

Заключение

Сформулированы и формализованы условия стационарности прецизионной фокусировки потока заряженных частиц для переменного высокочастотного магнитного поля. Показана возможность построения таких полей, приведены их качественные и количественные характеристики. Результаты могут быть использованы в проектировании систем электронной и ионной оптики.

Библиографические ссылки

1. Альфа-, бета- и гамма-спектроскопия : пер. с англ. : [в 4 вып.] / под ред. К. Зигбана. – М. : Атомиздат, 1969. – 567 с.

2. Большая советская энциклопедия : в 30 т. Т. 27: Ульяновск – Франкфорт / гл. ред. А. М. Прохоров. – 3-е изд. – М. : Совет. энцикл., 1977. – 624 с.

3. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория поля. – 5-е изд., испр. и доп. – М. : Наука, 1967. – 460 с.

4. Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М. Фейнмановские лекции по физике / пер. с англ. А. В. Ефремова [и др.] ; под ред. Я. А. Смородинского. – М. : Мир, 1977. – [Вып.] 6: Электродинамика, 1977. – 346 с. – URL: [http://publ.lib.ru/ARCHIVES/F/FEYNMAN_Richard_Fillips/Feynman_R.F..._Feynmanovskie_lekcii_po_fizike_Vyp.6.\(1977\).%5Bdjv-fax%5D.zip](http://publ.lib.ru/ARCHIVES/F/FEYNMAN_Richard_Fillips/Feynman_R.F..._Feynmanovskie_lekcii_po_fizike_Vyp.6.(1977).%5Bdjv-fax%5D.zip) (дата обращения: 06.12.2013).

5. Ефимов И. Н., Морозов Е. А. Каноническое интегрирование гамильтоновых систем. – Екатеринбург ; Ижевск : Изд-во Ин-та экономики УрО РАН, 2006. – 198 с.

* * *

I. N. Efimov, DSc in Engineering, Professor, Tchaikovsky Technological Institute (branch) Kalashnikov Izhevsk State Technical University

E. A. Morozov, DSc in Engineering, Professor, Tchaikovsky Technological Institute (branch) Kalashnikov Izhevsk State Technical University

Focus and acceleration of charged particles in high-frequency magnetic field

The possibility of acceleration of charged particles and their precision focus for high energy characteristics of the flow of the target is considered.

Keywords: acceleration, high-precision focusing, charged particles, magnetic field

Получено: 30.10.13

УДК 621.774.5+536.7

С. Л. Ким, кандидат физико-математических наук, научный сотрудник
Институт механики Уральского отделения РАН

ПОПРАВКИ К ПОТЕНЦИАЛУ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АТОМОВ МЕТАЛЛОВ НА ОСНОВЕ УЧЕТА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ВНЕШНИХ ЭЛЕКТРОННЫХ ОБОЛОЧЕК

Внесена поправка в физико-математическую модель взаимодействия атомов металлов, основанная на электростатическом взаимодействии между внешними электронными оболочками атомов химических элементов. Доработка физико-математической модели позволила получить непрерывный потенциал без особенностей 1-го рода.

Ключевые слова: математическая модель, межатомные связи, электронная оболочка атомов, потенциал

Квантово-механические методы, основанные на первых принципах [1], позволяют найти значения величин, характеризующих идеальный кристалл в целом – найти значения модулей упругости, параметров решеток, рассчитать фононный спектр и др., описать локальные искажения решетки при этом не удастся. Кроме того, первопринципные методы чрезвычайно трудоемки, что фактически делает их неприемлемыми для решения задач материаловедения.

В целом необходимо признать, что, несмотря на огромные накопленные знания о структуре и свойствах вещества, строения атома, пока не существует универсального метода описания межатомных взаимодействий многокомпонентных материалов.

Согласно современным представлениям, взаимодействие атомов друг с другом осуществляется в основном посредством кулоновского взаимодействия их ядер и электронных оболочек [2]. Действительно, из четырех фундаментальных типов взаимодействия – внутриядерного, гравитационного, магнитного и электростатического – только последнее оказыва-

ется существенным во взаимодействии атомов. Влияние квантовых эффектов и, в частности, принципа Паули в наибольшей степени проявляется в областях с высокой электронной плотностью, например во внутренних оболочках атомов.

Поскольку внутренние оболочки атомов экранируют ядро, а взаимодействие между атомами в кристаллическом состоянии осуществляется главным образом за счет внешних оболочек, плотность которых во много раз меньше внутренних, то влияние квантовых эффектов в межатомном взаимодействии оказывается незначительным. Если предположить, что электронные конфигурации атомов уже известны, то потенциальная энергия их взаимодействия (межатомный потенциал) может быть найдена, как энергия кулоновского взаимодействия ядер и оболочек атомов. Конфигурацию внешних электронных оболочек атома вовсе не обязательно определять на основе первых принципов. Предполагая вид функции распределения электронной плотности в атоме известным, можно определить параметры этого рас-

предделения исходя из экспериментальных характеристик однокомпонентных кристаллов, металлов. Эти параметры могут быть найдены при решении обратной задачи электростатики и должны фигурировать в выражении для межатомного потенциала, если таковое удастся получить. Данное обстоятельство является принципиальным, так как при известном распределении электронной плотности в атоме появляется возможность в принципе решить проблему описания многокомпонентных соединений.

Варьируя вид этого распределения, можно подобрать его так, чтобы рассчитанные значения известных характеристик кристаллов оказались близкими к экспериментальным. Тогда можно считать, что вид электронного распределения в наибольшей степени соответствует тому, который имеет место быть в реальных атомах.

Потенциал электростатического взаимодействия атомов всецело зависит от характера распределения электронной плотности в оболочках атомов. В работе [3] авторами была предложена физико-математическая модель взаимодействия атомов металлов, основанная на электростатическом взаимодействии между внешними электронными оболочками атомов химических элементов.

Полученный авторами межатомный потенциал на основе эффективных атомных радиусов R и эффективных зарядов q представляет собой кусочно-гладкую функцию:

$$\varphi(R) = \begin{cases} k \frac{q_1 q_2}{2} \left[\frac{3}{R} - \frac{1}{R_1} - \frac{1}{R_2} - \frac{R^2 + R_1^2 + R_2^2}{2RR_1R_2} \right], & \text{при } R \leq R_2 \\ k \frac{q_1 q_2}{2} \left[\frac{1}{R} - \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} - \frac{R^2 + R_1^2 + R_2^2}{2RR_1R_2} \right], & \text{при } R_2 < R \leq R_1 \\ k \frac{q_1 q_2}{2} \left[-\frac{1}{R} + \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} - \frac{R^2 + R_1^2 + R_2^2}{2RR_1R_2} \right], & \text{при } R_1 < R \leq R_1 + R_2 \\ 0, & \text{при } R > R_1 + R_2 \end{cases} \quad (1)$$

В случае, если взаимодействующие атомы одинаковы, т. е. $q_1 = q_2$ и $R_1 = R_2$, выражение для межатомного потенциала упрощается:

$$\varphi(R) = \begin{cases} kq_1^2 \left[\frac{1}{R} - \frac{1}{R_1} - \frac{R}{4R_1^2} \right], & \text{при } 0 < R \leq R_1 \\ kq_1^2 \left[\frac{1}{R_1} - \frac{1}{R} - \frac{R}{4R_1^2} \right], & \text{при } R_1 < R \leq 2R_1 \\ 0, & \text{при } R \geq 2R_1 \end{cases} \quad (2)$$

На рис. 1 представлен вид межатомного потенциала по уравнению (1) и его составные части. Как видно из графика, межатомный потенциал является кусочно-гладкой функцией с изломами в точках $R = R_1$ и $R = R_2$.

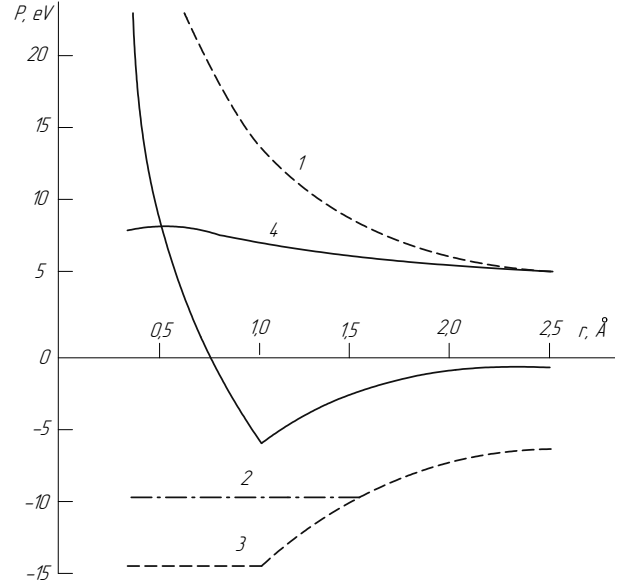


Рис. 1. Вид межатомного потенциала по уравнению (11) (жирная линия) и его составные части: 1 — $\varphi_{n_1} - \varphi_{n_2}$; 2 — $\varphi_{n_2} - \varphi_{c_1}$; 3 — $\varphi_{n_1} - \varphi_{c_2}$; 4 — $\varphi_{c_1} - \varphi_{c_2}$ при $q_1 = 1$, $R_1 = 1.5 \text{ Å}$ и $q_2 = 1$, $R_2 = 1.0 \text{ Å}$

Данный потенциал в его минимуме имеет особенность 1-го рода, что говорит о том, что не учтены поправки взаимодействия высших порядков. В конечном счете это приводит к возникновению бесконечных сил, что лишено физического смысла. В данной работе предпринята попытка устранить данный недостаток.

Согласно [8] функция потенциала взаимодействия должна быть непрерывной и гладкой. В данной работе сделана попытка модифицировать исследуемый потенциал так, чтобы функция, которая его описывает, стала гладкой и непрерывной. Для этого запишем в каждой точке перехода потенциала условие того, что функция гладкая и непрерывная:

$$\tilde{\varphi}_1(R_2) = \tilde{\varphi}_2(R_2), \quad \tilde{\varphi}_2(R_1) = \tilde{\varphi}_3(R_1),$$

$$\tilde{\varphi}_3(R_1 + R_2) = \tilde{\varphi}_4(R_1 + R_2) = 0 \quad (1)$$

и

$$\left. \frac{d\tilde{\varphi}_1}{dR} \right|_{R=R_2} = \left. \frac{d\tilde{\varphi}_2}{dR} \right|_{R=R_2}, \quad \left. \frac{d\tilde{\varphi}_2}{dR} \right|_{R=R_1} = \left. \frac{d\tilde{\varphi}_3}{dR} \right|_{R=R_1},$$

$$\left. \frac{d\tilde{\varphi}_3}{dR} \right|_{R=R_1+R_2} = \left. \frac{d\tilde{\varphi}_4}{dR} \right|_{R=R_1+R_2}, \quad (2)$$

где выражения для $\tilde{\varphi}_1$, $\tilde{\varphi}_2$, $\tilde{\varphi}_3$ и $\tilde{\varphi}_4$ есть

$$\tilde{\varphi}(R) = \begin{cases} \tilde{\varphi}_1 = k \frac{q_1 q_2}{2} \left[\frac{3}{R} - \frac{1}{R_1} - \frac{1}{R_2} - \frac{R^2 + R_1^2 + R_2^2}{2RR_1R_2} + f_1(R) \right], \\ \text{при } R \leq R_2 \\ \tilde{\varphi}_2 = k \frac{q_1 q_2}{2} \left[\frac{1}{R} - \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} - \frac{R^2 + R_1^2 + R_2^2}{2RR_1R_2} + f_2(R) \right], \\ \text{при } R_2 < R \leq R_1 \\ \tilde{\varphi}_3 = k \frac{q_1 q_2}{2} \left[-\frac{1}{R} + \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} - \frac{R^2 + R_1^2 + R_2^2}{2RR_1R_2} \right], \\ \text{при } R_1 < R \leq R_1 + R_2 \\ \tilde{\varphi}_4 = 0, \text{ при } R > R_1 + R_2 \end{cases} \quad (3)$$

Решая систему уравнений (1) и (2), находим выражения для $f_1(R)$ и $f_2(R)$:

$$f_1(R) = \frac{2R}{R_1^2} - \frac{2}{R_1} \quad (4)$$

и

$$f_2(R) = \frac{2R}{R_1^2} - \frac{2}{R_1}. \quad (5)$$

Таким образом, искомый потенциал можно записать в виде:

$$\tilde{\varphi}(R) = \begin{cases} \tilde{\varphi}_1 = k \frac{q_1 q_2}{2} \left[\frac{3}{R} - \frac{3}{R_1} - \frac{1}{R_2} - \frac{R^2 + R_1^2 + R_2^2}{2RR_1R_2} + \frac{2R}{R_1^2} \right], \\ \text{при } R \leq R_2 \\ \tilde{\varphi}_2 = k \frac{q_1 q_2}{2} \left[\frac{1}{R} - \frac{3}{R_1} + \frac{1}{R_2} - \frac{R^2 + R_1^2 + R_2^2}{2RR_1R_2} + \frac{2R}{R_1^2} \right], \\ \text{при } R_2 < R \leq R_1 \\ \tilde{\varphi}_3 = k \frac{q_1 q_2}{2} \left[-\frac{1}{R} + \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} - \frac{R^2 + R_1^2 + R_2^2}{2RR_1R_2} \right], \\ \text{при } R_1 < R \leq R_1 + R_2 \\ \tilde{\varphi}_4 = 0, \text{ при } R > R_1 + R_2 \end{cases} \quad (6)$$

На рис. 2 представлены зависимости модернизированного межатомного потенциала для алюминия, меди и сплава AlCu.

Таким образом, введение поправок в (6) позволяет получить непрерывный потенциал без особенностей 1-го рода.

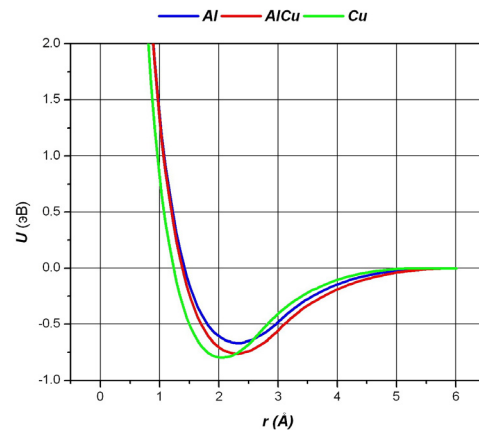


Рис. 2. Вид модернизированного межатомного потенциала для Al, Cu и AlCu

В случае однокомпонентного соединения имеем:

$$\tilde{\varphi}(R) = \begin{cases} \tilde{\varphi}_1 = k \frac{q_1 q_2}{2} \left[\frac{3}{R} - \frac{2}{R_1} - \frac{R^2 + 2R_1^2}{2RR_1^2} + \frac{2R}{R_1^2} \right], \\ \text{при } R \leq R_1 \\ \tilde{\varphi}_2 = k \frac{q_1 q_2}{2} \left[-\frac{1}{R} + \frac{2}{R_1} - \frac{R^2 + 2R_1^2}{2RR_1^2} \right], \\ \text{при } R_1 < R \leq 2R_1 \\ \tilde{\varphi}_2 = 0, \text{ при } R > 2R_1 \end{cases} \quad (7)$$

Внутренняя энергия однокомпонентного кристалла представляется в виде суммы энергий парных межатомных взаимодействий:

$$U(a) = \frac{1}{2} \sum_j \varphi(r_j), \quad (8)$$

где $\varphi(r_j)$ имеет вид (7); a – параметр решетки. Условия устойчивости кристаллической решетки при экспериментально наблюдаемом значении параметра решетки a_0 и энергии сублимации E_s могут быть записаны в виде:

$$U(a_0) = -E_s, \quad (9)$$

$$\left. \frac{dU}{da} \right|_{a=a_0} = 0, \quad (10)$$

$$\sum_j r_j \frac{d\varphi}{dr_j} = 0. \quad (11)$$

Пусть для определенности $\frac{R_1}{a_0} = 1$.

Тогда рассчитанная с использованием (3) зависимость $U(a)$ для элементов с ОЦК-решеткой будет иметь вид, представленный на рис. 4. Как видно из графика, зависимость внутренней энергии от параметра решетки тоже является кусочно-гладкой функцией.

Наличие интервалов кусочной гладкости обусловлено попаданием параметра решетки все большего числа сфер в область действия потенциала ($R < 2R_1$).

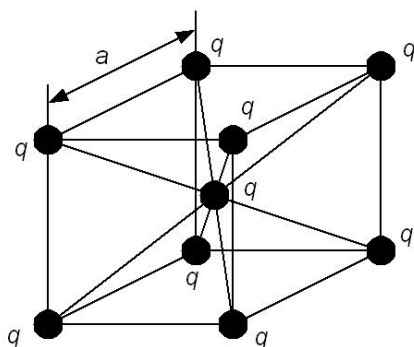


Рис. 3. Схематическое представление ОЦК-решетки для расчета коэффициентов R_1 и q_1

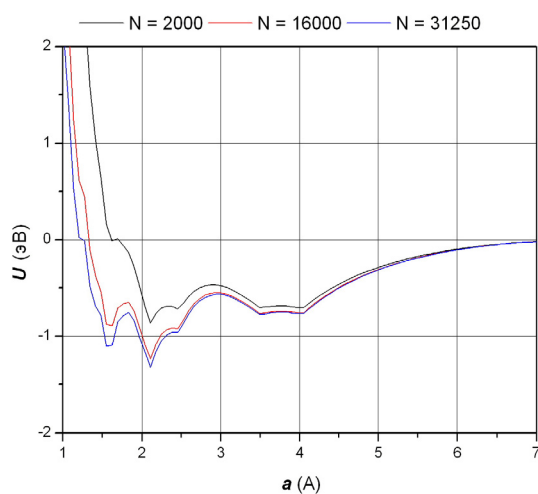


Рис. 4. Зависимость внутренней энергии элемента с ОЦК-решеткой от размера a элементарной ячейки для разного количества атомов N

Формально условие (10) может быть выполнено в нескольких точках (например, в точках излома кривой). Однако значения параметра решетки a в этих точках не являются физически приемлемыми. Аналогичная зависимость $U(a)$ получается и при другом выборе R_1 . Ввиду отмеченных обстоятельств становится очевидным, что производную $\frac{dU}{da}$ необходимо находить численным образом, с применением конечно-разностных методов. При этом шаг диф-

ференцирования Δa необходимо выбирать достаточно большим для того, чтобы охватить несколько кусочно-гладких интервалов (рис. 4).

Возьмем пробное значение параметра решетки a_1 вблизи ожидаемого при достаточно большом интервале Δa . Значения внутренней энергии в точках $a_1 - \Delta a$, a_1 , $a_1 + \Delta a$ обозначим соответственно U_1 , U_2 , U_3 ; т. е. $U_1 = U(a_1 - \Delta a)$, $U_2 = U(a_1)$, $U_3 = U(a_1 + \Delta a)$. Через полученные точки проведем параболу. Положение минимума этой параболы должно указывать равновесное значение параметра решетки a_0 . А величина минимума энергии на параболе должна соответствовать величине энергии сублимации E_s . Варьируя последовательно величину R_1 , можно подобрать ее таким образом, чтобы значение параметра решетки, найденное по указанной выше схеме, соответствовало экспериментальному значению a_0 .

Величина заряда оболочки подбирается из условия (9) с учетом глубины минимума параболы.

Как видно из описанной выше схемы, значения R_1 определяются только типом кристаллической решетки и значением a_0 . Поэтому для элементов с одинаковым типом кристаллической решетки отношение $\frac{R_1}{a_0}$ должно оставаться неизменным.

Выводы

Введение поправок в межатомный потенциал на основе эффективных атомных радиусов R и эффективных зарядов q позволяет получить непрерывный потенциал без особенностей 1-го рода.

Требуется дополнительная разработка методики определения параметров потенциала R_1 и q с использованием экспериментально наблюдаемых значений параметра решетки a_0 и энергии сублимации E_s .

Библиографические ссылки

1. Слэтер Дж. Методы самосогласованного поля для молекул и твердых тел : пер. с англ. – М. : Мир, 1978. – 658 с.
2. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. – М. : Наука, 1978. – 792 с.
3. Ким С. Л., Дементьев В. Б., Соловьев С. Д. Математическое моделирование образования межатомных связей в биметаллических соединениях // Хим. физика и мезоскопия. – 2008. – Т. 10, № 4. – С. 419–427.

S. L. Kim, PhD (Physics and Mathematics), Research Associate, Institute of Mechanics Ural Branch of Russian Academy of Sciences

Amendments to the potential of interaction between metal atoms on the basis of interaction between outer electron shells

Amendment is introduced to the physical and mathematical model of the interaction between metal atoms based on the electrostatic interaction between outer electron shells of atoms of chemical elements. Further development of physical-mathematical model allowed obtaining a continuous potential without the features of the 1st kind.

Keywords: mathematical model, interatomic bonds, electron shell of atoms, potential

Получено: 08.11.2013