

ШҮЛТИЙН МЕТАЛЫН УЯН ХАРИМХАЙН ТОГТМОЛУУДЫГ ЗАГВАР ПОТЕНЦИАЛЫН ОНОЛООР ТООЦООЛСОН АРГАЧЛАЛ

Л.Энхтөр, В.М.Силонов

Загвар потенциалын онолын хүрээнд цэвэр металлууд ба тэдгээрийн хайлшуудын физик шинж чанарыг тооцоолох аргачлал үр дүнтэй байдаг [1-3]. Ашкрофтын загвар потенциал [4] хэрэглэн шүлтийн металлууд ба кальций, хөнгөн цагааны холбоос энергийг эзлэхүүн төвлөсөн шоо, тал төвлөсөн шоо ба нягт багцалсан гексагональ тогтоцуудын хувьд тооцоолон орон торын тогтворжилтыг шинжилсэн бөгөөд шүлтийн металлуудын хувьд эхний арав, кальцийн ба хөнгөн цагааны хувьд эхний арван нэгэн координацийн давхаргын хүчний тогтмолуудыг гарган авч Борн-вон-Карманы загварын дагуу уян харимхайн тогтмолуудыг тооцоолж туршилтын үр дүнтэй харьцуулсан байдаг [5]. Анималугийн шилжилтийн металлуудын загвар потенциалыг [6] хэрэглэн шилжилтийн металлууд болох эзлэхүүн төвлөсөн шоо тогтоцтой Ni , Pd ба тэдгээрийн $Ni_{0.55}Pd_{0.45}$ и $Co_{0.92}Fe_{0.08}$ хайлшуудын жишээ дээр эхний арван координацийн давхаргын харилцан үйлчлэлийг тооцон уян харимхай тогтмолууд, фононы спектр, фононы төлвийн нягт, дебайн температурын хамаарлыг тооцоолох аргачлалыг дэвшүүлсэн байдаг [7,8]. Үүнд никелийн хувьд тооцоолсон C_{12} ба C_{44} тогтмолын утгууд туршилтынхаас харгалзан 19% и 28% зөрүүтэй гарсан. Бид уг аргачлалыг олон бүрдүүлэгчтэй хайлшуудад хэрэглэх оролдлогыг хийсэн [9] бөгөөд Анималугийн загвар потенциалыг ашиглан хөндөлтийн онолын хоёрдугаар эрэмбэд никелийн орон торын тогтворжилт, фононы спектр, уян харимхайн тогтмолуудыг тооцоолж уг металын физик чанарын тооцоонд Анималугийн загвар потенциал тохиромжтой хэмээн дүгнэсэн [10]. Атом хоорондын харилцан үйлчлэлийн хүчний радиаль ба тангенциаль тогтмолуудыг ашиглан динамик матрицыг байгуулж нил орчны дөхөлгөөр уян харимхай тогтмолуудыг тооцоолох [7,8] аргачлалыг эзлэхүүн төвтэй шоо тогтоцтой шүлтийн металын хувьд хэрэглэх оролдлогыг бид энэ удаа хийсэн юм.

Загвар потенциалын онолоор хөндөлтийн онолын хоёрдугаар эрэмбэд атом хоорондын хосолсон харилцан үйлчлэлийн энергийн илэрхийлэл:

$$V(r) = \frac{Z^2 e^2}{r} - \frac{2Z^2 e^2}{\pi} \int_0^\infty G(q) \frac{\sin(qr)}{qr} dq. \quad (1)$$

Үүнд Z -валент тоо, e - электроны цэнэг, q - долгион векторын модуль, r - атом хоорондын зай, $G(q)$ - нормчилсон тодорхойлогч функц:

$$G(q) = \left[\frac{4\pi Z e^2}{\Omega_0 q^2} \right]^{-2} \frac{W^{bare}(q)^2}{1-f(q)} (1 - 1/\epsilon(q)), \quad (2)$$

где $W^{bare}(q)$ - экраничлагаагүй ионы потенциал, Ω - атомын эзлэхүүн,

$$\epsilon(q) = 1 + [1 - f(q)] \frac{4\pi Z e^{*2}}{\Omega_0 q^2} \left(\frac{2}{3} E_F \right)^{-1} \left[\frac{1}{2} + 4k_F^2 - q^2 \right] \ln \frac{2k_F + q}{2k_F - q}, \quad (3)$$

$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m^*}$, k_F - Ферми импульс, m^* - электроны эффектив масс, $e^{*2} = (1 + \alpha_{eff})e^2$, $f(q)$ - электроны солилцоо ба корреляцийн засвар бөгөөд Хаббард ба Шэмийн дагуу [11,12]:

$$f(q) = \frac{q^2}{2(q^2 + k_F^2 + k_S^2)}, \quad k_S^2 = \frac{2k_F}{\pi}; \quad (4)$$

Шүлтийн металын хувьд Ашкрофтын санал болгосон загвар потенциалын хэлбэр [5]:

$$W^{bare}(q) = -\frac{4\pi Z e^2}{\Omega q^2} \cos q r_C \quad (5)$$

ба r_C нь ионы хэмжээг илэрхийлэх параметр юм.

Төвийн харилцан үйлчлэлийн нөхцөлд атом хоорондын хосолсон потенциалын $V(r)$ хэлбэрээс хоёр төрлийн хүчний тогтмолыг тодорхойлдог [5]:

$$\frac{1}{r} \frac{dV}{dr} = -\frac{Z^2 e^2}{\pi r^2} - \frac{2Z^2 e^2}{\pi r^2} \int_0^\infty G(q) (\cos qr - \sin qr) q r dq, \quad (6)$$

$$\frac{d^2 V}{dr^2} = -\frac{2Z^2 e^2}{\pi r^3} - \frac{2Z^2 e^2}{\pi r} \int_0^\infty G(q) \left(\frac{2 \sin qr}{qr^2} - \frac{2 \cos qr}{r} - q \sin qr \right) dq. \quad (7)$$

Эдгээр тогтмолуудыг дараах хэлбэрээр ангилж нэрлэдэг:

$$\alpha_i = [d^2 V / dr^2]_{r_i} - \text{радиаль ХТ,}$$

$$\beta_i = [(1/r) dV / dr]_{r_i} - \text{тангенциаль ХТ.}$$

Үүнд i индексээр координацийн давхаргын координацийн давхаргын харилцан үйлчлэлийн дугаарыг гэмдэглэв. хүчний α_i ба β_i тогтмолуудыг тооцон

Эзлэхүүн төвлөсөн орон торын динамик сийрүүлэн бичвэл: матрицийн гишүүдийг эхний арван

$$D_{11} = 8\beta_1(1 - C_{11}C_{12}C_{13}) + \frac{8}{3}(\alpha_1 - \beta_1)(1 - C_{11}C_{12}C_{13}) + 2\beta_2[3 - (C_{21} + C_{22} + C_{23})] + 2(\alpha_2 - \beta_2)(1 - C_{21}) + 4\beta_3[3 - (C_{21}C_{22} + C_{21}C_{23} + C_{22}C_{23})] + 2(\alpha_3 - \beta_3)[2 - (C_{21}C_{22} + C_{21}C_{23})] + 8\beta_4[3 - (C_{31}C_{12}C_{13} + C_{11}C_{32}C_{13} + C_{11}C_{12}C_{33})] + (\alpha_4 - \beta_4)\left\{\frac{72}{11}(1 - C_{31}C_{12}C_{13}) + \frac{8}{11}[2 - (C_{11}C_{32}C_{13} + C_{11}C_{12}C_{33})]\right\} + 8\beta_5(1 - C_{21}C_{22}C_{23}) + \frac{8}{3}(\alpha_5 - \beta_5)(1 - C_{21}C_{22}C_{23}) + 2\beta_6[3 - (C_{41} + C_{42} + C_{43})] + 2(\alpha_6 - \beta_6)(1 - C_{41}) + 8\beta_7[3 - (C_{31}C_{32}C_{13} + C_{31}C_{12}C_{33} + C_{11}C_{32}C_{33})] + (\alpha_7 - \beta_7)\left\{\frac{8}{19}(1 - C_{11}C_{32}C_{33}) + \frac{72}{19}[2 - (C_{31}C_{32}C_{13} + C_{31}C_{12}C_{33})]\right\} + 4\beta_8[6 - (C_{41}C_{22} + C_{41}C_{23} + C_{21}C_{42} + C_{21}C_{43} + C_{42}C_{23} + C_{22}C_{43})] + 4(\alpha_8 - \beta_8)\left\{\frac{4}{5}[2 - (C_{41}C_{22} + C_{41}C_{23})] + \frac{1}{5}[2 - (C_{21}C_{42} + C_{21}C_{43})]\right\} + 8\beta_9[3 - (C_{41}C_{22}C_{23} + C_{21}C_{22}C_{43} + C_{21}C_{42}C_{23})] + 8(\alpha_9 - \beta_9)\left\{\frac{2}{3}(1 - C_{41}C_{22}C_{23}) + \frac{1}{6}[2 - (C_{21}C_{22}C_{43} + C_{21}C_{42}C_{23})]\right\} + 8\beta_{10}(1 - C_{31}C_{32}C_{33}) + \frac{8}{3}(\alpha_{10} - \beta_{10})(1 - C_{31}C_{32}C_{33}) + 8\beta_{10}[3 - (C_{51}C_{12}C_{13} + C_{11}C_{52}C_{13} + C_{11}C_{12}C_{53})] + (\alpha_{10} - \beta_{10})\left\{\frac{200}{27}(1 - C_{51}C_{12}C_{13}) + \frac{8}{27}[2 - (C_{11}C_{52}C_{13} + C_{11}C_{12}C_{53})]\right\}.$$

(8)

$$D_{12} = \frac{8}{3}(\alpha_1 - \beta_1)S_{11}S_{12}C_{13} + 2(\alpha_3 - \beta_3)S_{21}S_{22} + 8(\alpha_4 - \beta_4)\left\{\frac{1}{11}S_{11}S_{12}C_{33} + \frac{3}{11}(S_{31}S_{12}C_{13} + S_{11}S_{32}C_{13} + 83\alpha_5 - \beta_5S_{21}S_{22}C_{23} + 8\alpha_7 - \beta_7919S_{31}S_{32}C_{13} + 319S_{31}S_{12}C_{33} + S_{11}S_{32}C_{33} + 85\alpha_8 - \beta_8S_{41}S_{22} + S_{21}S_{42} + 8\alpha_9 - \beta_916S_{21}S_{22}C_{43} + 13S_{41}S_{22}C_{23} + S_{21}S_{42}C_{23} + 83\alpha_{10} - \beta_{10}S_{31}S_{32}C_{33} + 8\alpha_{10} - \beta_{10}10127S_{11}S_{12}C_{53} + 527S_{51}S_{12}C_{13} + S_{11}S_{52}C_{13}\right\}.$$

(9)

Үүнд $C_i = \cos(aq_i/2)$, $S_i = \sin(aq_i/2)$, $C_{2i} = \cos(aq_i)$, $S_{2i} = \sin(aq_i)$, $C_{3i} = \cos(3aq_i/2)$, $S_{3i} = \sin(3aq_i/2)$, $C_{4i} = \cos(2aq_i)$, $S_{4i} = \sin(2aq_i)$, $C_{5i} = \cos(5aq_i/2)$, $S_{5i} = \sin(5aq_i/2)$ бөгөөд $i = 1, 2, 3$.

Динамик матрицийн элементүүдээс урт долгионы $\bar{q} \rightarrow 0$ хязгаарт уян харимхайн тогтмолуудыг тооцоолох илэрхийллүүдийг гарган авсан:

$$c_{11} = \frac{1}{a}\left[\frac{4}{3}\alpha_1 + \frac{8}{3}\beta_1 + 4\alpha_2 + 8\alpha_3 + 8\beta_3 + \frac{332}{11}\alpha_4 + \frac{152}{11}\beta_4 + \frac{16}{3}\alpha_5 + \frac{32}{3}\beta_5 + 16\alpha_6 + \frac{652}{19}\alpha_7 + \frac{792}{19}\beta_7 + 2725\alpha_8 + 1285\beta_8 + 48\alpha_9 + 48\beta_9 + 12\alpha_{10} + 24\beta_{10}\right];$$

$$c_{12} = \frac{1}{a}[-4\beta_1 - 4\beta_2 - 16\beta_3 - 44\beta_4 - 16\beta_5 - 16\beta_6 - 76\beta_7 - 8\beta_8 - 96\beta_9 - 36\beta_{10}];$$

$$c_{44} = \frac{1}{a}\left[\frac{4}{3}\alpha_1 + \frac{8}{3}\beta_1 + 4\beta_2 + 4\alpha_3 + 12\beta_3 + \frac{76}{11}\alpha_4 + \frac{408}{11}\beta_4 + \frac{16}{3}\alpha_5 + \frac{32}{3}\beta_5 + 16\beta_6 + \frac{316}{19}\alpha_7 + \frac{1048}{19}\beta_7 + \frac{64}{5}\alpha_8 + \frac{336}{5}\beta_8 + 24\alpha_9 + 72\beta_9 + 12\alpha_{10} + 24\beta_{10}\right] \quad (10)$$

Ашкрофтын загвар потенцналаар хувьд тооцооны үр дүн туршилттай хангалттай тооцоолсон α_i ба β_i ($i = 1, 10$) хүчний тохирч байна хэмээн үзэж болохоор байна. Зарим металын хувьд 4К температурт хэмжсэн тогтмолуудыг [5] бүтээлээс авч (10) уян харимхай тогтмолуудын утга байхгүй учир илэрхийллүүдээр шүлтийн металуудын уян харимхай тогтмолуудыг тооцоолсон үр ОК температурын тооцоолсон утгыг дүнгүүдийг туршилтын утгуудтай жишиж нарийвчлалтай баталгаажуулах боломжгүй Хүснэгт 1-д үзүүлэв. Литгийн хувьд c_{11} ба c_{12} байна. Тооцооны үр дүнг туршилтын утгуудтай ойтгуулахын тулд загвар потенциалын өөр тогтмолуудын тооцоолсон утга туршилтаас хэлбэрийг сонгох, электронуудын солилцоо ба бараг хоёр дахин их байна. Бусад металуудын

корреляцийг засварыг функцийг сонгох зэрэг аргыг хэрэглэх боломжтой. Энэ ажилд хэрэглэсэн аргачлалыг эзлэхүүн төвтэй шоо

тогтоцтой бусад металлуудын уян харимхайн тогтмолуудыг тооцоонд хэрэглэх бололцоог судлах хэрэгтэй байна.

Хүснэгт 1. Шүлтийн металлуудын уян харимхайн тогтмолуудыг тооцоолсон утгууд ба туршилтын үр дүнгүүд (10^{12} Н/м²).

Метал	Үр дүн	Темпеатур	C ₁₁	C ₁₂	C ₄₄
Li	туршилт [13]	78 К	1.485	1.253	1.08
	онол	0 К	2.605	2.150	0.991
K	туршилт [14]	4 К	0.416	0.341	0.286
	онол	0 К	0.428	0.363	0.272
Na	туршилт [15]	90 К	0.993	0.823	0.560
	онол	0 К	1.007	0.847	0.634
Rb	туршилт [16]	170К	0.296	0.250	0.171
	онол	0 К	0.285	0.238	0.191
Cs	туршилт [17]	78К	0.247	0.209	0.148
	онол	0 К	0.218	0.182	0.141

Дүгнэлт

Эзлэхүүн төвтэй шоо тогтоцтой орон торын динамик матрицийг атом хоорондын хосолсон харилцан үйлчлэлийн радиаль ба тангенциаль хүчний тогтмолуудаар илэрхийлэн нил орчны дөхөлтөөр шүлтийн металлуудын уян харимхайн тогтмолуудыг тооцоолох боломж байна. Онолын тооцоо ба туршилтын үр дүнгүүдийн харьцуулалт нь Ашкрофтын загвар потенциалар литийгээс бусад шүлтийн металын атом хоорондын хосолсон харилцан үйлчлэлийн энергийг тооцоолох нь үр дүнтэй болохыг харуулж байна.

Ишлэл

1. Харрисон У. Псевдопотенциалы в теории металлов. М.: Мир, 1968, 366 стр.
2. Хейне, Коэн М., Уэйр Д. Теория псевдопотенциала. М.: Мир, 1973, 560 стр.
3. Анималу А. Квантовая теория кристаллических твердых тел. М.: Мир, 1981, 576 стр.
4. Ashcroft N.W., Phys. Letters **23**, 48(1966); Ashcroft N.W. and Langreth D.C., Phys. Rev. **155**, 682 (1967).
5. Shyu W.M., Gaspari G.D. // Phys. Rev. 1968. **170**, P.687.
6. Animalu A.O.E., Heine V. // Phil. Mag. 1965, **12**, P. 1259; Animalu A.O.E. // Phys. Rev. 1973. **B8**, P.3542

7. Shyam R., Upadhyaya S.C., Upadhyaya J.C. // Phys. Stat. Solidi (b). 1990. **161**, P.565
8. Upadhyaya S.C., Upadhyaya J.C., Shyam R. // Phys. Rev. 1991. **B44**, P.122.
9. Силонов В.М., Родин С.Ю., Энхтор Л. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2000. №3. С.28.
10. Силонов В.М., Энхтор Л., Шилагарди Г., Галбадрах Р. // Физический факультет МГУ препринт N1/2004.
11. Habbard J. // Proc. Roy. Soc. 1957. A **240**, P.539; 1958. A **243**, P. 336.
12. Sham L.J. // Proc. Roy. Soc. 1965. A **283**, P. 33.
13. Nash H.C. and Smith C.S., J. Phys. Chem. Solids **9**, 113 (1959)
14. Marquart W.R. and Trivisonno J., J. Phys. Chem. Solids **26**, 273 (1965)
15. Huntington H.B., Solid State Physics **7**, 213 (1958)
16. Gutman E.J. and Trivisonno J., J. Phys. Chem. Solids **28**, 805 (1967)
17. Kollarits F.J. and Trivisonno J., J. Phys. Chem. Solids **29**, 2133 (1968)