



فئة جديدة لدوال طاقة جهد التجريبي للأجسام المتعددة لدراسة خواص المادة الكتلية والعناقيد

## A new class of empirical many-body potential energy functions for bulk and clusters properties

S. Erkoç

دالة طاقة جهد (PEF) تجريبية جديدة لأجسام متعددة والتي  $comprices$  على تفاعلات ذرية لجسمين وثلاثة اجسام. جهد الجسمين هو نوع من الدالة الهجينة والجهد ثلاثة الاجسام بالدوال الجمعية والغير جمعية. يعبر عن الجزء الجمعي بدلالة تفاعلات الجسمين، ويعبر عن الجزء الغير جمعي كدالة ثنائي قطب ثلاثي. تحقق دالة PEF طاقة تماسك المادة الكتلية وشرط استقرارها ومعامل ينح. دالة PEF لعناصر الذهب والفضة والنحاس يكون لها معاملات في التركيب البلوري f.c.c. تم حساب ثوابت المرونة للعناصر كما تم دراسة استقرار البنية التركيبية وطاقات العناقيد الميكروية المحتوية على 3 إلى 7 ذرات من نفس العنصر. وجد ان ثوابت المرونة المحسوبة متوافقة مع البيانات المتوفرة في البحوث العلمية المنشورة.



## المقدمة Introduction

استخدمت بنجاح محاكاة الكمبيوتر باستخدام دوال طاقة الجهد التجريبية لدراسة الخواص المختلفة مثل مادة كتلة وسطح وعتاقيد العتاصر عتد مستوى ذري. تعتمء الكثر من هءه المءاكاة على نموءج تجريبي للجهد يصف التفاعلات بين الذرات في النظام. افترضت دوال طاقة جهد تجريبية متعددة تشتمل على تفاعلات جسمين وثلاثة اجسام وطبقت على العتيد من الانظمة في العشرة سنوات الماضية [6 – 1].

هنا افترضنا فئة جديدة من دالة طاقة الجهد (PEF) التجريبية لأجسام عديدة، والتي يبدو انها مناسبة لدراسة خواص المادة الكتلية وعتاقيد لأنظمة مختلفة بتراكيب متعددة. كتطبيق قمنا بعمل معاملات لدالة PEF المفترضة للتركيب f.c.c والعناصر المعدنية مثل الذهب والفضة والنحاس. تم حساب ثوابت المرونة لهذه العناصر وتم دراسة الاستقرار والطاقات للعتاقيد الميكروية المكونة من ثلاثة إلى سبعة ذرات لنفس العتاصر.

## 2. دالة طاقة الجهد The potential function

طاقة التفاعل الكلية لنظام من عدد  $N$  من الذرات بصفة عامة يمكن التعبير عنه كمتعددة متعدد الاجسام [7].

$$\Phi = \varphi_2 + \varphi_3 + \dots + \varphi_n + \dots, \quad (1)$$

حيث  $\varphi_2$  و  $\varphi_3$  و  $\varphi_n$  تمثل الطاقات الكلية للتفاعل لجسمين والثلاثة اجسام ولعدد  $n$  من الاجسام. يمكن التعبير عن هذه الحدود المتعددة الاجسام بدلالة مواضع الذرات في النظام. هنا نحن نعرف الطاقة الكلية لتفاعلات النظام بدلالة تفاعلات الجسمين والثلاثة اجسام فقط. عادة ما يتم التعبير عن جزء الثلاثة اجسام في البحوث السابقة حول دالة PEF اما كدالة جمعية او دالة غير جمعية. هنا نحن عبرنا عن دالة الثلاثة اجسام كخليط من الدالة الجمعية والغير جمعية. يعبر عن الدالة الجمعية بدلالة تفاعلات الجسمين، نفس الامر افترض حديثا [6]. يعبر عن الدالة غير الجمعية كدالة ثنائي قطب ثلاثي مثل دالة Axilrod-Teller [8].

$$\Phi = C_2\varphi_2 + C_{31}\varphi_{31} + C_{32}\varphi_{32}, \quad (2)$$



حيث  $\varphi_2$  و  $\varphi_{31}$  و  $\varphi_{32}$  هي طاقات التفاعل الكلية لجسمين وثلاثة اجسام جمعية وثلاثة اجسام غير جمعية على التوالي.

$$\varphi_2 = \sum_{i < j} U_{ij}, \quad (3)$$

$$\varphi_{31} = \sum_{i < j < k} W_{ijk}^{(1)}, \quad (4)$$

$$\varphi_{32} = \sum_{i < j < k} W_{ijk}^{(2)}. \quad (5)$$

نعرف التفاعلات الذرية لجسمين ( $U_{ij}$ )، والثلاثة اجسام الجمعية ( $W_{ijk}^{(1)}$ ) والثلاثة تفاعلات الغير جمعية ( $W_{ijk}^{(2)}$ ) بدلالة المسافات بين الذرية على النحو التالي:

$$U_{ij} = A_1 r_{ij}^{-\lambda_1} e^{-\alpha_1 r_{ij}^2} - A_2 r_{ij}^{-\lambda_2} e^{-\alpha_2 r_{ij}^2}, \quad (6)$$

$$W_{ijk}^{(1)} = U_{ij} f_k + U_{ik} f_j + U_{jk} f_i, \quad (7)$$

$$W_{ijk}^{(2)} = \frac{1 + 3 \cos \theta_i \cos \theta_j \cos \theta_k}{(r_{ij} r_{ik} r_{jk})^3}, \quad (8)$$

حيث

$$f_i = e^{-g_i}, \quad f_j = e^{-g_j}, \quad f_k = e^{-g_k}, \quad (9)$$

و

$$g_i = \frac{r_{ij}^2 + r_{ik}^2}{r_0^2},$$
$$g_j = \frac{r_{ij}^2 + r_{jk}^2}{r_0^2},$$
$$g_k = \frac{r_{ik}^2 + r_{jk}^2}{r_0^2}. \quad (10)$$



## الجدول 1

معاملات جهد جسمين للذهب Au والفضة Ag والنحاس Cu (الطاقة بوحدة eV، والمسافة بوحدة  $10^{-1}$  nm)

parameter	Au	Ag	Cu
$A_1$	345.923364	220.262366	110.766008
$A_2$	38.9245908	26.0811795	46.1649783
$\alpha_1$	0.750775965	0.673011507	0.394142248
$\alpha_2$	0.229377368	0.120620395	0.207225507
$\lambda_1$	1.04289230	1.72376253	2.09045946
$\lambda_2$	1.05974062	1.81484791	1.49853083
$r_0$	2.470	2.480	2.220

هنا  $r_{ij}$  هي المسافة بين الذرية بين الذرتين  $i$  و  $j$  و  $\theta_i$  و  $\theta_j$  و  $\theta_k$  هي زوايا المثلث المتشكل بالذرات الثلاثة  $i$  و  $j$  و  $k$ .  $R_0$  هي مسافة الاتزان للجهد المزدوج حيث ان الطاقة المزدوجة تكون في ادنى قيمة.  $C_2$  و  $C_{31}$  و  $C_{32}$  هي المعاملات التي يجب ان تحدد.

الجهد المزدوج الحالي (6) يحتوي على ستة معاملات، ثلاثة معاملات في الجزء التنافري  $(A_1, \lambda_1, \alpha_1)$  وثلاثة معاملات في الجزء التجاذبي  $(A_2, \lambda_2, \alpha_2)$ . تم تحديد هذه المعاملات بملائمة الدالة المزدوجة بالمنحنى المحدد عمليا، والذي اخذ من [9] للعناصر تحت الدراسة في هذا البحث. معاملات الجهد المزدوج المحسوبة معطاة في الجدول 1. الملائمة كانت ممتازة والدالة المزدوجة تلائم المنحنى بالضبط عند كل جزء. اجريت طريقة الملائمة بطريقة اقل مربع الغير خطية (nonlinear least-square method).

اعتبر شرط الاستقرار للمادة الكتلية عند  $T = 0K$ ، و  $(\partial\phi/\partial V=0)$ ، يمكننا ان نكتب

$$0 = C_2\phi'_2 + C_{31}\phi'_{31} + C_{32}\phi'_{32}, \quad (11)$$

حيث ان الاشارة ' تشير إلى المشتقة الاولى بالنسبة للحجم  $V$ . بالمثل اعتبر معامل ينج للمادة الصلبة  $B_m = V(\partial^2\phi/\partial V^2)$  يمكننا ان نكتب



$$9VB_m = C_2\phi_2'' + C_{31}\phi_{31}'' + C_{32}\phi_{32}'' , \quad (12)$$

حيث تشير الاشارة " إلى المشتقة الثانية بالنسبة للحجم. يمكن بسهولة حساب  $C_2$  و  $C_{31}$  و  $C_{32}$  باعتبار المعادلات (2) و (11) و (12). الطرف الايسر في المعادلة (2) اخذ على انه طاقة تماسك المادة الكتلية لكل ذرة. في المعادلة (12)  $V$  هي الحجم الذري في البلورة، و  $B_m$  هي معامل ينج للمادة الكتلية للعنصر تحت الدراسة. يمكن حساب مجاميع الشبكة البلورية  $\phi_{31}''$ ،  $\phi_{32}''$ ،  $\phi_2''$ ،  $\phi_{31}'$ ،  $\phi_{32}'$ ،  $\phi_2'$ ،  $\phi_{31}$ ،  $\phi_{32}$ ،  $\phi_2$  من الشبكة المقابلة المصممة لعنصر محدد من العناصر تحت الدراسة. لهذا فان دالة PEF تحقق طاقة تماسك المادة الكتلية، و شرط استقرار المادة الكتلية ومعامل ينج بالتمام.

### 3 خواص المادة الكتلية Bulk Properties

معاملات المادة الكتلية المستخدمة في الحسابات معطاة في الجدول 2. معاملات الجهد المحسوبة معطاة في الجدول 3. في حساب معاملات الجهد  $C_2$ ،  $C_{31}$ ،  $C_{32}$  وتم حساب مجاميع الشبكة البلورية لتحديد نصف قطر القطع  $4.5d_{nn}$  والتي تعطي دقة حتى سبعة خانات في المعاملات، حيث  $d_{nn}$  هي مسافة اقرب جوار في الشبكة البلورية. المعاملات المحسوبة  $C_2$ ،  $C_{31}$ ،  $C_{32}$  تكون موجبة للعناصر تحت الدراسة. مشاركة كل حد في (2) في المادة الكتلية معطاة في الجدول 4. تفاعل الثلاثة اجسام الجمعي يكون سالب، ولكن تفاعل الثلاثة اجسام الغير جمعي يكون موجبا لكل العناصر تحت الدراسة. مشاركة الثلاثة اجسام الكلية للذهب تكون سالبة ولكن للفضة والنحاس تكون موجبة.



## الجدول 2

معاملات المادة الكتلية المستخدمة في الحسابات

element	$d_{nn}$ ( $10^{-1}$ nm) [18]	$-\phi$ (eV) [18]	$B_m$ ( $10^3$ eV/nm <sup>3</sup> ) [11]
Au	2.88	3.81	1.13
Ag	2.89	2.95	0.68
Cu	2.56	3.49	0.89

## الجدول 3

معاملات محسوبة لـ PEF

element	$C_2$	$C_{31}$	$C_{32}$
Au	0.169729418	0.530820957	1487.33142
Ag	0.193714755	0.254330241	784.190491
Cu	0.150036137	0.140549073	194.576839

## الجدول 4

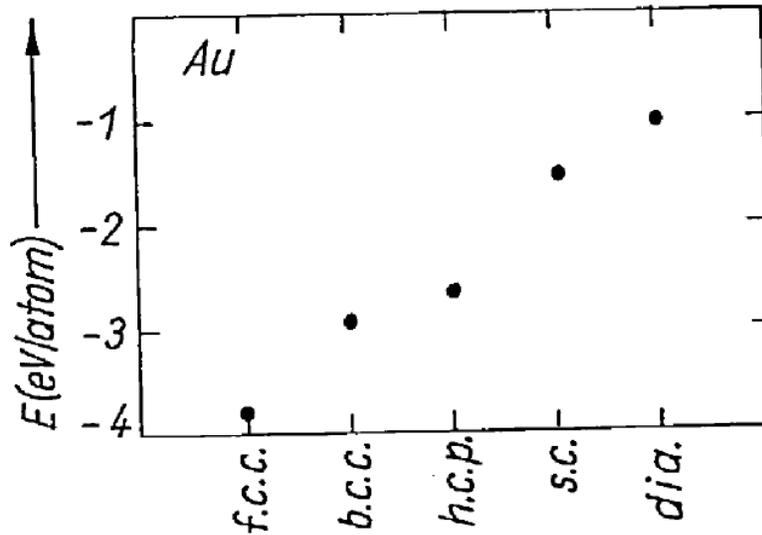
مشاركات الطاقة المحسوبة (بوحدة eV) في المادة الكتلية.  $E_2$  و  $E_{31}$  و  $E_{32}$  هي مشاركات الجسمين والثلاثة اجسام الجمعية والثلاثة اجسام الغير جمعية على التوالي، لطاقة التفاعل الكلية لكل ذرة (طاقة التماسك) في المادة الكتلية.

element	$-E_2$	$-E_{31}$	$E_{32}$	$E_3$	$-E_T$
Au	3.696298796	6.349134551	6.235433348	-0.113701203	3.810
Ag	3.639878723	2.496755853	3.186634581	0.689878728	2.950
Cu	3.818393745	2.026236575	2.354630328	0.328393753	3.490

$$E_3 = E_{31} + E_{32}, \quad E_T = E_2 + E_3$$



دالة PEF الحالية تحقق معيار الاستقرار: طاقة التماسك لكل ذرة في تراكيب بلورية مختلفة. من بين التراكيب f.c.c و h.c.p و b.c.c و dia و s.c. ووجد ان التركيب f.c.c الاكثر استقرارا، طاقة التماسك لكل ذرة في هذه التراكيب للذهب موضحة في الشكل 1.



الشكل 1. طاقة التماسك لكل ذرة للذهب (Au) في تراكيب بلورية مختلفة

## الجدول 5

ثوابت المرونة المحسوبة (بوحدة  $10^3 \text{ eV/nm}^3$ ). القيم بين الاقواس هي التوقعات العملية عند درجة حرارة  $T=0\text{K}$ . [11].

element	$C_{11}$	$C_{12}$	$C_{44}$	$(C_{11} + 2C_{12})/3$
Au	1.398 (1.26)	0.996 (1.06)	0.271 (0.28)	1.130 (1.13)
Ag	0.868 (0.82)	0.586 (0.61)	0.163 (0.32)	0.680 (0.68)
Cu	1.104 (1.10)	0.783 (0.78)	0.232 (0.51)	0.890 (0.89)

استخدمت معاملات PEF لحساب ثوابت المرونة للعناصر تحت الدراسة. قمنا بحساب ثابت المرونة عند  $T=0\text{K}$  من الصيغة العامة [10]

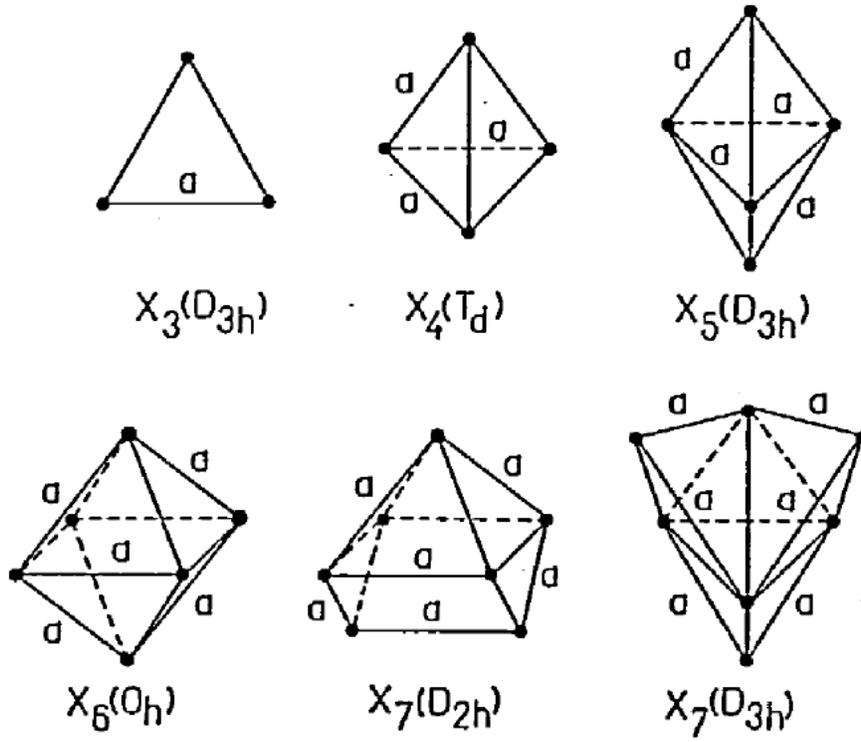


$$C_{\alpha\beta\gamma\delta} = \frac{1}{V} \left( \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \eta_{\alpha\beta} \partial \eta_{\gamma\delta}} \right). \quad (13)$$

ثوابت المرونة المحسوبة معطاة في الجدول 5 ومقارنة مع القيم العملية عند  $T=0K$  [11]. ثوابت المرونة المحسوبة تحقق شروط الاستقرار الميكانيكي في الانظمة المكعبة، و  $C_{11} > C_{12} > C_{44} > 0$  و  $B_m = (C_{11} + 2C_{12})/3$ . التوافق بين القيم المحسوبة والعملية جيد.

#### 4. العناقيد الميكروية Microclusters

تم تطبيق دالة PEF الجديدة لدراسة استقرار التركيب وطاقات العناقيد الميكروية ذات الثلاثة إلى سبعة ذرات للعناصر تحت الدراسة. تم حساب الطاقة الكلية للعنقود لشكل هندسي معطى. لقد قمنا بتقليل الطاقة من خلال تغيير المسافات بين الذرية. نماذج عنقودية مختلفة استخدمت لكل مجموعة وتم اختيار اكثر التراكيب استقرارا. اكثر التراكيب استقرارا موضحة في الشكل 2. المسافات بين الذرية المقابلة والطاقات معطاة في الجدول 6.



الشكل 2. اكثر التراكيب العنقودية الميكروية استقرارا. كل قيم مسافات الذرة المجاورة في العنقود متساوية



## الجدول 6

المسافات بين الذرية المحسوبة،  $a$  بوحدة  $10^{-1}$  nm وطاقات العنقود بوحدة eV لأكثر العناقيد الميكروبية استقرار.  $E_2$ ,  $E_{31}$ ,  $E_{32}$  هي مشاركات الطاقة الكلية للجسمين والثلاثة اجسام الجمعية والثلاثة اجسام الغير جمعية على التوالي، بالنسبة لطاقة العنقود الكلية

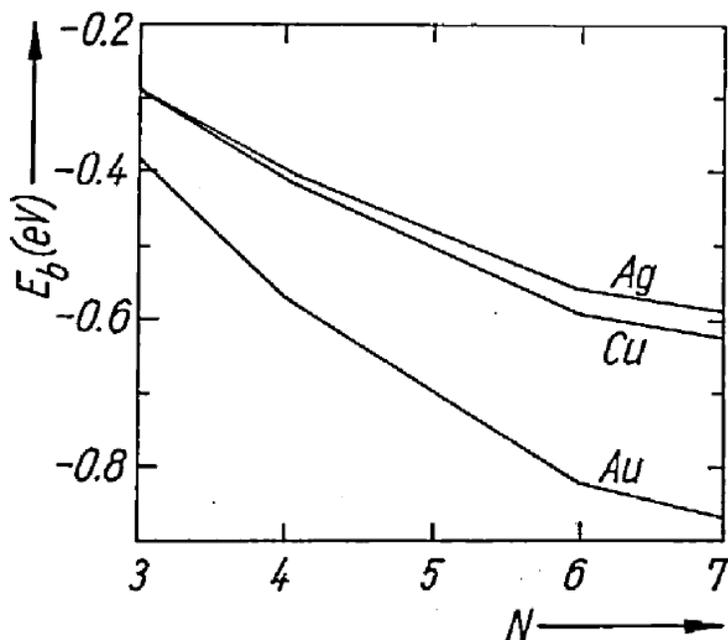
cluster	$a$	$-E_2$	$-E_{31}$	$E_{32}$	$E_3$	$-E_T$	$-E_b$
Au <sub>3</sub> (D <sub>3h</sub> )	2.5687500	1.1408	0.4102	0.4200	0.0098	1.1310	0.3770
Au <sub>4</sub> (T <sub>d</sub> )	2.6125000	2.2239	1.4847	1.4430	-0.0417	2.2657	0.5664
Au <sub>5</sub> (D <sub>3h</sub> )	2.6093750	3.3648	2.7562	2.6135	-0.1427	3.5075	0.7015
Au <sub>6</sub> (O <sub>h</sub> )	2.5890625	4.7426	4.4999	4.3370	-0.1629	4.9055	0.8176
Au <sub>7</sub> (D <sub>3h</sub> )	2.5718750	5.6774	5.6365	5.2559	-0.3806	6.0580	0.8654
Ag <sub>3</sub> (D <sub>3h</sub> )	2.5812500	0.9321	0.1402	0.2120	0.0718	0.8603	0.2868
Ag <sub>4</sub> (T <sub>d</sub> )	2.6500000	1.7936	0.4800	0.6692	0.1892	1.6044	0.4011
Ag <sub>5</sub> (D <sub>3h</sub> )	2.6531250	2.7217	0.8838	1.1864	0.3026	2.4190	0.4838
Ag <sub>6</sub> (O <sub>h</sub> )	2.6406250	3.8654	1.4370	1.9148	0.4778	3.3875	0.5646
Ag <sub>7</sub> (D <sub>3h</sub> )	2.6187500	4.6603	1.8117	2.3554	0.5437	4.1167	0.5881
Cu <sub>3</sub> (D <sub>3h</sub> )	2.3250000	0.8995	0.0940	0.1348	0.0408	0.8587	0.2862
Cu <sub>4</sub> (T <sub>d</sub> )	2.3812500	1.7574	0.3297	0.4347	0.1050	1.6524	0.4131
Cu <sub>5</sub> (D <sub>3h</sub> )	2.3812500	2.6730	0.6117	0.7789	0.1672	2.5058	0.5012
Cu <sub>6</sub> (O <sub>h</sub> )	2.3562500	3.8474	1.0418	1.3248	0.2830	3.5644	0.5941
Cu <sub>7</sub> (D <sub>2h</sub> )	2.2968750	4.6853	1.2493	1.6190	0.3697	4.3155	0.6165

$E_b = E_T/N$  و  $E_T = E_2 + E_3$  و  $E_3 = E_{32} + E_{31}$  هي متوسط طاقة التفاعل لكل ذرة في العنقود، و  $E_b = E_T/N$

الاختلاف لمتوسط طاقة التفاعل لكل ذرة مقابل حجم العنقود، بمعنى ان عدد الذرات في العنقود الموضح في الشكل 3 والذي يبين التوجه المتوقع. نفس خواص المادة الكتلية فان طاقة الثلاثة اجسام الكلية تكون سالبة لعناقيد الذهب ما عدا Au<sub>3</sub> وموجبة لعناقيد الفضة والنحاس.

المقارنة بين النتائج الحالية مع القيم المنشورة في البحوث العلمية هي على النحو التالي:

Au<sub>n</sub>: افادت البحوث السابقة ان الشكل المثلي لـ Au<sub>3</sub> هو الاكثر استقرارا [9]. تعطي طريقة DIM [12] شكل الهرم المثلي والهرم الثنائي المثلي والهرم الثنائي المربع لعناقيد Au<sub>4</sub> و Au<sub>5</sub> و Au<sub>6</sub> الاكثر استقرارا على التوالي. الحسابات الحديثة التي تعتمد على دالة PEF مختلفة [6b]، حصلنا على نفس التراكيب مثل الحسابات الحالية.



الشكل 3. تغير متوسط طاقة التفاعل الكلية لكل ذرة في اكثر العناقيد استقرارا مقابل حجم العنقود.

$Ag_n$ : وجد ان الترتيب المثلي لـ  $Ag_3$  هو الاكثر استقرارا [9]. وجد Basch [13] في حساباته باستخدام ab-initio ان طاقات المستوى الارضي للترتيبات الخطية والمثلثية لـ  $Ag_3$  قريبة من بعضها البعض، لكنه لم يقم بإيجاد افضل مسافة بينية - وقد ثبتها عند القيمة  $0.2778 \text{ nm}$ . الاشكال المستوية والثلاثية الابعاد لـ  $Ag_4$  تكون متحللة تقريبا في الطاقة [9, 12]. اعطت طريقة DIM [12] الطاقة للشكل الثلاثي الابعاد (الهرم المثلي) يكون اقل قليلا من الشكل ثنائي الابعاد (المربع). لعناقيد  $Ag_5$  بينت الملاحظات التجريبية [14] والحسابات النظرية [12, 15] ان الشكل الهرم الثنائي المثلي هو الاكثر استقرارا. لـ  $Ag_6$ ، تعطي طريقة DIM [12] الشكل الهرمي الثنائي المربع هو الاكثر استقرارا. من حساباتنا السابقة [6b] حصلنا على نفس التراكيب كما في النتائج الحالية.

$Cu_n$ : وجد ان الشكل المثلي لعنقود  $Cu_3$  والشكل الرباعي الاسطح لعنقود  $Cu_4$  هو الاكثر استقرارا [16]. لـ  $Cu_5$  توقعت كلا من الملاحظات العملية [16] وحسابات ab-initio [15] ان التركيب الهرم الثنائي المثلي هو الاكثر استقرارا. تم حساب الشكل الهرمي الثنائي المربع لـ  $Cu_6$  هو الاكثر استقرارا [17]. من حساباتنا



السابقة [6b] حصلنا على نفس التراكيب مثل تلك النتائج المبينة هنا، لكن تركيب الـ  $Cu_7$  يختلف عن الحسابات السابقة، انه يمتلك تركيب هرمي ثنائي معين.

التوجه العام هو ان الشكل المثلثي في العناقيد ذات الثلاثة ذرات والاشكال الثلاثية الابعاد في العناقيد التي تحتوي على اربعة إلى سبعة ذرات هي الاكثر استقرارا. في الحسابات الحالية فان التراكيب الاكثر استقرارا لعناقيد الثلاثة ذرات في الشكل المثلثي مع تماثل  $D_{3h}$  لكل العناصر تحت الدراسة، والعناقيد ذات الاربعة ذرات ذات الشكل الرباعي الاسطح مع تماثل  $T_d$  لكل العناصر الثلاثة، والعناقيد ذات الخمسة ذرات في شكل الهرم الثنائي المثلثي مع تماثل  $D_{3h}$  مع تماثل  $O_h$  مرة اخرى لكل العناصر الثلاثة، وفي النهاية العناقيد ذات السبعة ذرات في الاشكال مثل الرباعيات الاسطح الثلاثة تكون مرتبطة مع الالوجه الثلاثة للرباعي الاسطح الرابع مع تماثل  $D_{3h}$  لـ  $Au_7$  و  $Ag_7$ ، والتي تشكل تركيب ثلاثي الابعاد مدمج، ولكن  $Cu_7$  يكون هرمي مربع يمتلك ذرتين في اسفله مع تماثل  $D_{2h}$ . الطاقة لـ  $Ag_7(D_{2h})$  و  $Ag_7(D_{3h})$  يكونا قريبين جدا من بعضهما البعض لكن يكون اقل قليلا لـ  $Ag_7(D_{3h})$ .

المسافات بين الذرية (a) في اكثر العناقيد الميكروية استقرارا لكل العناصر تحت الدراسة هي كبيرة نسبيا واكبر من مسافة الاتزان المقابلة ( $r_0$ ) لثنائياتها واصغر نسبيا من مسافة اقرب جوار ( $d_{nn}$ ) لقيم المادة الكتلية المقابلة، أي ان ( $r_0 < a < d_{nn}$ ) كما هو متوقع. النتائج الحالية تتفق بشكل جيد مع القيم المتوفرة في المنشورات العلمية.

تمت الترجمة في المركز العلمي للترجمة

25-7-2012

[www.trgma.com](http://www.trgma.com)