

ԵՐԵՎԱՆԻ ՖԻԶԻԿԱԿԱՆ ԻՆՏԻՏՈՒՏ  
ЕРЕВАНСКИЙ ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

ԳԻՏԱԿԱՆ ՀԱՂՈՐԴՈՒՄ ՆԱՍԿԻՆԵ ՏՈՒՇԱՆՈՒՄ

ЕФИ 70—(74)

*И.И.Гольдман, П.С.Овнанян*

ВКЛАД ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЭЛЕКТРОНОВ С РЕШЕТКОЙ  
В ЭНЕРГИЮ СИЛЬНО СЖАТОГО ВЕЩЕСТВА



ЕРЕВАНСКИЙ ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

Научное сообщение ЕФИ-70(74)

И.И.ГОЛЬДМАН, П.С.ОВНЯНЯН

ВКЛАД ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЭЛЕКТРОНОВ С РЕШЕТКОЙ  
В ЭНЕРГИЮ СИЛЬНО СЖАТОГО ВЕЩЕСТВА

Ереван 1974

Ереванский Физический  
ИНСТИТУТ  
Зал предприятий

И.И.ГОЛЬДМАН, И.С.ОВНЯНИАН

ВКЛАД ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЭЛЕКТРОНОВ С РЕШЕТКОЙ  
В ЭНЕРГИЮ СИЛЬНО СЖАТОГО ВЕЩЕСТВА

Проведен расчет электрон-ядерного вклада в энергию для решеток, состоящих из двух типов ядер. Результат Дайсона, использовавшего приближение Томаса-Ферми, получается из найденного нами в первом приближении по параметру  $Z^{-1/3}$  и точность его составляет около 50%. Заключение об устойчивости решеток типа  $NaCl$ , сделанное исходя из расчета только кулоновой части энергии остается в силе и при учете энергии электрон-ядерного взаимодействия.

Ереванский Физический институт

Ереван 1974.

Scientific Report БФИ-70(74)

I. I. GOLDMAN, P. S. OVNIANIAN

THE CONTRIBUTION OF ELECTRON-LATTICE  
INTERACTION TO THE ENERGY OF STRONGLY  
COMPRESSED MATTER

Electron-nuclei contribution to the ground state energy is calculated for the lattice composed of two types of nuclei. One can obtain Dayson's result (Thomas-Fermi approximation) as the first term of our formula, which is correct to all orders of  $Z^{-1/3}$ . The error of Thomas-Fermi approximation is about 50% He-Fe mixture.

The conclusion on the stability of NaCl-type lattice based on the consideration of Coulomb energy is valid also when the electron-nuclear interaction contribution is taken into account.

Yerevan Physics Institute

Yerevan, 1974

© Ереванский физический институт, 1974

## I. ВВЕДЕНИЕ

Сильно сжатое вещество при плотностях  $\rho > 10^3 \text{ г/см}^3$  оказывается полностью ионизированным. Электроны становятся релятивистскими при  $\rho > 10^6 \text{ г/см}^3$ . Из-за дефекта масс ядер до плотностей  $10^7 \text{ г/см}^3$  вещество в основном состоит из ядер  $Fe$ , образующих оцк или гцк решетки. При более высоких плотностях, вплоть до  $\rho \sim 10^{11} \text{ г/см}^3$  более выгодным становится образование более тяжелых ядер [1].

Как было показано в работах [2], [3], некоторый выигрыш достигается для ядер двух сортов  $Fe$  и  $He$ , которые образуют устойчивые решетки типа  $NaCl$  и  $CsCl$ . Ввиду малой разницы между энергиями смешанной и однородной фазы, для ответа на вопрос об устойчивости, необходимо вычислить энергию взаимодействия электронов с ядрами [2]. В нерелятивистском случае эта энергия во втором порядке теории возмущений была вычислена в работе [4], где было также показано, что пересечение поверхности Ферми с границами зон Бриллюэна и отклонение Ферми поверхности от сферичности приводят к малым поправкам. Все это остается верным и в случае релятивистских электронов. Параметром теории возмущений в этом случае является величина  $Z^{2/3}/137$ , где  $Z$  - заряд ядра (для железа этот параметр составляет  $\sim 0,06$ ).

В нерелятивистском случае, когда параметром разложения энергии сильно сжатого вещества является величина  $\tau_s = \tau_0/a_0$  (где  $\tau_0^{-3}$  - плотность числа ядер,  $a_0 = \hbar^2/m_e^2$  - боровский радиус) возможен фазовый переход из гцк в оцк [5]. В релятивистской области все главные члены определяющие энергию

имеют один и тот же порядок ( $1/\tau_s$ ) и фазовый переход отсутствует.

В этой работе мы рассматриваем вещество состоящее из ядер  $F_e$  и  $He$  и вычисляем энергию взаимодействия электронов с решеткой для структур типа  $NaCl$  и  $CsCl$ , содержащих равное число ядер  $F_e$  и  $He$ .

## 2. ЭНЕРГИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ РЕЛЯТИВИСТСКИХ ЭЛЕКТРОНОВ С РЕШЕТКАМИ

Во втором порядке теории возмущений энергию взаимодействия электронов с решеткой, в расчете на один электрон, можно представить в виде: (в атомных единицах  $m = e = \hbar = 1$ )

$$E_{эл-реш} = \frac{1}{\sigma^{1/2}} \frac{z^{1/3}}{137 \cdot \nu^{2/3} 3^{2/3} \pi^{4/3} (1+x)^{5/3}} \sum_{\mathbf{g} \neq 0} g \cdot f\left(\frac{\pi \mathbf{g}}{P_F}\right), \quad (1)$$

где  $P_F = (3z \nu \pi^2)^{1/3} \sigma^{-1/3} (1+x)^{1/3}$

$z$  - заряд ядра одного сорта,  $\sigma$  - объем выбранной ячейки,  $\nu$  - число ядер одного типа в ячейке,  $x$  - отношение зарядов ядер ( $x < 1$ ),  $2\pi \mathbf{g}$  - вектор обратной решетки, а функция  $f$ , в отличие от случая нерелятивистских электронов [4], в разных областях представляется разными аналитическими выражениями:

$$f(y) = \begin{cases} \frac{1}{y^4} (1 - \frac{2}{9} y^2) & y \leq \frac{1}{2} \\ \frac{1}{6y^4} (\frac{1}{2} + y + \frac{7}{3} \frac{1}{y} + \frac{y^2-1}{y} \ln \frac{|y-1|}{y}) & y \geq \frac{1}{2} \end{cases} \quad (2)$$

вектор  $g$  для структур типа  $NaCl$  и  $CsCl$  имеет вид [3]

$$g_{NaCl} = 4(1+x^2) [1 + \cos 2\pi(\frac{\ell+m}{2} + n) + \cos 2\pi(\frac{\ell+n}{2} + m) + \cos 2\pi(\frac{n+m}{2} + \ell)] + 8x [\cos 2\pi(\ell+m + \frac{n}{2}) + \cos 2\pi(\ell+n + \frac{m}{2}) + \cos(m+n + \frac{\ell}{2}) + \cos 2\pi(\frac{\ell+m+n}{2})] \quad (3)$$

и

$$g_{CsCl} = 1 + x^2 + 2x \cos 2\pi(\frac{\ell+m+n}{2}) \quad (4)$$

Отметим, что Дайсон [2] вычислял ту же величину, т.е. энергию взаимодействия электронов с решеткой типа  $NaCl$  в приближении Томаса-Ферми. Это соответствует введению в теорию дополнительного параметра  $z^{-1/3}$ , который для железа равен  $\sim 0,35$  и первый порядок разложения по нему дает недостаточную точность.

Результаты Дайсона можно получить из формул (1)-(4), если положить  $f(y) = \frac{1}{y^4}$ , т.е. взять первый член в (2) для случая  $y \leq \frac{1}{2}$  и распространить суммирование в область  $y \geq \frac{1}{2}$ .

Наш результат для  $NaCl$  является точным по параметру.

$z^{-1/3}$  и примерно на 50% превышает результат Дайсона. Так, например, если множитель  $Q_1$  в формуле (2.13) [2], входящий в выражение для энергии равен:

$$Q_1 = 0,0090887 \cdot (\gamma + z)^{2/3} \quad (5)$$

то у нас

$$Q_1 = 0,01339 \cdot (z + \gamma)^{2/3} \cdot \varphi(z; \gamma), \quad (6)$$

где  $\varphi(z; \gamma)$  - некоторая функция величин зарядов ядер, такая что  $\varphi(26; 2) = 1$ . Численные результаты для решеток  $NaCl$  и  $CsCl$  с зарядами ядер 26 ( $F_e$ ) и 2 ( $He$ ) дали для энергии

взаимодействия электронов с решеткой, в расчете на один электрон, следующие значения:

$$E_{\text{эл-реш}}^{\text{NaCl}} = (-2,9484 \pm 10^{-4}) \frac{1}{\sigma^{1/3}} \quad (7)$$

$$E_{\text{эл-реш}}^{\text{CsCl}} = (-1,9210 \pm 10^{-4}) \frac{1}{\sigma^{1/3}} \quad (8)$$

Чтобы выяснить, являются ли эти структуры устойчивыми, сравним эти значения с энергией двух чистых веществ, а именно двух оц решеток, состоящих каждая из зарядов  $Z$  и  $Y$  при тех же давлениях.

Обозначим, следуя Дайсону, через  $R$  отношение энергий структур  $\text{NaCl}$  и  $\text{CsCl}$  к энергии двух оц решеток. Тогда для случая  $\text{Fe}$  и  $\text{He}$  находим

$$R_{\text{NaCl}} = 1,003064 \quad (9)$$

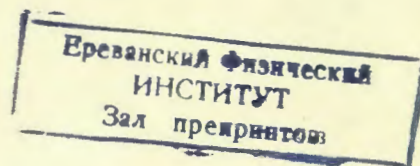
$$R_{\text{CsCl}} = 0,994108 \quad (10)$$

Таким образом, мы видим, что структура  $\text{NaCl}$  при плотностях  $10^6 \text{ г/см}^3$  является наиболее устойчивой, а структура  $\text{CsCl}$  неустойчива по отношению к разделению на чистые вещества.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. G. Baum, H.A. Bethe, C.J. Pethik, Nuclear Physics, A.175 (1971) 225.
2. P.J. Dyson, Ann. of Physics, 62, (1971)
3. И.И. Гольдман, П.С. Овнянн. Научное сообщение ЕФИ-66(74).
4. И.И. Гольдман, Ян Ши. ЕФИ-ТФ 6(72).
5. И.И. Гольдман, П.С. Овнянн. Научное сообщение ЕФИ-61(74).

Рукопись поступила 15 апреля 1974 г.



Редактор Л.П.Мукаян

Заказ 0808

ВФ-03374

Тираж 300

Подписано к печати 8/УП-74г. Формат издания 30 x 40  
0,5 уч.изд.л. Ц. 3 к.

Отпечатано на ротапринте

Ереванского физического института, Ереван 36, пер.Маркаряна 2