha^2} T_0(\alpha, \alpha) + \frac{z_2 (z_1 + z_2)}{a^4 \alpha^2} [T_6(\alpha, \alpha) + 2T_6(\alpha, \frac{1}{\alpha^2})]. \quad (7)$$

$$-E_{\text{рч.}}^+ = \frac{(z_1 + 3z_2)^{4/3} (z_1^{5/3} + 3z_2^{5/3})}{2^{4/3} a^4 \alpha^2} [T_0(\alpha, \alpha) + T_{12}(\alpha, \alpha)] \quad (8)$$

$$\alpha = (c/a)^{2/3}.$$

Для ромбоэдрической системы I получим

$$-E_{\text{н.}} = 3 \frac{z_1^2 + z_2^2}{a^4 \alpha^2} [T_0(\alpha, \frac{\alpha}{3}) + T_6(\alpha, \frac{\alpha}{3}) + 2D(\alpha, \frac{\alpha}{3}) + 2E(\alpha, \frac{\alpha}{3})] + \\ + 6 \frac{z_1 z_2}{a^4 \alpha^2} [T_c(\alpha, \frac{\alpha}{3}) + T_{12}(\alpha, \frac{\alpha}{3}) + 2G(\frac{\alpha}{3}, \alpha) + 2H(\alpha, \frac{\alpha}{3})]. \quad (9)$$

$$-E_{n_1}^+ = \frac{3^{4/3}(z_1+z_2)^{4/3}(z_1^{5/3}+z_2^{5/3})}{a^4\alpha^2} [T_0(\alpha, \alpha) + T_{\nu}(\alpha, \alpha)] \quad (10)$$

$$\alpha = 3^{1/3} (c/a)^{2/3}.$$

Для ромбоэдрической системы системы II получим

$$-E_{n_2} = \frac{z_1^2+z_2^2}{2a^4\alpha^2} \left[18T_0(\alpha, \frac{\alpha}{3}) + 18T_6(\alpha, \frac{\alpha}{3}) + 12E(\alpha, \frac{\alpha}{3}) + 12F(\alpha, \frac{\alpha}{3}) + \right. \\ \left. + 16G(\alpha, \frac{\alpha}{3}) + 16H(\alpha, \frac{\alpha}{3}) + 32D(\alpha, \frac{\alpha}{3}) + 32B(\alpha, \frac{\alpha}{3}) + 20S(\frac{\alpha}{3}, \alpha) + \right. \\ \left. + 20R(\frac{\alpha}{3}, \alpha) + 40A(\alpha, \frac{\alpha}{3}) + 40C(\alpha, \frac{\alpha}{3}) + 24Q(\alpha, \frac{\alpha}{3}) + 24P(\alpha, \frac{\alpha}{3}) \right] + \\ + \frac{z_1 z_2}{a^4\alpha^2} \left[24E(\alpha, \frac{\alpha}{3}) + 24F(\alpha, \frac{\alpha}{3}) + 40D(\alpha, \frac{\alpha}{3}) + 40B(\alpha, \frac{\alpha}{3}) + 20G(\alpha, \frac{\alpha}{3}) + \right. \\ \left. + 20H(\alpha, \frac{\alpha}{3}) + 32A(\alpha, \frac{\alpha}{3}) + 32C(\alpha, \frac{\alpha}{3}) + 16R(\frac{\alpha}{3}, \alpha) + 16S(\frac{\alpha}{3}, \alpha) + \right. \\ \left. - 18T_6(\alpha, \frac{\alpha}{3}) + 18T_{\nu}(\alpha, \frac{\alpha}{3}) + 12P(\alpha, \frac{\alpha}{3}) + 12Q(\alpha, \frac{\alpha}{3}) \right].$$

$$-E_{n_2}^+ = \frac{3^{4/3}(z_1+z_2)^{4/3}(z_1^{5/3}+z_2^{5/3})}{a^4\alpha^2} [T_0(\alpha, \alpha) + T_{\nu}(\alpha, \alpha)] \quad (12)$$

$$\alpha = 3^{1/3} (c/a)^{2/3}.$$

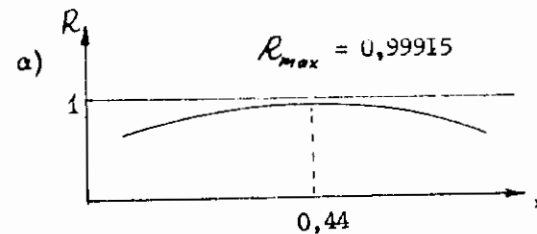
Счет на ЭВМ велся для следующих значений z_1 и z_2 :

- а) $z_1 = 1$ $z_2 = 2$
- б) $z_1 = 2$ $z_2 = 1$ (для границентрированной структ.)
- в) $z_1 = 1$ $z_2 = 1$
- г) $z_1 = 1$ $z_2 = -1$

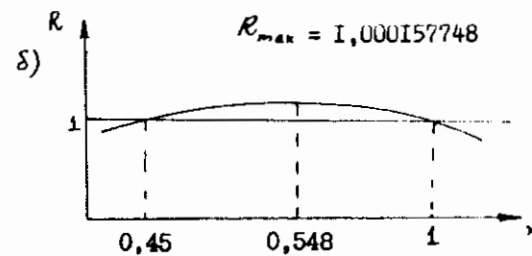
Изменяя параметр α от 0,5 до 4,2 мы искали min энергий, а также сравнивали энергии смешанной структуры с энергией слоистой.

Численный расчет показал что смешанная структура будет реализовываться только для объемноцентрированной структуры типа C_2Cl , и структуры типа $NaCl$. Поскольку ромбоэдрическая структура I при $\frac{c}{a} = \frac{\sqrt{6}}{2}$ даёт решетку типа C_2Cl , а при $\frac{c}{a} = \sqrt{6}$ решетку типа $NaCl$, то для этой структуры мы рассмотрели энергию при любых $x = z_1/2$, и для $\alpha = 3^{1/3} (c/a)^{2/3}$ около значений $\sqrt{6}$ и $\sqrt{6}/2$. Мы искали max отношения $R = \frac{E}{E^+}$ в зависимости от x при разных α .

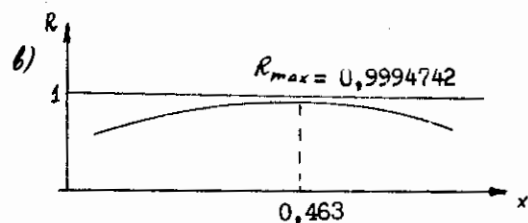
Результаты показаны на графиках



$$\alpha = 1,5509$$

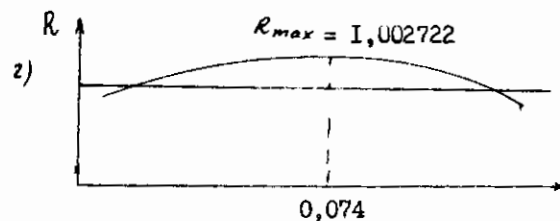


$$\alpha = 1,6509$$

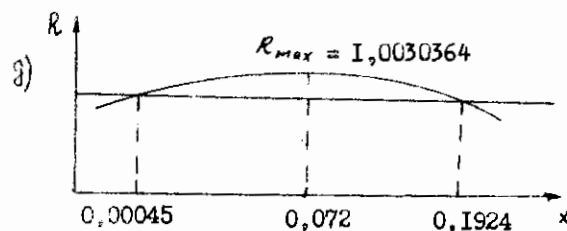


$$\alpha = 1,7509$$

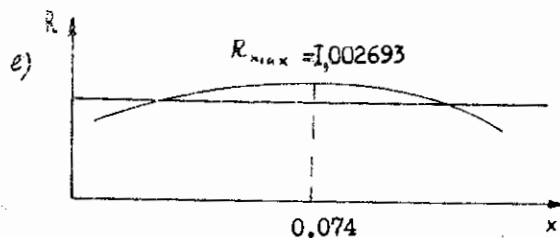
При $\alpha = 1,6509$ ромбоэдрическая структура I даёт структуру типа C_2Cl .



$$\alpha = 2,52074$$



$$\alpha = 2,62074$$



$$\alpha = 2,72074$$

При $\alpha = 2,62074$ ромбоэдрическая структура I даёт структуру типа N_2Cl .

График б) соответствует структуре типа C_2Cl , а график

з) структуре типа N_2Cl . Видно, что при отклонениях от идеальной кубической системы (графики г) и е) будут образовываться смешанные структуры. Наблюдается некоторая разница в пятом знаке с аналогичными данными, полученными Дэйсоном в работе [1].

Аналогичные расчеты для остальных структур дали следующие результаты. Для структуры типа ZnS максимум $R_{z,s}$ осуществляется при $x = 0$, $\alpha = 1$ и равен

$$R_{z,s}(x=0; \alpha=1) = 0,99993796,$$

$$R_{z,s}(x=1; \alpha=1) = 0,93246839,$$

для границентрированной структуры

$$R_{z,c}(x=1; \alpha=1) = 0,99993796,$$

для ромбоэдрической структуры II

$$R_{r_1}(x=1; \alpha=1) = 0,99305861$$

$$R_{r_2}(x=1, \alpha=1,08) = 0,99885804.$$

Таким образом все величины R в некоторых областях x и α очень близки к единице, и следовательно вопрос об устойчивости может решиться лишь после рассмотрения следующих по величине вкладов в энергию вещества.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Кулоновский потенциал можно представить в виде

$$\frac{1}{r} = \lim_{x \rightarrow 0} \frac{e^{-xr}}{r}$$

$$\frac{e^{-xr}}{r} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \int_0^{\infty} d\lambda \lambda^{-3/2} \exp\left\{-\lambda x^2 - \frac{r^2}{4\lambda}\right\}.$$

Просуммируем подынтегральное выражение по всем узлам решетки.

Введем

$$\omega(x) = \sum_{-\infty}^{\infty} e^{-\pi n^2 x}$$

$$\omega(x) = \frac{1}{\sqrt{x}} \omega\left(\frac{1}{x}\right); \quad \omega(x)\Big|_{x \rightarrow \infty} = 1; \quad \omega(x)\Big|_{x \rightarrow 0} = x^{-1/2}$$

$$\sum_{l, m, n} e^{-\frac{r^2}{4\lambda}} = \sum_{l, m, n} \exp\left\{-\frac{a^2 l^2 + b^2 m^2 + c^2 n^2}{4\lambda}\right\} = \omega\left(\frac{a^2}{4\pi\lambda}\right) \omega\left(\frac{b^2}{4\pi\lambda}\right) \omega\left(\frac{c^2}{4\pi\lambda}\right)$$

$$\vec{r} = a\vec{l} + b\vec{m} + c\vec{n}.$$

Устраним самодействие, для этого исключим член с

$(l=m=n=0)$. Тогда

$$E \sim \int_0^{\infty} d\lambda \lambda^{-3/2} e^{-x^2 \lambda} [\omega\omega\omega - 1]$$

от интегрирования по λ перейдем к переменной τ

$$E \sim (abc)^{-1/2} \int_0^{\infty} d\tau e^{-x_0^2 \tau} [\omega(\alpha\tau)\omega(\beta\tau)\omega(\gamma\tau) - 1],$$

где $\frac{4\pi a^2}{a^2} = \alpha\tau$; $\frac{4\pi b^2}{b^2} = \beta\tau$; $\frac{4\pi c^2}{c^2} = \gamma\tau$;

$$\alpha\beta\gamma = 1$$

$$\frac{(abc)^{2/3}}{4\pi} x = x_0; \quad \tau = \frac{4\pi\lambda}{(abc)^{2/3}}; \quad \lambda x^2 = \tau x_0^2.$$

Энергия взаимодействия ядер с равномерным фоном

$$\bar{E} \sim - \int \frac{d\vec{r}}{abc} \frac{e^{-2r}}{r} = - \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \int_0^{\infty} d\lambda \lambda^{-3/2} e^{-\lambda x^2} \int \frac{d\vec{r}}{abc} e^{-r^2/4\lambda} =$$

$$\therefore \dots = - (abc)^{-1/2} \int_0^{\infty} d\tau e^{-x_0^2 \tau}.$$

Потенциал создаваемый простой ортогональной решеткой в точке с координатами (x, y, z) вычисляется аналогично

Введем

$$\theta(u; t) = \sum_{-\infty}^{\infty} \exp\{-\pi n^2 t + 2\pi i n u\}$$

$$\theta(u; t) = \mathcal{V}_3(z, q) \quad \text{где} \quad q = e^{-\pi t}; \quad z = \pi a$$

$$\theta(z; t) = 1 + 2q \cos 2\pi u + 2q^4 \cos 4\pi u + 2q^9 \cos 6\pi u + \dots$$

Пусть $\vec{\lambda} = a\vec{l} + b\vec{m} + c\vec{n}$ - вектор решетки

Тогда

$$\sum \frac{ze}{|\vec{r} - \vec{\lambda}|} \cdot \exp\{-x|\vec{r} - \vec{\lambda}|\} =$$

$$= ze (abc)^{-1/2} \int_0^{\infty} \theta\left(\frac{x}{a}, \alpha\tau\right) \theta\left(\frac{y}{b}, \beta\tau\right) \theta\left(\frac{z}{c}, \gamma\tau\right) e^{-x_0\tau}.$$

С учетом фона получим для потенциала в точке (x, y, z)

$$V(x, y, z) = \frac{ze}{(abc)^{1/2}} \int_0^{\infty} \left[\theta\left(\frac{x}{a}, \alpha\tau\right) \theta\left(\frac{y}{b}, \beta\tau\right) \theta\left(\frac{z}{c}, \gamma\tau\right) - 1 \right] d\tau.$$

Введем обозначения : $\theta(\theta, t) = \omega(t)$

$$\theta(\frac{1}{2}, t) = \eta(t)$$

$$\theta(\frac{1}{3}, t) = \rho(t)$$

$$\theta(\frac{1}{4}, t) = \varphi(t)$$

$$\theta(\frac{1}{5}, t) = \zeta(t).$$

А также новые функции

$$\xi(t) = \frac{1}{\sqrt{t}} \eta(\frac{1}{t})$$

$$\nu(t) = \frac{1}{\sqrt{t}} \rho(\frac{1}{t})$$

$$\pi(t) = \frac{1}{\sqrt{t}} \varphi(\frac{1}{t})$$

$$\mu(t) = \frac{1}{\sqrt{t}} \zeta(\frac{1}{t}).$$

Интегралы по θ - функциям можно считать на ЭВМ. Обозначим

$$T_0(\alpha, \beta) = \int_0^{\infty} [1 - \tau^{-\frac{3}{2}} - \omega(\alpha\tau)\omega(\beta\tau)\omega(\frac{\tau}{\alpha\beta})] d\tau$$

$$T_\theta(\alpha, \beta) = \int_0^{\infty} [1 - \eta(\alpha\tau)\eta(\beta\tau)\omega(\frac{\tau}{\alpha\beta})] d\tau$$

$$T_\nu(\alpha, \beta) = \int_0^{\infty} [1 - \eta(\alpha\tau)\eta(\beta\tau)\eta(\frac{\tau}{\alpha\beta})] d\tau$$

$$T_\zeta(\alpha, \beta) = \int_0^{\infty} [1 - \omega(\alpha\tau)\omega(\beta\tau)\eta(\frac{\tau}{\alpha\beta})] d\tau$$

$$R(\alpha, \beta) = \int_0^{\infty} [1 - \eta(\alpha\tau)\zeta(\beta\tau)\rho(\frac{\tau}{\alpha\beta})] d\tau$$

$$S(\alpha, \beta) = \int_0^{\infty} [1 - \omega(\alpha\tau)\rho(\beta\tau)\rho(\frac{\tau}{\alpha\beta})] d\tau$$

$$P(\alpha, \beta) = \int_0^{\infty} [1 - \eta(\alpha\tau)\zeta(\beta\tau)\eta(\frac{\tau}{\alpha\beta})] d\tau$$

- 14 -

$$Q(\alpha, \beta) = \int_0^{\infty} [1 - \omega(\alpha\tau)\rho(\beta\tau)\eta(\frac{\tau}{\alpha\beta})] d\tau$$

$$A(\alpha, \beta) = \int_0^{\infty} [1 - \rho(\alpha\tau)\rho(\beta\tau)\rho(\frac{\tau}{\alpha\beta})] d\tau$$

$$B(\alpha, \beta) = \int_0^{\infty} [1 - \zeta(\alpha\tau)\zeta(\beta\tau)\zeta(\frac{\tau}{\alpha\beta})] d\tau$$

$$C(\alpha, \beta) = \int_0^{\infty} [1 - \zeta(\alpha\tau)\zeta(\beta\tau)\rho(\frac{\tau}{\alpha\beta})] d\tau$$

$$D(\alpha, \beta) = \int_0^{\infty} [1 - \rho(\alpha\tau)\rho(\beta\tau)\zeta(\frac{\tau}{\alpha\beta})] d\tau$$

$$E(\alpha, \beta) = \int_0^{\infty} [1 - \omega(\alpha\tau)\rho(\beta\tau)\omega(\frac{\tau}{\alpha\beta})] d\tau$$

$$F(\alpha, \beta) = \int_0^{\infty} [1 - \eta(\alpha\tau)\zeta(\beta\tau)\omega(\frac{\tau}{\alpha\beta})] d\tau$$

$$G(\alpha, \beta) = \int_0^{\infty} [1 - \rho(\alpha\tau)\omega(\beta\tau)\zeta(\frac{\tau}{\alpha\beta})] d\tau$$

$$H(\alpha, \beta) = \int_0^{\infty} [1 - \eta(\alpha\tau)\zeta(\beta\tau)\zeta(\frac{\tau}{\alpha\beta})] d\tau$$

$$K(\alpha, \beta) = \int_0^{\infty} [1 - \varphi(\alpha\tau)\varphi(\beta\tau)\varphi(\frac{\tau}{\alpha\beta})] d\tau.$$

Интегралы от 0 до ∞ разбиваем на два интеграла по областям

$\int_0^s + \int_s^{\infty}$, в первом интеграле делаем замену переменных $\tau = \frac{1}{x}$ и получаем $\int_{\frac{1}{s}}^1 + \int_1^{\infty}$. В зависимости от точности вычисления, верхние пределы заменяем некоторыми числами

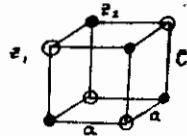
$$\int_{\frac{1}{s}}^M + \int_{L^{-1}}^L$$

- 15 -

1. Энергия решетки типа $NaCl$

Ядра z_1 и z_2 образуют гранецентрированную ромбическую (ортогональную) решетку со сдвигами $(\frac{1}{2}, 0, 0)$ по осям x, y, z . Размеры ячеек по этим осям равны $2a, 2a, 2c$.

Выбор a и c



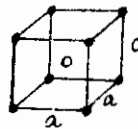
показан на рисунке

Гранецентрированную решетку можно представить в виде 4 вложенных друг в друга простых решеток со сдвигами $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$; $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$; $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$. А сдвиги простых решеток на z_1 относительно z_2 , будут $(\frac{1}{2}, 0, 0)$; $(0, \frac{1}{2}, 0)$; $(0, 0, \frac{1}{2})$; $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$. Учитывая, что $\alpha = \beta$; $\gamma = \frac{1}{2}$ $\alpha = (c/a)^{2/3}$ получим для энергии такой решетки выражение (1).

2. Энергия решетки типа $CaCl$

В вершинах прямой призмы с квадратным основанием находятся ядра z_1 , а в центре призмы ядро z_2 .

В простую решетку из зарядов z_1



вложена простая решетка

из зарядов z_2 , сдвинутся относительно первой на $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$. Учитывая, что и здесь $\alpha = \beta = (c/a)^{2/3}$; $\gamma = 1/\alpha^2$ получим для энергии выражение (3).

3. Энергия двух слоев

Энергию каждой решетки мы должны сравнивать с энергией двух слоев из зарядов z_1 и z_2 образующих каждая объемноцентрированную структуру.

Пусть выбранная нами ячейка содержит ν_1 зарядов z_1 и ν_2 зарядов z_2 . Чистый слой представляет из себя объемноцентрированную решетку с длиной ребра для ядер z_1 , равным r_1 , а для ядер z_2 равным r_2 . Поскольку в объеме r_1^3 находится 2 ядра с зарядом z_1 , то число электронов здесь равно $2z_1$. Из условия равенства электронной плотности имеем

$$\frac{z_1 \nu_1 + z_2 \nu_2}{abc} = \frac{2z_1}{r_1^3} = \frac{2z_2}{r_2^3} \quad (\alpha)$$

Пусть N_1 и N_2 числа ячеек в слоях из зарядов z_1 и z_2 соответственно. Очевидно должно выполняться соотношение $N_1/N_2 = \nu_1/\nu_2$. Пусть, далее, E_1 и E_2 энергии на единицу объема для слоев из зарядов z_1 и z_2 . Тогда средняя энергия механической смеси на единицу объема выразится формулой

$$E^+ = \frac{E_1 N_1 r_1^3 + E_2 N_2 r_2^3}{N_1 r_1^3 + N_2 r_2^3}$$

или

$$E^+ = \frac{\nu_1 E_1 r_1^3 + \nu_2 E_2 r_2^3}{\nu_1 r_1^3 + \nu_2 r_2^3} \quad (\beta)$$

Выражая r_1 и r_2 из (α) через $z_1, z_2; \nu_1, \nu_2; a; b; c$ и подставляя в (β), и учитывая, что

$$E_1 = \frac{z_1^2}{r_1^4} [T_0(1,1) + T_D(1,1)]$$

$$\text{а } E_2 = \frac{z_2^2}{r_2^4} [T_0(1,1) + T_D(1,1)]$$

получим для энергии слоистой структуры на единицу объема выражение

$$E^+ = \frac{(z_1 \nu_1 + z_2 \nu_2)^{4/3} (\nu_1 z_1^{5/3} + \nu_2 z_2^{5/3})}{2^{4/3} (abc)^{4/3}} [T_0(1,1) + T_0(1,1)].$$

Для решетки типа NaCl $\nu_1 = \nu_2 = 4$, а для CsCl $\nu_1 = \nu_2 = 1$ и получаем формулы (2) и (4).

4. Энергия решетки типа $Z_n S$

Рассмотрим решетку со структурой алмаза. Она представляет из себя две вложенные друг в друга со сдвигом $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ по осям x, y, z гранецентрированные призмы, одна из которых образована из ядер Z_1 , а другая из Z_2 . Каждую гранецентрированную решетку представим в виде четырех простых подрешеток.

Заряд Z_1 , сидит в 4 простых подрешетках

$$(0, 0, 0); (0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}); (\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}); (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$$

а Z_2 в $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}); (\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}); (\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}); (\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4})$.

В полную энергию дадут вклад как энергия взаимодействия ядер из данной простой подрешетки (с вычетом самодействия) так и взаимодействия ядер из разных подрешеток. При этом легко заметить, что энергии взаимодействий любых подрешеток из Z_1 с любой из Z_2 одна и та же и равны $\frac{z_1 z_2}{a^3 \alpha^3} K(\alpha, \alpha)$. Равны между собой также и энергии взаимодействия двух любых подрешеток составленных из зарядов одного сорта. Здесь имеем $\alpha = \beta = (c/a)^{2/3}$; $\gamma = \frac{1}{\alpha^2}$.

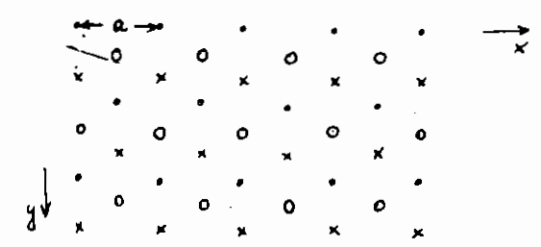
Теперь, учитывая что $\nu_1 = \nu_2 = 4$ получаем формулы (5) и (6).

5. Энергия гранецентрированной структуры

В вершинах прямой призмы с квадратным основанием находятся ядра Z_1 , а в центрах граней — ядра Z_2 . В этом случае $\nu_1 = 1$, $\nu_2 = 3$. В простую подрешетку из зарядов Z_1 , вложены три простые подрешетки из зарядов Z_2 , сдвинутые соответственно на $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$, $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$, $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$. Так же как и в предыдущем пункте, учтем взаимодействия внутри подрешеток и между ними и получим формулы (7) и (8). Как и раньше $\alpha = \beta$; $\gamma = \frac{1}{\alpha^2}$, $\alpha = (c/a)^{2/3}$.

6. Энергия ромбоэдрической структуры I

Эта структура характеризуется тем, что в каждой плоскости атома только одного сорта образуют сетку из равносторонних треугольников.



Пусть на первой плоскости на местах точек находятся заряды Z_2 . Вторая плоскость лежащая выше первой на $\frac{c}{2}$, содержит заряды Z_1 расположенные на местах кружочков. Третья плоскость, лежащая выше второй еще на $\frac{c}{2}$ содержит заряд Z_1 , в местах крестиков. Следующие три плоскости, отстоящие друг от друга на $\frac{c}{2}$ повторяют ту же картину, но с заменой $Z_1 \leftrightarrow Z_2$.

Поскольку основания призм не квадратные, то здесь имеем

$$\alpha = 3^{1/3}(c/a)^{2/3}, \quad \beta = 2/3, \quad \gamma = 3/\alpha^2$$

Подрешетки из зарядов z_1 , имеют координаты:

$$(0, 0, 0); (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0); (0, \frac{2}{3}, \frac{1}{3}); (\frac{1}{2}, \frac{1}{6}, \frac{1}{3}); (0, \frac{1}{3}, \frac{2}{3}); (\frac{1}{2}, \frac{5}{6}, \frac{2}{3}),$$

а из z_2 :

$$(0, \frac{1}{3}, \frac{1}{6}); (0, \frac{5}{6}, \frac{2}{3}); (0, 0, \frac{1}{2}); (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}); (0, \frac{2}{3}, \frac{5}{6}); (\frac{1}{2}, \frac{1}{6}, \frac{1}{3}).$$

Учитывая, что $\nu_1 = \nu_2 = 6$ получим формулы (9) и (10).

7. Энергия ромбоэдрической структуры II

Эта структура устроена также, как и предыдущая, с тем лишь отличием, что в каждой плоскости есть заряды обоих сортов:

■ . . ■ В местах точек находятся
 . ■ . заряды z_1 , а в
 ■ . . ■ квадратах - заряды z_2 .

Отношение числа зарядов z_1 к z_2 в этой плоскости равно 2.

В следующей плоскости это отношение равно $\frac{1}{2}$ и т.д.

Заряды z_1 и z_2 сидят в 18 простых подрешетках и имеют координаты:

Заряды z_1 :

$$(0, 0, 0); (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0); (0, \frac{1}{3}, 0); (\frac{1}{2}, \frac{5}{6}, 0); (\frac{1}{3}, 0, \frac{1}{6}); (\frac{5}{6}, \frac{1}{2}, \frac{1}{6})$$

$$(\frac{2}{3}, 0, \frac{1}{3}); (\frac{1}{6}, \frac{1}{2}, \frac{1}{3}); (\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}); (\frac{1}{6}, \frac{5}{6}, \frac{1}{3}); (0, 0, \frac{1}{2}); (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$$

$$(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{2}{3}); (\frac{5}{6}, \frac{5}{6}, \frac{2}{3}); (\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{2}{3}); (\frac{5}{6}, \frac{1}{6}, \frac{2}{3}); (\frac{2}{3}, \frac{2}{3}, \frac{5}{6}); (\frac{1}{6}, \frac{1}{6}, \frac{5}{6})$$

Заряды z_2 :

$$(0, \frac{2}{3}, 0); (\frac{1}{2}, \frac{1}{6}, 0); (\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{6}); (\frac{5}{6}, \frac{5}{6}, \frac{1}{6});$$

$$(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{6}); (\frac{5}{6}, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}); (\frac{2}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{3}); (\frac{1}{6}, \frac{1}{6}, \frac{1}{3});$$

$$(0, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}); (\frac{1}{2}, \frac{5}{6}, \frac{1}{2}); (0, \frac{2}{3}, \frac{1}{2}); (\frac{1}{2}, \frac{1}{6}, \frac{1}{2});$$

$$(\frac{1}{3}, 0, \frac{2}{3}); (\frac{5}{6}, \frac{1}{2}, \frac{2}{3}); (\frac{2}{3}, 0, \frac{5}{6}); (\frac{1}{6}, \frac{1}{2}, \frac{5}{6})$$

$$(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{5}{6}); (\frac{1}{6}, \frac{5}{6}, \frac{5}{6}).$$

Учитывая всевозможные взаимодействия между подрешетками и внутри подрешеток, получим формулы (11), (12).

Здесь как и в предыдущем случае $\alpha = \beta = 3^{1/3}(c/a)^{2/3}; \gamma = \frac{3}{2\alpha}$

ЛИТЕРАТУРА

1. F.Dyson .Annals of Physics, 63, 1, 1971.
2. И.И.Гольдман, Ян Ши . Препринт БФИ-ТФ-6(1972).
3. M.Gell-Mann, K.Bruckner, Phys.Rev. 106, 364, 1957.
4. K.Sawada. Phys.Rev. 106, 372, 1957.
5. I.I.Goldman. Phys.Lett. 34A, 339, 1971.
6. И.И.Гольдман. Научное сообщение БФИ-14(73).

Рукопись поступила 21-го мая 1973г.

Редактор Л.П.Мукаян

Заказ 0733

ВФ-03318

Тираж 300

Подписано к печати 8/У-74г. Формат издания 30 х 40

1,5 уч.изд.л.Ц. 10 к.

Отпечатано на ротаприте
Ереванского физического института, Ереван 36, пер.Маркаряна 2