



دالة طاقة جهد تجريبية جديدة لأجسام عديدة

تطبيق على العناقيد الميكروية

**A New Empirical many-body potential energy function**

**Application to Microclusters**

**S. Er koc**

قدمت دالة طاقة جهد تجريبية جديدة لأجسام عديدة تحتوي على تفاعلات جسمين وثلاثة أجسام. جهد الجسمين يكون من نوع دالة هجينة (hybrid function) وجهد الثلاثة أجسام يعبر عنه بدلالة تفاعلات الجسمين. عوامل دالة طاقة الجهد يمكن حسابها بسهولة باستخدام بيانات الثنائيات (dimer) وطاقة تماسك المادة الكتلية للنظام تحت الدراسة. تم تحديد معاملات دالة طاقة الجهد المفترضة للعديد من العناصر في التراكيب البلورية FCC و BCC والتركييب الماسي وطبقت لدراسة استقرار البنية التركيبية وطاقات العناقيد الميكروية. الاتفاق بين النتائج المعروضة هنا والقيم المنشورة في البحوث العلمية جيدة.

## **1. مقدمة Introduction**

هناك اهتمام متزايد في خواص البنية التركيبية وطاقات العديد من الأنظمة في العقد الأخير. استخدمت بنجاح برامج محاكاة كمبيوتر باستخدام دوال طاقة جهد تجريبية لدراسة الخواص العديدة مثل الكتلة والسطح وعناقيد العناصر على المستوى الذري. الكثير من برامج المحاكاة هذه تعتمد على نموذج تجريبي للجهد



يصف التفاعلات بين الذرات في الأنظمة. يقدم هذا البحث دالة طاقة جهد (PEF) جديدة من السهل الحصول على معاملاتها وتطبيقها على تراكيب بلورية مختلفة.

يعبر عن جهد النموذج عادة كمفكوك أجسام عديدة لدالة طاقة الجهد الكلية للنظام. اذا افترض انه في حالة غياب القوى الخارجية، فانه توجد دالة  $\Phi(r_1, r_2, \dots, r_N)$  لوصف طاقة الجهد الكلية لنظام يحتوي على عدد  $N$  من الذرات كدالة في مواقعها، ويمكن تحليلها إلى جسمين وثلاثة أجسام الخ، ومساهماتها هي على النحو التالي [1]:

$$\Phi(r_1, r_2, \dots, r_N) = \sum_{i < j} U(r_i, r_j) + \sum_{i < j < k} W(r_i, r_j, r_k) + \dots \quad (1)$$

يعتقد في العادة ان هذه السلسلة تتقارب بسرعة وان أول حدين (مساهمات الجسمين والثلاثة أجسام فقط) تعطي تقريب معقول لتفاعل الجهد، ولهذا فان العزوم ذات الرتب العالية يمكن ان تهمل [2, 3]. في التطبيقات الأولية، تم اختصار مفكوك السلسلة بعد حد الجسمين. على كل حال، لقد تبين ان حد الثلاثة اجسام له مساهمة مهمة في التركيب والاستقرار للعناقيد الميكروية المختلفة [4]، وهذا اساسي لفهم استرخاء الطبقات السطحية المتعددة في البلورات [5].

حديثاً، العديد من دوال PEF التجريبية تدمج تفاعلات الجسمين والثلاثة اجسام وتطبق على الاجسام الكتلية والسطحية وخواص العناقيد الصغيرة التي ترتبط بروابط تساهمية، بالاحص السليكون، بواسطة Pearson [6] et al، و [7] Stillinger and Weber و [8] Tersoff. هذه الجهود تحتوي، على التوالي، على ثلاثة وتسعة واحدى عشر معامل لحساب النظام احادي الذرة. تحليل مقارنة مفصل لدوال الجهد هذه قد اجري حديثاً [9]. تقدير معاملات دالة الجهد هي عملية مستنزفة للوقت. تزداد الصعوبة بصفة عامة مع زيادة عدد المعاملات التي يجب ان تعين.

قدمت هنا دالة جهد تفاعل ذري جديدة، والتي تبدو انها اسهل في ايجاد معاملاتها لانظمة عديدة في تراكيب بلورية مختلفة من دوال الجهد التقليدية للجسمين والثلاثة اجسام.

الشكل الدالي وخطوات الحصول على المعاملات لدالة طاقة الجهد المقترحة موضح في الجزء 2. وكتطبيق على دالة الجهد المقترحة استقرار البنية التركيبية والطاقات للعناقيد الميكروية للعناصر المعتبرة في الجزء 2 تم مناقشتها في الجزء 3.



### 3. دالة طاقة الجهد The Potantial Energy Funciton

نقطة البداية هي التعبير عن طاقة التفاعل الكلية لنظام من عدد  $N$  من الجسيمات بالاعتماد على مفكوك الأجسام العديدة الرسمي (1). فقط تفاعلات الجسمين والثلاثة أجسام أخذت في الحسبان. بصفة عامة، التفاعلات المنطقية للجسمين هي التي وصفت بصفة عامة في البحوث العلمية بواسطة جهد Morse [10]، وجهد Mic [11] مع تجمعات مختلفة للقوى، والجهد Buckingham [12] والعديد من تجمعات  $1/r^n$  ودوال أسية [13].

هنا قدمت زوج من الجهد بين ذرتين متفاعلتين كتجمع لـ  $1/r^{2n}$  و  $1/r^n$  مع الضرب في جاوسيان  $\exp-2\alpha r^2$  و  $\exp-\alpha r^2$  على التوالي، كلاهما لأجزاء التنافر والتجاذب. وبشكل أكثر وضوحاً،

$$U(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i) = U(r_{ij}) = U_{ij} \\ = A \left[ \left( \frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{2n} e^{-2\alpha(r_{ij}/r_0)^2} - \left( \frac{r_0}{r_{ij}} \right)^n e^{-\alpha(r_{ij}/r_0)^2} \right], \quad (2)$$

حيث  $A$  و  $\alpha$  و  $n$  هي معاملات الجهد التي علينا إيجاد قيمها.  $r_{ij}$  هي المسافة بين الذرية بين الذرة  $i$  والذرة  $j$ ،  $r_{ij}=|r_i - r_j|$ . يعمل الجاوسيان على جعل أجزاء  $1/r$  أكثر مرونة لتلائم بيانات الثنائيات. هنا  $r_0$  يمكن ان تؤخذ على انها مسافة الاتزان للثنائي. مسافة الاتزان  $r_0$  وطاقة الزوج عند الاتزان  $\epsilon_0$  وثابت القوة عند الاتزان  $k$  يمكن ان تحدد بسهولة من الملاحظات العملية او من حسابات *ab initio* الدقيقة. هناك معاملات  $(r_0, \epsilon_0, k)$  متوفرة في البحوث العلمية لمعظم الثنائيات. معاملات جهد الجسمين  $(A, \alpha, n)$  يمكن ان تحسب بسهولة بالاعتماد على العلاقات التالية

$$U(r_{ij})|_{r_{ij}=r_0} = \epsilon_0, \quad (3)$$

$$\left. \frac{\partial U(r_{ij})}{\partial r_{ij}} \right|_{r_{ij}=r_0} = 0, \quad (4)$$

$$\left. \frac{\partial^2 U(r_{ij})}{\partial r_{ij}^2} \right|_{r_{ij}=r_0} = k. \quad (5)$$

بدلالة  $r_0, \epsilon_0, k$ ، يمكن تحديد معاملات جهد الجسمين بشكل تحليلي على النحو التالي



$$A = -4\epsilon_0, \quad (6)$$

$$\alpha = \ln 2, \quad (7)$$

و

$$n = \sqrt{\frac{r_0^2 k}{2 |\epsilon_0|}} - 2x. \quad (8)$$

هنا  $\alpha$  تبين انها ثابت. على الجانب الآخر، القوى لحدود  $1/r$  ليست صحيحة. هذه العلاقات البسيطة (6) إلى (8) ممكنة فقط لجهد الزوج المفترض، (2). لهذا من الممكن القول ان جهد الزوج المتواجد هنا يلائم تماما لبيانات الثنائي، وهذا يضمن مساهمة الجسمين لتكون اكثر دقة في مفكوك الأجسام العديدة. علاوة على ان جهد الزوج المتواجد هنا يمكن ان يستخدم لكل ذرة ثنائية بانوية متشابهة (homonuclear) أو غير متشابهة (hetronuclear)، مع ان تكون مجموعة المعاملات ( $r_0, \epsilon_0, k$ ) متوفرة.

في البحوث العلمية المنشورة، هناك العديد من دوال تفاعل الأجسام العديدة [8 – 4]. في السنوات الحديثة، الدوال الأكثر استخداما هي تفاعلات ثنائي القطب المتعددة، على سبيل المثال دالة Axilrod-Teller-type-dipole-function [14]. كذلك Axilrod-Teller function مشتقة للغازات النادرة، والتي استخدمت بنجاح في تطبيقات عديدة لأهداف مختلفة بواسطة Haliclogla et al.

هنا قدمت افتراض جهد تفاعل اجسام عديدة على انه تجمعات خطية من طاقات مزدوجة تشكلت بواسطة ثلاثة جسيمات. في هذا التجمع كل دالة مضروبة بواسطة دالة من نوع جاوسيان تعتمد على المسافة بين زوج الذرات إلى الذرة الثالثة. بشكل اكثر وضوحا،

$$\begin{aligned} W(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k) &= W(r_{ij}, r_{ik}, r_{jk}) = W_{ijk} \\ &= B(U_{ij}f_{ijk} + U_{ik}f_{ikj} + U_{jk}f_{jki}), \end{aligned} \quad (9)$$

حيث

$$f_{ijk} = e^{-(r_{ik}^2 + r_{jk}^2)/r_0^2}, \quad (10)$$

$$f_{ikj} = e^{-(r_{ij}^2 + r_{jk}^2)/r_0^2}, \quad (11)$$



و

$$f_{jki} = e^{-(r_{ij}^2 + r_{ik}^2)/r_0^2} \quad (12)$$

هي معاملات الجاوسيان. هنا  $B$  هي المعامل الوحيد، في دالة الأجسام الثلاثة، التي يجب ان يحسب. يعرض الجهد كل خواص الثوابت الفيزيائية المطلوبة.

معامل جهد الأجسام الثلاثة  $B$  يمكن ان يحسب بسهولة من خلال ملائمة طاقة التفاعل الكلية للذرة، في تركيب بلوري خاص، لطاقة التماسك الكتلية للعنصر. يمكن لاحد كتابة طاقة التفاعل الكلية ببساطة بفصل  $B$  على النحو التالي:

$$\Phi = \Phi_2 + B\Phi_3. \quad (13)$$

لا يوجد معامل قطع خاص في دالة PEF الحالية. على كل حال، وجد ان حساب مجاميع الشبكة البلورية في  $\Phi_2$  و  $\Phi_3$ ، ونصف قطر القطع  $4d_{nn}$  كافي للوصول لدقة بسبعة خانات في  $B$  لكل العناصر المستخدمة في الحسابات الحالية.  $d_{nn}$  هي مسافة اقرب جوار في التركيب البلوري.

تم إيجاد معاملات دالة PEF التجريبية والمفترضة لأجسام عديدة للأنظمة أحادية الذرة التالية: Ag, Al, Au, Cu, Ni في التركيب البلوري ECC و Fe و Li في التركيب البلوري BCC و Ge, Si و C في التركيب البلوري الماسي. المعاملات الضرورية المستخدمة في الحسابات معطاة في الجدول 1، ومعاملات الجهد المحسوبة معطاة في الجدول 2.



الجدول 1 المعاملات المستخدمة في الحسابات

element	$r_0$ ( $10^{-1}$ nm)	$\epsilon_0$ (eV)	$k$ (eV/ $10^{-2}$ nm $^2$ )	$d_{nn}$ ( $10^{-1}$ nm) [19]	$\phi$ (eV) [19]
Ag	2.48 [17]	-1.65 [17]	7.34 [17]	2.89	-2.95
Al	2.47 [20]	-1.55 [20]	6.08 [20]	2.86	-3.39
Au	2.47 [17]	-2.29 [17]	13.20 [17]	2.88	-3.81
Cu	2.22 [17]	-2.01 [17]	8.29 [17]	2.56	-3.49
Ni	2.20 [17]	-2.07 [17]	15.66 [17]	2.49	-4.44
Fe	2.02 [17]	-0.90 [17]	9.26 [17]	2.48	-4.28
Li	2.67 [21]	-1.07 [21]	1.58 [21]	3.02	-1.63
C	1.24 [20]	-6.21 [20]	75.97 [20]	1.54	-7.37
Ge	2.45 [22]	-2.65 [22]	6.94 [22]	2.45	-3.85
Si	2.25 [20]	-3.21 [20]	13.48 [20]	2.35	-4.63

الجدول 2 معاملات الجهد المحسوبة  $\alpha = \ln(2)$  لكل العناصر

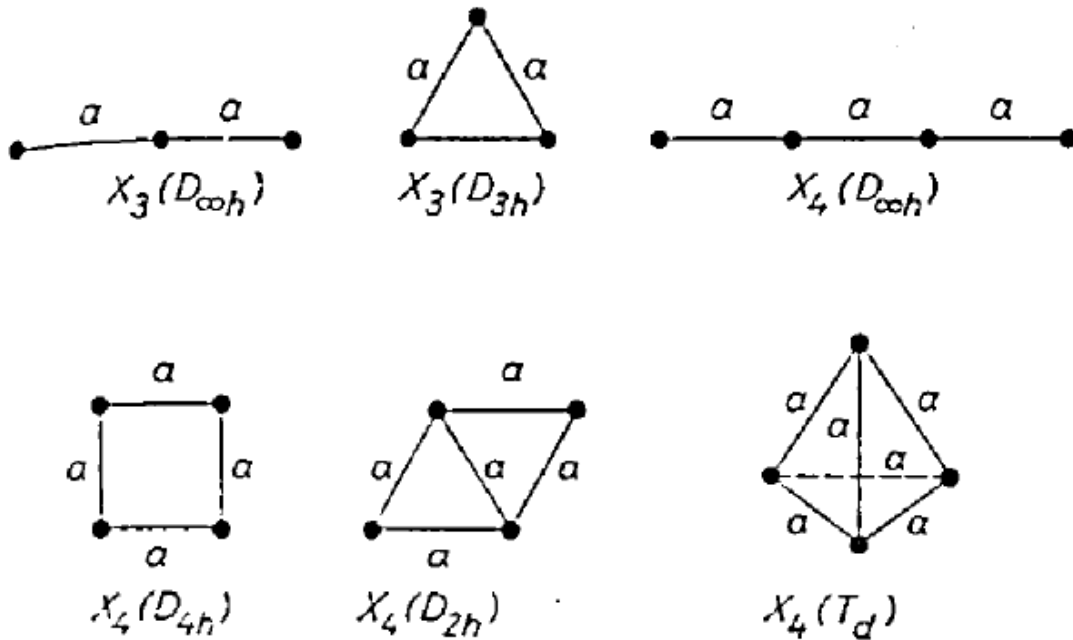
element	$A$ (eV)	$n$	$B$
Ag	9.92	2.312351	- 1.637860
Al	9.88	2.072844	- 1.553508
Au	9.88	2.806960	- 1.605480
Cu	8.88	1.801698	- 1.619242
Ni	8.80	2.892470	- 1.290433
Fe	8.08	3.195342	- 1.061661
Li	10.68	0.907914	- 1.888711
C	4.96	1.680481	- 17.293200
Ge	9.80	1.417253	- 3.344464
Si	9.00	1.874024	- 4.266564

معامل جهد الثلاثة أجسام  $B$  يمتلك قيمة سالبة لكل العناصر المستخدمة في هذه الدراسة. هذا يعني ان جهد الأجسام الثلاثة له مشاركة موجبة لطاقة التفاعل الكلية.

### 3. تطبيق العناقيد الميكروية Application to Microclusters

دراسة تركيب العناقيد الصغيرة اصبح موضوع ذو اهتمام كبير في الخمسة إلى الستة سنوات الماضية، من الجانب النظري والجانب العملي [18 – 15]. البحوث العلمية المركزة على العناقيد الصغيرة لها اهتمام خاص لعلاقتها بعلم السطح في المحفزات العامة والغير متجانسة بشكل خاص.

استخدمت دالة طاقة الجهد التجريبية المقترحة هنا لأجسام عديدة، كتطبيق لدراسة استقرار التركيب والطاقات للعناقيد الميكروية للعناصر التي وجدت معاملاتها في الجزء 2. فقط عناقيد بذرتين بثلاثة ذرات وأربعة ذرات هي التي تم اعتبارها. لعناقيد بثلاثة ذرات الأشكال الهندسية الخطية والمثلثية وفي حالة العناقيد بأربعة ذرات فان الأشكال الهندسية الخطية والمربعة والثمانية والرباعية أخذت في الحسبان. أنواع العناقيد التي تم اعتبارها هي الموضحة في الشكل 1. طاقة التفاعل الكلية للعنقود قلت بتغير المسافات بين الذرية بشكل لحظي. حساب المسافات الفاصلة بين الذرية الأنسب، ومشاركات طاقة الجسمين والثلاثة أجسام والطاقة الكلية للعنقود ومتوسط الطاقة لكل ذرة في العنقود معطاة في الجدول 3. المشاركة الأدنى لجزء الثلاثة أجسام في الحديد والمشاركة الأعلى في الكربون من بين العناقيد تحت الدراسة.



الشكل 1. أنواع العناقيد الميكروية المكونة من ثلاثة أجسام وأربعة أجسام



مقارنة النتائج الحالية مع القيم المنشورة في البحوث العلمية هي على النحو التالي: لعناقيد  $Ag_3$  [17]، وجد الشكل الهندسي المثلي بأنه الأكثر استقرارا من ناحية الطاقة من الشكل الخطي، ولعناقيد  $Ag_4$  [17]، تم تحديد ان الأشكال الثمانية والمربعة والثلاثية هي في الأغلب متحللة من ناحية الطاقة. أفاد Perrersson et al. [23] ان الشكل المثلي لـ  $Al_3$  والشكل الثماني لـ  $Al_4$  هو الأكثر استقرارا. لعناقيد  $Au_3$  [17]، وجد الشكل المثلي هو الأكثر استقرارا. في حساب الديناميكا الجزيئية [24] باستخدام جهد Halicioglu et al [25]، وجد ان الشكل الهندسي الرباعي هو الأكثر استقرارا. الشكل المثلي لـ  $Cu_3$  والشكل الرباعي لعناقيد  $Cu_4$  وجدت إنها الأكثر استقرارا [16]. وجد ان لعناقيد  $Ni_3$  [17] الشكل المثلي هو الأكثر استقرارا. معلومات على عناقيد  $Ni_4$  لا توجد في البحوث العلمية. التوجه العام في العناقيد المعدنية من الشكل البلوري FCC ان الشكل المثلي لعناقيد من ثلاثة رات والشكل الرباعي لعناقيد ميكروية من أربعة ذرات هي الأكثر استقرارا من ناحية الطاقة. النتائج الحالية متففة بشكل جيد مع القيم في البحوث العلمية لهذه العناصر.

الشكل المثلي لـ  $Fe_3$  والشكل الرباعي لـ  $Fe_4$  وجد انها الأكثر استقرارا [16]. على الجانب الأخرى، الشكل المثلي لـ  $Li_3$  وشكل المربع لـ  $Li_4$  هو الأكثر استقرارا [16]. طاقات عناقيد  $Li_4$  المدرجة هنا للأشكال المربعة والرباعية قريبة جدا من بعضها البعض (في الأغلب متحللة) لكن الشكل الرباعي هو الأكثر تفضيلا. المقارنة بين النتائج الموضحة هنا والقيم في البحوث العلمية للعناقيد الميكروية للعناصر ذات التركيب البلوري من النوع BCC متففة بشكل جيدا أيضا.

لعناقيد الكربون الأشكال الخطية وجدت على انها الأكثر استقرارا لعناقيد  $C_3$  و  $C_4$  [16]. النتائج المدرجة هنا متففة بشكل جدي مع القيم في البحوث العلمية لعناقيد الكربون. لعناقيد  $Ge$  [26]، الشكل الخطي لعناقيد من ثلاثة ذرات والشكل الثماني لعناقيد من أربعة ذرات حسب على انه في الأغلب متحلل من ناحية الطاقة، لكن الشكل المثلي هو الأكثر تفضيلا والشكل المربع في عناقيد  $Ge_4$  حسب على انه الأكثر استقرارا. لعناقيد  $Si_3$  [27]، فان الشكل الخطي وجد على انه الأكثر استقرارا، ولعناقيد  $Si_4$  [28] حسب الشكل المربع على انه الأكثر استقرارا. التوافق بين النتائج المدرجة هنا والقيم في البحوث العلمية متففة بشكل جيد.





**الجدول 3:** طاقات العنقود المحسوبة (بوحددة eV) والمسافات بين الذرات المحسوبة (بوحددة  $10^{-1} \text{nm}$ ).  $E_2$  هي مشاركة الجسمين والثلاثة اجسام على التوالي، لطاقة العنقود الكلية،  $E_T = E_2 + E_3$ ، و  $E_b$  هي متوسط طاقة التفاعل لكل ذرة في العنقود، و  $E_b = E_T/N$

X	cluster	a	$-E_2$	$E_3$	$-E_T$	$-E_b$
Ag	3(D <sub>∞h</sub> )	2.478125	3.3825	0.0550	3.3274	1.1091
	3(D <sub>3h</sub> )	2.587500	4.8424	0.8991	3.9433	1.3144
	4(D <sub>∞h</sub> )	2.478125	5.1160	0.1101	5.0058	1.2515
	4(D <sub>4h</sub> )	2.559375	7.6564	1.3176	6.3388	1.5847
	4(D <sub>2h</sub> )	2.631250	8.0696	1.8052	6.2644	1.5661
	4(T <sub>d</sub> )	2.740625	8.8916	2.5325	6.3592	1.5898
Al	3(D <sub>∞h</sub> )	2.465625	3.1918	0.0525	3.1393	1.0464
	3(D <sub>3h</sub> )	2.584375	4.5489	0.7913	3.7576	1.2525
	4(D <sub>∞h</sub> )	2.462500	4.8364	0.1065	4.7300	1.1825
	4(D <sub>4h</sub> )	2.550000	7.2876	1.2049	6.0828	1.5207
	4(D <sub>2h</sub> )	2.625000	7.6205	1.6063	6.0141	1.5034
	4(T <sub>d</sub> )	2.737500	8.4049	2.2385	6.1664	1.5416
Au	3(D <sub>∞h</sub> )	2.471875	4.6605	0.0666	4.5939	1.5313
	3(D <sub>3h</sub> )	2.553125	6.7522	1.2794	5.4728	1.8243
	4(D <sub>∞h</sub> )	2.471875	7.0319	0.1333	6.8986	1.7246
	4(D <sub>4h</sub> )	2.528125	10.4722	1.8084	8.6637	2.1659
	4(D <sub>2h</sub> )	2.590625	11.2336	2.5965	8.6371	2.1593
	4(T <sub>d</sub> )	2.684375	12.4890	3.7780	8.7110	2.1778
Cu	3(D <sub>∞h</sub> )	2.212500	4.1646	0.0776	4.0870	1.3623
	3(D <sub>3h</sub> )	2.343750	5.8711	1.0231	4.8480	1.6160
	4(D <sub>∞h</sub> )	2.212500	6.3216	0.1552	6.1664	1.5416
	4(D <sub>4h</sub> )	2.309375	9.5141	1.5900	7.9242	1.9810
	4(D <sub>2h</sub> )	2.384375	9.8403	2.0566	7.7837	1.9459
	4(T <sub>d</sub> )	2.496875	10.7735	2.7793	7.9942	1.9985
Ni	3(D <sub>∞h</sub> )	2.200000	4.2091	0.0481	4.1610	1.3870
	3(D <sub>3h</sub> )	2.253125	6.1506	0.9741	5.1765	1.7255
	4(D <sub>∞h</sub> )	2.200000	6.3489	0.0962	6.2527	1.5632
	4(D <sub>4h</sub> )	2.228125	9.5492	1.4109	8.1383	2.0346
	4(D <sub>2h</sub> )	2.275000	10.3241	2.0488	8.2753	2.0688
	4(T <sub>d</sub> )	2.337500	11.7482	3.1709	8.5773	2.1443
Fe	3(D <sub>∞h</sub> )	2.018750	1.8245	0.0165	1.8080	0.6027
	3(D <sub>3h</sub> )	2.053125	2.6859	0.3612	2.3247	0.7749
	4(D <sub>∞h</sub> )	2.018750	2.7492	0.0330	2.7163	0.6791
	4(D <sub>4h</sub> )	2.031250	4.1271	0.5165	3.6105	0.9026
	4(D <sub>2h</sub> )	2.065625	4.5215	0.7761	3.7455	0.9364
	4(T <sub>d</sub> )	2.103125	5.2428	1.2736	3.9692	0.9923
Li	3(D <sub>∞h</sub> )	2.643750	2.2854	0.0690	2.2164	0.7388
	3(D <sub>3h</sub> )	2.956250	3.0540	0.4968	2.5571	0.8524
	4(D <sub>∞h</sub> )	2.637500	3.5083	0.1413	3.3670	0.8417
	4(D <sub>4h</sub> )	2.887500	5.1492	0.8323	4.3169	1.0792
	4(D <sub>2h</sub> )	3.018750	5.1384	0.9670	4.1713	1.0428
	4(T <sub>d</sub> )	3.200000	5.5265	1.1803	4.3462	1.0866



X	cluster	a	$-E_2$	$E_3$	$-E_T$	$-E_b$
C	3(D <sub>∞h</sub> )	1.3265625	12.2471	1.1786	11.0685	3.6895
	3(D <sub>3h</sub> )	1.753125	8.9623	2.8452	6.1171	2.0390
	4(D <sub>∞h</sub> )	1.343750	18.1992	2.0021	16.1971	4.0493
	4(D <sub>4h</sub> )	1.6421875	16.4515	4.2151	12.2364	3.0591
	4(D <sub>2h</sub> )	1.7953125	13.7052	4.3544	9.3507	2.3377
	4(T <sub>d</sub> )	1.896875	13.0155	4.1762	8.8393	2.2098
Ge	3(D <sub>∞h</sub> )	2.468750	5.5276	0.2115	5.3161	1.7720
	3(D <sub>3h</sub> )	2.812500	7.0298	1.6851	5.3447	1.7816
	4(D <sub>∞h</sub> )	2.475000	8.3994	0.4120	7.9874	1.9969
	4(D <sub>4h</sub> )	2.759375	11.3753	2.3471	9.0282	2.2571
	4(D <sub>2h</sub> )	2.900000	11.2947	2.8929	8.4018	2.1004
	4(T <sub>d</sub> )	3.087500	11.5891	3.2358	8.3533	2.0883
Si	3(D <sub>∞h</sub> )	2.275000	6.6103	0.2744	6.3359	2.1120
	3(D <sub>3h</sub> )	2.615625	8.0200	2.2932	5.7268	1.9089
	4(D <sub>∞h</sub> )	2.284375	9.9947	0.5249	9.4698	2.3675
	4(D <sub>4h</sub> )	2.559375	12.8155	3.0148	9.8008	2.4502
	4(D <sub>2h</sub> )	2.700000	12.5714	3.7774	8.7940	2.1985
	4(T <sub>d</sub> )	2.881250	12.4131	3.9871	8.4260	2.1065

في الخلاصة، وجدت دالة PEF التجريبية المفترضة لأجسام عديدة تعمل جيدا للعناقيد الميكروية للعناصر في التراكيب المختلفة. تطبيق دالة PEF المقدمة هنا على استرخاء السطح متعدد الطبقات، وعلى إعادة تركيب السطح، وخواص المرونة للبلورات جاري العمل عليه في هذا المختبر. ومن الجدير التأكيد عليها ان دالة PEF المقدمة هنا يتوقع ان تكون مناسبة اكثر لحسابات المادة الكتلية، لأنها معايرة مع طاقة تماسك المادة الكتلية.

تمت الترجمة في المركز العلمي للترجمة

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

13 - 5 - 2012