



دالة طاقة جهد تجريبية جديدة لأجسام عديدة

تطبيق على العناقيد الميكروية: عناصر بتراكيب BCC و FCC و HCP

**A new Empirical Many-Body Potential Energy Function**

**Application to Microclusters: Elements in BCC, FCC and HCP Structures**

**S. Erkoç**

ادخلت حديثاً دالة طاقة جهد تجريبية جديدة لأجسام عديدة (PEF)، وقد تم تطبيقها بنجاح على العناقيد الميكروية للعديد من العناصر. باستخدام دالة EPF الجديدة امتدت حسابات العناقيد الميكروية لتشمل العديد من العناصر بتراكيب BCC و FCC و HCP.

## 1. مقدمة Introduction

ادخلنا حديثاً دالة طاقة جهد تجريبية جديدة لأجسام عديدة (PEF) [1] (من الآن فصاعداً سنطلق عليها I) وكتطبيق قمنا بالتحقق من استقرار التركيب والطاقات لعناقيد ميكروية من ثلاثة ذرات وأربعة ذرات للعديد من العناصر في تراكيب بلورية مختلفة.

تشتمل دالة PEF على تفاعلات جسيمين وثلاثة أجسام. جزء الجسيمين يعبر عنه بـ  $(1/r^{2n} - 1/r^n)$  مثل جهد الزوج بحيث أن كل حد تم تحليله لعدة عوامل بواسطة دالة جاوسيان (Gaussian function)، والجزء



الخاص بالثلاثة أجسام يعبر عنه بدلالة دوال الجسمين. الصيغة التفصيلية لدالة الجسمين ( $U_{ij}$ ) ودالة الثلاثة أجسام ( $W_{ijk}$ ) هي على النحو التالي:

$$U_{ij} = A \left[ \left( \frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{2n} e^{-2\alpha(r_{ij}/r_0)^2} - \left( \frac{r_0}{r_{ij}} \right)^n e^{-\alpha(r_{ij}/r_0)^2} \right] \quad (1)$$

و

$$W_{ijk} = B(U_{ij}f_{ijk} + U_{ik}f_{ikj} + U_{jk}f_{jki}), \quad (2)$$

حيث

$$f_{ijk} = e^{-(r_{ik}^2 + r_{jk}^2)/r_0^2}, \quad (3)$$

بالمثل  $f_{ikj}$  و  $f_{jki}$  لهما نفس الشكل مثل  $f_{ijk}$  بمعاملات مناسبة، و  $r_{ij}$  هي المسافة البينية بين الذرتين  $i$  و  $j$ . المعاملات ( $A, \alpha, n$ ) لجهد الزوج يعبر عنها بطريقة تحليلية بدلالة مسافة الاتزان ( $r_0$ )، وطاقة الاتزان ( $\epsilon_0$ )، وثابت القوة عند الاتزان ( $k$ ) للثنائيات (dimer)،

$$A = -4\epsilon_0, \quad \alpha = \ln(2), \quad n = \sqrt{\frac{r_0^2 k}{2|\epsilon_0|}} - 2\alpha. \quad (4)$$

يحدد المعامل ( $B$ ) لدوال الثلاثة أجسام من طاقة التماسك (cohesive energy) ( $\phi$ ) للمادة في صورتها الكتلية في تركيب بلوري خاص،

$$\Phi = \sum_{i < j} U_{ij} + \sum_{i < j < k} W_{ijk}. \quad (5)$$

تفاصيل الـ عملية التحويل لعوامل يمكن ان نجدها في I.



في العمل الحالي قمنا بعمل تحويل لعوامل للدالة PEF للأنظمة أحادية الذرة التالية: Cs, K, Na في التركيب البلوري من الشكل BCC، و Ca, Pb, Pt في التركيب البلوري من الشكل FCC، و Cd, Mg، و Sc, Ti, Zn في التركيب البلوري من الشكل HEC. المعاملات الضرورية المستخدمة مدرجة في الجدول 1 والمعاملات المحسوبة معطاة في الجدول 2. معامل الثلاثة أجسام B يكون موجبا للعناصر Mg, Ti, Zn بالتركيب HCP وهذا يعني إنها جهد الثلاثة أجسام له مساهمة سالبة لهذه العناصر، و B تكون سالبة لباقي العناصر في هذه الدراسة، وهذا يعني ان جهد الثلاثة أجسام له مساهمة موجبة للطاقة الكلية لهذه العناصر.

الجدول 1 المعاملات المستخدمة في الحسابات

element	$r_0$ (nm)	$\epsilon_0$ (eV)	$k$ (eV/nm <sup>2</sup> )	$\Phi$ (eV) [8]	$d_{nn}$ (nm) [8]	$a$ (nm) [8]	$c$ (nm) [8]
Cs	0.447 [9]	-0.40 [9]	43 [9]	-0.80	0.524		
K	0.391 [9]	-0.52 [9]	61 [9]	-0.93	0.453		
Na	0.308 [9]	-0.73 [9]	107 [9]	-1.11	0.366		
Ca	0.428 [9]	-0.14 [9]	31 [9]	-1.84	0.395		
Pb	0.293 [9]	-0.85 [9]	458 [9]	-2.03	0.350		
Pd	0.257 [10]	-1.10 [10]	2315 [10]	-3.89	0.275		
Pt	0.234 [11]	-3.71 [11]	2437 [11]	-5.84	0.277		
Cd	0.482 [11]	-0.04 [11]	10 [11]	-1.16	0.298	0.298	0.562
Mg	0.389 [9]	-0.05 [9]	12 [9]	-1.51	0.321	0.321	0.521
Sc	0.279 [11]	-1.65 [11]	472 [11]	-3.90	0.331	0.331	0.527
Ti	0.197 [11]	-1.23 [11]	1465 [11]	-4.85	0.295	0.295	0.468
Zn	0.235 [11]	-0.06 [11]	77 [11]	-1.35	0.266	0.266	0.495



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

element	$A$ (eV)	$n$	$B$
Cs	1.60	1.890859	-2.023773
K	2.08	1.608210	-1.979834
Na	2.92	1.250439	-2.436817
Ca	0.56	3.117158	-0.145373
Pb	3.40	3.422940	-1.586818
Pd	4.40	6.950465	-0.681378
Pt	14.84	2.854446	-1.762003
Cd	0.16	4.002629	-0.097190
Mg	0.20	2.874987	1.112951
Sc	6.60	1.950414	-1.684201
Ti	4.92	3.421186	2.287793
Zn	0.24	4.566524	3.944883

## 2. حسابات العناقيد الميكروية Microcluster Calculations

قمنا باعتبار العناقيد الميكروية من ثلاثة ذرات وأربعة ذرات للعناصر في الجزء 1. الشكل الهندسي والتماثل المقابل للعناقيد تحت الدراسة معطاة في الشكل 1، طاقات العنقود والمسافات بين الذرات معطاه في الجدول 3.

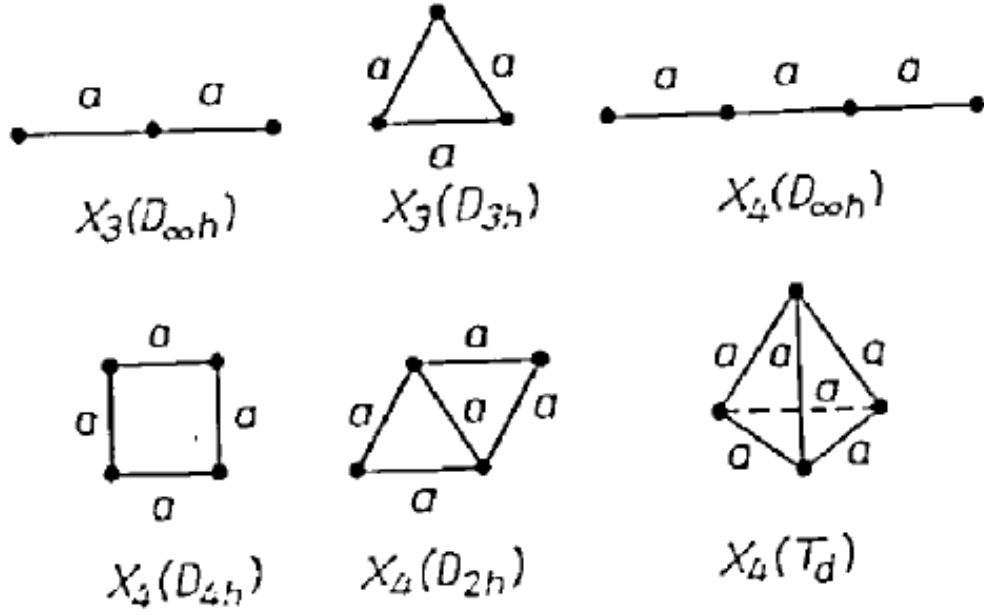
(a) عناصر التركيب البلوري BCC: Cs, K, Na اعتبر في هذه المجموعة. شكل مثلثي لـ  $C_{s2}$  مع تماثل  $D_{3h}$  وشكل مربع مسطح لـ  $C_{s4}$  مع تماثل  $D_{4h}$  وجدت إنها الأكثر استقرار من ناحية الطاقة. لم توجد بيانات متوفرة لهذه العناقيد في البحوث العلمية السابقة. العنقود  $K_3$  بتماثل  $D_{3h}$  تم إيجاده عمليا [2] بانه الأكثر استقرارا، على كل حال،  $K_3$  بتماثل  $D_{3h}$  تم حسابه على انه الأكثر استقرارا [3]. الحسابات المقدمة تعطي  $K_3$  بالتماثل  $D_{3h}$  انها الأكثر استقرارا، وهذا متفق مع الملاحظات العملية. العنقود  $K_4$  لم يتم ملاحظته عمليا، على كل حال تم حساب الشكل الهندسي المعين بالتماثل  $D_{2h}$  [3, 4] ليكون الأكثر استقرارا. الحساب المقدم يعطي الشكل الهندسي المربع لـ  $K_4$  مع التماثل  $D_{4h}$  على انه الأكثر استقرارا. العنقود  $Na_3$  بالتماثل  $D_{3h}$  وجد عمليا انه الأكثر استقرارا [2]، على كل حال، حسابات إلكترونية [3, 5, 6] تعطي التماثل  $C_{2v}$  على



إنها الأكثر استقرارا. الحساب المقدم يعطي العنقود  $Na_3$  بتمائل  $D_{3h}$  والعنقود  $Na_4$  بتمائل  $D_{4h}$  هما الأكثر استقرارا.

(b) عناصر بتركيب بلوري FCC: Ca, Pb, Pt. اعتبرت في هذه المجموعة. لم توجد أي ملاحظات عملية للعناقيد الميكروية لهذه العناصر. Pacchioni [7] قام بحساب الشكل الخطي لـ  $Ca_3$  بتمائل  $D_{\infty h}$  والشكل المثلي بتمائل  $D_{3h}$  هما في الأغلب متحالفين طاقيا (energetically degenerate). الحساب المقدم يبين ان الشكل المثلي لـ  $Ca_3$  مع تماثل  $T_d$  تم حسابه [4, 5, 7] ليكون الأكثر استقرارا. الحساب المقدم هنا متفق مع القيم المنشورة في البحوث العلمية لعناقيد Ca. لـ Pb لا تتوفر بيانات عنقودية في البحوث العلمية. الحسابات المقدمة هنا تعطي شكل مثلي لـ  $Pb_2$  بتمائل  $D_{3h}$  وأشكال رباعية لـ  $Pb_4$  مع تماثل  $T_d$  على أنها الأكثر استقرارا من ناحية الطاقة. الأشكال المعينة والرباعية لـ  $Pb_4$  تكون متقاربة كثيرا من ناحية الطاقة من بعضها البعض، لكن الشكل الرباعي هو الأكثر تفضيلا. لا توجد معلومات عن عنقود  $Pd_3$  في البحوث العلمية والشكل المثلي لـ  $Pd_4$  بتمائل  $T_d$  تم حسابه ليكون الأكثر استقرارا [5]. الحساب المقدم هنا يعطي الشكل المثلي لـ  $Pd_3$  بتمائل  $D_{3h}$  والشكل الرباعي لـ  $Pd_4$  بتمائل  $T_d$  هو الأكثر استقرارا، وهذا متفق مع القيمة في البحوث العلمية. لا توجد معلومات متوفرة عن عنقود  $Pt_3$  لكن الشكل الرباعي لـ  $Pt_4$  بتمائل  $T_d$  تم حسابه على ان يكون الأكثر استقرارا [5]. الحسابات المقدمة هنا تعطي الشكل المثلي لـ  $Pt_3$  مع تماثل  $D_{3h}$  والشكل الرباعي لـ  $Pt_4$  بتمائل  $T_d$  على أنها الأكثر استقرارا من ناحية الطاقة. الاتفاق مع القيم في البحوث العلمية والنتائج المقدمة هنا لـ  $Pt_4$  هي أيضا جيدة.

(c) عناصر بتركيب بلوري HEC: Cd, Mg, Sc, Ti, Zn. اعتبرت في هذه المجموعة. لا توجد معلومات متوفرة في البحوث العلمية للعناقيد الميكروية لـ Cd و Zn.



الشكل 1. الشكل الهندسي والتمائل المقابل لعناقيد الثلاثة ذرات وأربعة ذرات.



الجدول 3: المسافات بين الذرات المحسوبة (بوحدة nm) وطاقات العنقود (بوحدة eV).  $E_2$  و  $E_3$  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  $E_b = E_T/N$

	cluster	$a$	$-E_2$	$E_3$	$-E_T$	$-E_b$
Cs	3(D <sub>∞h</sub> )	0.4468750	0.8266	0.0182	0.8083	0.2694
	3(D <sub>3h</sub> )	0.4781250	1.1504	0.2362	0.9143	0.3048
	4(D <sub>∞h</sub> )	0.4468750	1.2535	0.0365	1.2171	0.3043
	4(D <sub>4h</sub> )	0.4718750	1.8438	0.3479	1.4959	0.3740
	4(D <sub>2h</sub> )	0.4893750	1.8972	0.4497	1.4475	0.3619
	4(T <sub>d</sub> )	0.5156250	2.0293	0.5738	1.4555	0.3639
K	3(D <sub>∞h</sub> )	0.3906250	1.0820	0.0253	1.0567	0.3522
	3(D <sub>3h</sub> )	0.4218750	1.4911	0.2877	1.2034	0.4011
	4(D <sub>∞h</sub> )	0.3900000	1.6457	0.0515	1.5942	0.3985
	4(D <sub>4h</sub> )	0.4150000	2.4261	0.4410	1.9851	0.4963
	4(D <sub>2h</sub> )	0.4312500	2.4746	0.5535	1.9211	0.4803
	4(T <sub>d</sub> )	0.4550000	2.6525	0.7001	1.9528	0.4882
Na	3(D <sub>∞h</sub> )	0.3081250	1.5345	0.0484	1.4861	0.4954
	3(D <sub>3h</sub> )	0.3437500	2.0365	0.4109	1.6255	0.5418
	4(D <sub>∞h</sub> )	0.3081250	2.3404	0.0969	2.2435	0.5609
	4(D <sub>4h</sub> )	0.3375000	3.3428	0.6198	2.7230	0.6807
	4(D <sub>2h</sub> )	0.3531250	3.3493	0.7509	2.5984	0.6496
	4(T <sub>d</sub> )	0.3743750	3.5425	0.8992	2.6433	0.6608
Ca	3(D <sub>∞h</sub> )	0.4268750	0.2841	0.0004	0.2837	0.0946
	3(D <sub>3h</sub> )	0.4287500	0.4200	0.0082	0.4118	0.1373
	4(D <sub>∞h</sub> )	0.4262500	0.4282	0.0007	0.4275	0.1069
	4(D <sub>4h</sub> )	0.4212500	0.6515	0.0128	0.6387	0.1597
	4(D <sub>2h</sub> )	0.4281250	0.7123	0.0185	0.6938	0.1735
	4(T <sub>d</sub> )	0.4300000	0.8396	0.0324	0.8072	0.2018
Pb	3(D <sub>∞h</sub> )	0.2931250	1.7196	0.0223	1.6973	0.5658
	3(D <sub>3h</sub> )	0.3006250	2.5151	0.4861	2.0290	0.6763
	4(D <sub>∞h</sub> )	0.2934375	2.5889	0.0441	2.5448	0.6362
	4(D <sub>4h</sub> )	0.2984375	3.8067	0.6485	3.1582	0.7895
	4(D <sub>2h</sub> )	0.3040625	4.1824	1.0018	3.1806	0.7951
	4(T <sub>d</sub> )	0.3131250	4.7056	1.5211	3.1844	0.7961
Pd	3(D <sub>∞h</sub> )	0.25703125	2.2022	0.0103	2.1919	0.7306
	3(D <sub>3h</sub> )	0.2578125	3.2978	0.3003	2.9975	0.9992
	4(D <sub>∞h</sub> )	0.25703125	3.3044	0.0206	3.2839	0.8210
	4(D <sub>4h</sub> )	0.2571875	4.5919	0.3325	4.2593	1.0648
	4(D <sub>2h</sub> )	0.2581250	5.5044	0.6523	4.8521	1.2130
	4(T <sub>d</sub> )	0.2587500	6.5800	1.1808	5.3992	1.3498
Pt	3(D <sub>∞h</sub> )	0.2340625	7.5468	0.1181	7.4288	2.4762
	3(D <sub>3h</sub> )	0.2428125	10.8903	2.2274	8.6629	2.8876
	4(D <sub>∞h</sub> )	0.2343750	11.3816	0.2329	11.1487	2.7872
	4(D <sub>4h</sub> )	0.2406250	16.8180	3.0849	13.7331	3.4333
	4(D <sub>2h</sub> )	0.2465625	18.0529	4.4790	13.5739	3.3935
	4(T <sub>d</sub> )	0.2565625	19.8123	6.3068	13.5056	3.3764
Cd	3(D <sub>∞h</sub> )	0.4812500	0.0806	0.0001	0.0806	0.0269
	3(D <sub>3h</sub> )	0.4825000	0.1200	0.0016	0.1184	0.0395
	4(D <sub>∞h</sub> )	0.4812500	0.1213	0.0001	0.1211	0.0303
	4(D <sub>4h</sub> )	0.4768750	0.1795	0.0022	0.1773	0.0443
	4(D <sub>2h</sub> )	0.4818750	0.2022	0.0035	0.1987	0.0497
	4(T <sub>d</sub> )	0.4831250	0.2400	0.0063	0.2337	0.0584



	cluster	$a$	$-E_2$	$E_2$	$-E_T$	$-E_b$
Mg	3(D <sub>∞h</sub> )	0.3862500	0.1017	-0.0011	0.1028	0.0343
	3(D <sub>3h</sub> )	0.3837500	0.1495	-0.0238	0.1732	0.0577
	4(D <sub>∞h</sub> )	0.3956250	0.1534	-0.0022	0.1556	0.0389
	4(D <sub>4h</sub> )	0.3718750	0.2331	-0.0424	0.2755	0.0689
	4(D <sub>2h</sub> )	0.3803125	0.2533	-0.0556	0.3089	0.0772
	4(T <sub>d</sub> )	0.3803125	0.2970	-0.0977	0.3947	0.0987
Se	3(D <sub>∞h</sub> )	0.2787500	3.4057	0.0620	3.3437	1.1146
	3(D <sub>3h</sub> )	0.2943750	4.8114	0.8744	3.9370	1.3123
	4(D <sub>∞h</sub> )	0.2781250	5.1660	0.1269	5.0390	1.2598
	4(D <sub>4h</sub> )	0.2900000	7.7459	1.3399	6.4059	1.6015
	4(D <sub>2h</sub> )	0.2993750	8.0426	1.7546	6.2879	1.5720
	4(T <sub>d</sub> )	0.3137500	8.7695	2.3549	6.4147	1.6037
Ti	3(D <sub>∞h</sub> )	0.1956250	2.4875	-0.0503	2.5378	0.8459
	3(D <sub>3h</sub> )	0.1934375	3.6593	-1.2172	4.8765	1.6255
	4(D <sub>∞h</sub> )	0.1953125	3.7453	-0.1022	3.8475	0.9619
	4(D <sub>4h</sub> )	0.1881250	5.5196	-2.0326	7.5522	1.8880
	4(D <sub>2h</sub> )	0.1918750	6.1512	-2.8119	8.9632	2.2408
	4(T <sub>d</sub> )	0.19171875	7.2386	-4.9826	12.2213	3.0553
Zn	3(D <sub>∞h</sub> )	0.23390625	0.1206	-0.0037	0.1243	0.0414
	3(D <sub>3h</sub> )	0.23109375	0.1780	-0.1015	0.2796	0.0932
	4(D <sub>∞h</sub> )	0.2334375	0.1811	-0.0075	0.1886	0.0472
	4(D <sub>4h</sub> )	0.2268750	0.2569	-0.1458	0.4027	0.1007
	4(D <sub>2h</sub> )	0.22984375	0.2970	-0.2291	0.5261	0.1315
	4(T <sub>d</sub> )	0.22953125	0.3519	-0.4120	0.7640	0.1910

Pacchioni [7] بحساب العنقود Mg<sub>3</sub> بتمائل D<sub>∞h</sub> و D<sub>3h</sub> هي في الغالب متحللة طاقيا (energetically degenerate). عنقود Mg<sub>4</sub> بتمائل T<sub>4</sub> تم حسابه على انه الأكثر استقرارا [4, 5, 7]. الشكل المثلي لـ Se<sub>3</sub> بتمائل D<sub>3h</sub> وجد عمليا [2, 5, 8] الأكثر استقرارا. لا توجد بيانات متوفرة في البحوث العلمية عن Se<sub>4</sub>. Ti<sub>3</sub> بتمائل D<sub>3h</sub> و Ti<sub>4</sub> بتمائل T<sub>d</sub> تم حسابها على انها الأكثر استقرارا [5]. الحساب المقدم هنا يعطي العناقيد الميكروية بثلاثة ذرات وأربعة ذرات بتمائل D<sub>3h</sub> و T<sub>4</sub> على التوالي الأكثر استقرارا لكل العناصر المعتبرة في هذه المجموعة. النتائج المقدمة هنا متوافقة بشكل جيد مع القيم في البحوث العلمية.

في النهاية نستنتج ان دالة PEF المقدمة هنا تعطي نتائج معقولة لاستقرار العناقيد في عناصر عديدة بتراكيب بلورية مختلفة.

تمت الترجمة في المركز العلمي للترجمة

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

10 - 5 - 2012