ทฤษฎีการยึดติดในโลหะ

นางสาวศิริณีย์ หงษ์วิศิษฐกุล

004997

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต

ภาควิชาฟิสิกส์

บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

พ.ศ. 2522

I 17444821

A THEORY OF COHESION IN METALS

Miss Sirinee Hongwisitkul

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements

for the Degree of Master of Science

Department of Physics

Graduate School

Chulalongkorn University

1979

Thesis Title	A Theory of Cohesion in Metals
By	Miss Sirinee Hongwisitkul
Department	Physics
Thesis Advisor	Professor Virulh Sa-yakanit

Accepted by the Graduate School, Chulalongkorn University in partial fulfillment of the requirements for the Master's degree.

.....S. Bunnag.....Dean of Graduate School

(Associate Professor Supradit Bunnag, Ph.D.)

Thesis Committee

.....Wijit Senghaphan.....Chairman

(Assistant Professor Wijit Senghaphan, Ph.D.)

.....I-Ming Tang.....Member

(I-Ming Tang, Ph.D.)

.....A. Tachagumpuch.....Member

(Assistant Professor Anantasin Tachagumpuch, Ph.D.)

.....Virulh Sa-yakanit.....Member

(Professor Virulh Sa-yakanit, F.D.)

Copyright of the Graduate School, Chulalongkorn University

Thesis Title A Theory of Cohesion in Metals
By Miss Sirinee Hongwisitkul
Department Physics
Thesis Advisor Professor Virulh Sayakanit
Academic Year 1979

ABSTRACT

The cohesive energies of alkali metals are calculated within the cellular approximation. Three different methods of calculation are presented. The first method presented is that of Fröhlich who obtained the lowest state energy by solving a transcendental equation. The next method is that of Kuhn who employed the Imai's generalized WKB approximation in conjunction with the quantum defect method. In this thesis the lowest state energies of alkali metals is recalculated using the same ionization energies and the result compare We have generalized Fröhlich method to include the higher order correction. It is found that the cohesive energy is not sensitive to the correction introduced.

We finally give the third method which is more accurate than the first two methods due to Wigner and Seitz who obtained the lowest state energy by solving a radial Schrödinger equation. This method required the use of analytical atomic potential expression. Instead of the Prokofjew's potential a recent published analytical potential proposed by Cowly et al. is used to calculate the lowest state energy of alkali. The values of the lowest state energy together with the free electron gas gives a slightly improved value than the previous published cohesive energies. However, the theoretical values are still far from the experimental values. The discrepancy for theoretical values are proposed.

หัวข้อวิทยานิพนธ์ ทฤษฎีการยึดติดในโลหะ

ชื่อนิสิต นางสาวศิริณีย์ หงษ์วิศิษฐกุล

ภาควิชา ฟิสิกส์

อาจารย์ที่ปรึกษา ศาสตราจารย์ ดร.วิรุฬห์ สายคณิต

ปีการศึกษา 2522

บทคัดย่อ

ในการคำนวณหาพลังงานยึดติดของโลหะอัลคาไล เราใช้การประมาณแบบเซลลูลาร์ ในที่นี้จะกล่าวถึงวิธีการคำนวณ 3 วิธี วิธีแรกโฟรลิชซ์เป็นผู้เสนอ การคำนวณพลังงานของสถานะต่ำสุดได้จากการแก้สมการอดิสัย ส่วนวิธีการที่สองนั้นคุห์นนำเอาฟังก์ชั่นคลื่นทั่วไปของอิมาอิมาใช้ร่วมกับวิธีการควอนตัมดีเฟคท์ ในวิทยานิพนธ์นี้ได้คำนวณพลังงานของสถานะต่ำสุดอีกครั้งหนึ่ง โดยใช้ค่าพลังงานการทำเป็นอิออนค่าเดิม แต่ได้เพิ่มเทอมแก้ที่สูงอันดับขึ้น และพบว่าค่าเทอมแก้นี้ไม่มีผลต่อพลังงานยึดติด

วิธีที่สาม ซึ่งเป็นวิธีที่เสนอโดยวิกเนอร์และไซท์ โดยการแก้สมการของโชรดิงเยอร์ และใช้ศักย์ตัวเลขของอะตอมของเคาเลย์และคณะแทนของโปรคอฟจิว ปรากฏว่าพลังงานของสถานะต่ำสุดที่ได้รับให้ความถูกต้องได้ดีกว่าสองวิธีแรก ค่าพลังงานของสถานะต่ำสุดเมื่อรวมค่าแก้ของอิเลคตรอนกาซอิสระเข้าไปดีขึ้นกว่าเดิมเล็กน้อย อย่างไรก็ตามค่าทางทฤษฎียังต่างจากค่าที่ได้รับจากการทดลองอยู่ และความแตกต่างของค่าทางทฤษฎีจะได้แสดงให้เห็นต่อไป

Acknowledgements

The author wishes to express her appreciation to Dr. Virulh Sa-yakanit for his helpful and valuable suggestions and some discussions throughout the course of this research.

She is grateful to Dr. I-Ming Tang for the assistance in correcting this English manuscript.

Sincere thanks are given to Mr. Rangsan Chalurmsri for his helping in writing the FORTRAN IV program and also to other colleagues at the Department of Physics for their various helps.

Finally, she would like to acknowledge the kind support of the University Development Commission, National Education Council in providing the scholarship and of the Graduate School of Chulalongkorn University for the research scholarship.

CONTENTS

page

ABSTRACT iv

ACKNOWLEDGEMENTS vii

CONTENTS viii

LIST OF TABLES x

LIST OF FIGURES xi

CHAPTER I INTRODUCTION 1

1.1 Definition of the Cohesive Energy ... 1

1.2 The Cohesive Energy of the Five Types of Crystals 1

1.2.1 Crystals of Inert Gases or Molecular Crystals 2

1.2.2 Ionic Crystals 4

1.2.3 Covalent Crystals 6

1.2.4 Hydrogen-bonded Crystals 7

1.2.5 Metallic Crystals 8

1.3 Methods for Calculating the Cohesive Energy 10

CHAPTER II FRÖHLICH METHOD OF COHESION CALCULATION ... 12

2.1 The Cellular Method 12

2.2 Application of the Cellular Method in Calculating the Cohesive energy ... 16

หอสมุดกลาง จุฬาลงกรณมหาวิทยาลัย

page

CHAPTER III KUHN'S METHOD IN COHESIVE ENERGY CALCULATION 33

3.1 Imai's WKB Improvement Wave Function 33

3.2 The WKB Justification of Quantum Defect Method 39

3.3 WKB Approach in Conjunction with Quantum Defect in Cohesive Energy Calculation 46

CHAPTER IV THE COHESIVE ENERGY CALCULATION WITH ANALYTICAL MODEL POTENTIALS 53

4.1 Wigner and Seitz's Numerical Calculation 53

4.2 Heine-Abarenkov Type Model Potentials with Parameter Determined by Cowley, et al. 56

4.3 The Numerical Calculation of the Ground State Energy 60

CHAPTER V DISCUSSIONS 69

REFERENCES 75

APPENDIX A THE EXCHANGE AND SELF-POTENTIAL ENERGY CALCULATION 79

APPENDIX B CORRELATION ENERGY 93

APPENDIX C FORTRAN IV PROGRAM FOR SOLVING THE LOWEST STATE ENERGY 116

VITA 123

LIST OF TABLES

Table page

1.1 The cohesive energy of the inert gas crystals 3

1.2 The cohesive energy of the ionic crystals 5

1.3 Bond energy of the covalent crystals 7

1.4 Bond energy of the hydrogen-bonded crystals 8

1.5 The cohesive energy of simple metals 9

2.1 The values of r_o of the alkali series 27

2.2 The comparison of the calculated atomic radius and the cohesive energy with the experimental values ; the average energy per electron 32

3.1 The interpolation coefficients for quantum defect .. 49

3.2 The minimum energy and radius of the alkalis 50

3.3 The comparison of the cohesive energy and the atomic sphere radius of the alkalis when neglecting the correction terms and including such those terms 52

4.1 Fitted values of α_ℓ and nuclear charge Z_N for alkali metals 60

4.2 The lowest state energy and the cohesive energy for alkali metals 68

LIST OF FIGURES

Figure pages

2.1 The atomic polyhedra for (a) the face-centered cubic lattice and (b) the body-centered cubic lattice 13

4.1 The potential in two regions : the strong potential in A and the weak potential in B 57

4.2 Diagram showing four different type model potentials .. 59

B.1 The full curve represents the function $F(k_c r)$, equation (B.33), and the dash curve the function $\exp(-k_c r)$. 104

B.2 The region of integration for $\vec{k}_1$ lies inside the Fermi sphere and outside the shaded area. 107