

УДК 539.211+669.76

©1994

К РАСЧЕТУ РАЗМЕРНОЙ ПОПРАВКИ ПОВЕРХНОСТНОГО НАТЯЖЕНИЯ УЛЬТРАДИСПЕРСНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ЧАСТИЦ

В.В.Погосов

При описании идеально сферических поверхностей поверхностное натяжение обычно определяют как $\gamma(R) = \gamma^{(0)}(1 + \delta C)$, где C — кривизна поверхности. Имеющиеся в настоящее время схемы вычислений для малых металлических частиц дают противоположную размерную зависимость $\gamma(R)$, чем это наблюдается на опыте. Приводятся результаты расчета δ в рамках метода функционала плотности, полуэмпирические оценки δ из энергии образования вакансии и теплоты испарения. Сделана попытка получить правильный знак δ путем учета реальной площади поверхности металлической частицы.

Поверхностное натяжение сферической границы раздела двух фаз может быть представлено формулой

$$\gamma = \gamma^{(0)}(1 + \delta C), \quad (1)$$

где $\gamma^{(0)}$ — поверхностное натяжение плоской поверхности, C — кривизна. В работе [1] величина $\delta < 0$ выделена из энергии образования вакансии. Вакансия моделировалась пустотой радиусом r_0 ($C = -1/r_0$). Используя эти значения δ , оказалось возможным получить неплохие значения для энергии сублимации атома ($C = 1/r_0$). Поэтому в [1], как и в других теоретических работах, был сделан вывод о том, что величина δ положительна для металлических частиц (см. [2] и содержащиеся там ссылки). Термодинамическая интерпретация экспериментальных измерений скорости испарения капелек свинца и золота [3,4] приводит к противоположному знаку δ (как оказалось, вопрос о знаке δ не решен и для капелек (кластеров) некулоновских жидкостей [5-8]). Противоречие между теорией и экспериментами может быть устранено путем переопределения эквимолекулярной поверхности.

Для этих целей в статье используется версия теории функционала плотности, которая предполагает возможность статистического описания электронной подсистемы капельки. В этом случае ее размеры должны быть достаточно велики, чтобы можно было ввести понятия энергии Ферми и химического потенциала. С другой стороны, размеры капельки должны быть достаточно малы, чтобы были заметны размерные эффекты. Рассматриваемый случай — это предел слабого квантования, когда капелька содержит тысячи атомов и выполняется

неравенство $\mu \gg \Delta E$, где μ и ΔE — химпотенциал и среднее расстояние между уровнями электронов в частице [9].

При описании размерных эффектов в «термодинамическом» пределе Нагаевым [9] введена сглаженная по энергии плотность электронных уровней, одноэлектронная волновая функция и энергии определяются решением волнового уравнения с соответствующими граничными условиями для конечной системы. Усовершенствованный метод Томаса-Ферми, который используется в настоящей работе, основан на представлении об энергии системы как функционале электронной концентрации. Электронный профиль и химпотенциал определяются решением уравнения Эйлера-Лагранжа с соответствующими граничными условиями. Профиль может быть задан и вариационными параметрами, значения которых определяются методом Ритца (численные результаты отличаются незначительно [10]). Таким образом, в квазиклассическом описании оба подхода не противоречат друг другу.

Методом функционала плотности рассмотрен и случай сильного пространственного квантования электронных орбит. Для этих целей версия Томаса-Ферми неприменима и решение задачи требует самосогласованного решения системы одноэлектронных уравнений Кона-Шэма (см., например, [11]). Таким образом, кластер представляют как «атом», ядро которого — положительно заряженное ионное желе, а электроны квантуются в его поле.

1. Общие соотношения

Полагая, что капельки являются большими, полное число составляющих их атомов N можно разделить на объемные N^b и поверхностные N^s . Поэтому можно разделить и свободную энергию системы F на F^b и F^s . В рамках метода функционала плотности величина F является функционалом неоднородных электронной $n_e(r)$ и ионной концентраций $n_i(r)$

$$F = F[n_e(r), n_i(r)] = F^b + F^s. \quad (2)$$

Используя градиентное разложение функционала и псевдопотенциальные представления об электрон-ионном взаимодействии, величину F можно представить в интегральном виде (атомные единицы, $e = m = \hbar = 1$)

$$F = \int d^3r \left[g + g_{ee} |\nabla n_e|^2 + g_{ei} \nabla n_e \nabla n_i + g_{ii} |\nabla n_i|^2 + \frac{1}{2} \varphi(r) (n_e(r) - n_i(r)) \right], \quad (3)$$

где $g \equiv g[n_e(r), n_i(r), r_c]$ — квазиоднородная часть функционала (r_c — радиус псевдопотенциала Ашкрофта) $g_{ab} \equiv g_{ab}(n_e(r), n_i(r), r_c)$; $a, b = e, i$; φ — электростатический потенциал.

В соответствии с определением поверхностного натяжения

$$\gamma = F^s/A = \left(F[n_e(r), n_i(r)] - F[n_e^+ \theta(r - R_e), n_i^+ \theta(r - R_e)] \right) / A, \quad (4)$$

где $n_e^+ = Zn_i^+ = n^+$ — объемная концентрация зарядов, Z — валентность металла, A — площадь поверхности, $A = 4\pi R_e^2$. Величина R_e определяется условием нормировки

$$R_e = N^{1/3} r_s \quad (5)$$

или в терминах Гиббса — нулевой адсорбцией [12]. Таким образом, величина R_e представляет собой радиус эквимолекулярной поверхности. В предположении отсутствия пара другая форма записи этого определения с учетом условия электронейтральности

$$\int_0^{R_e} dr 4\pi r^2 [n_a^+ - n_a(r)] = \int_{R_e}^{\infty} dr 4\pi r^2 n_a(r). \quad (6)$$

Полагая возможным провести разложение $n_a(r)$, $\varphi(r)$, γ по степеням $1/R_e$ для сферической частицы ($n_a(r) = n_a^{(0)}(r) + n_a^{(1)}(r)/R_e + \dots$, $\gamma = \gamma^{(0)} + \gamma^{(1)}/R_e + \dots$), мы получили [2]

$$\gamma^{(0)} = 2 \int_{-\infty}^{\infty} dz \left[g_{ab} \frac{dn_a^{(0)}}{dz} \frac{dn_b^{(0)}}{dz} - \frac{1}{8\pi} \left(\frac{d\varphi^{(0)}}{dz} \right)^2 \right] \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dz [P_N(z) - P_T(z)], \quad (7)$$

$$\gamma^{(1)} = \int_{-\infty}^{\infty} dz z [P_N(z) - P_T(z)], \quad (8)$$

где P_N и P_T — нормальная и тангенциальная компоненты тезора давления. Ранее результат в виде (8) для простых жидкостей получен Баффом [13].

При выводе (8) в [2] не было обращено внимания на размерную зависимость радиуса псевдопотенциального остова, $r_c = r_c^{(0)} + r_c^{(1)}/R_e$. Величину $r_c^{(1)}$ несложно определить из уравнения для давления в центре капельки

$$P(R_e) = \frac{2\tau}{R_e} + O\left(\frac{1}{R_e^2}\right), \quad (9)$$

где τ — поверхностное напряжение. Поверхностное натяжение и напряжение связаны формулой [14]

$$\tau = \gamma + Ad\gamma/dA, \quad (10)$$

где $\tau^{(0)} = \gamma^{(0)}$ для плоской поверхности [15], и $\tau(R) = \tau^{(0)}(1 + \delta C/2)$ в сферическом случае [7]. Разложим P по степеням $1/R_e$ ($n_a^{(1)} \equiv n_a^{(1)}(z = -\infty)$)

$$P(R_e) = \left(P + \frac{\partial P}{\partial n_e^+} \frac{n_e^{(1)}}{R_e} + \frac{\partial P}{\partial n_i^+} \frac{n_i^{(1)}}{R_e} + \frac{\partial P}{\partial r_c} \frac{r_c^{(1)}}{R_e} \right) \Bigg|_{r_c=r_c^{(0)}} + O\left(\frac{1}{R_e^2}\right), \quad (11)$$

где $n_e^{(1)} = n_i^{(1)} = 2n^+ \gamma^{(0)} \chi_T$, χ_T — изотермическая сжимаемость [2]. Используя определение χ_T , условие отсутствия пара $P|_{r_c^{(0)}} = 0$ и выражение

$$\frac{dP}{dn^+} = \frac{\partial P}{\partial n_e^+} \frac{dn_e^+}{dn^+} + \frac{\partial P}{\partial n_i^+} \frac{dn_i^+}{dn^+}, \quad (12)$$

формулу (11) можно будет переписать в следующем виде:

$$P = \frac{2\gamma^{(0)}}{R_e} - \frac{\partial P}{\partial r_c} \frac{r_c^{(1)}}{R_e}. \quad (13)$$

Сравнивая (13) и (9), получим точный результат

$$r_c^{(1)} = 0. \quad (14)$$

Этот вывод справедлив для «упругой» двухкомпонентной кулоновской системы, для которой $n_a^{(1)} \neq 0$. Последнее неравенство следует из самых общих соображений: «невозможно задать деформацию, которая однородно изгибала бы толстую межфазную поверхность таким образом, чтобы локальное окружение каждой точки оставалось неизменным» [16]. В модели «твердой системы», например стабильного желе [10], $n_a^{(1)} = 0$, и из (13), (10) следует, что

$$r_c^{(1)} = 2\gamma^{(0)} \left(\frac{\partial P}{\partial r_c} \right)^{-1} \Big|_{r_c=r_c^{(0)}}. \quad (15)$$

Это приводит к появлению члена

$$2\gamma^{(0)} \frac{\partial \gamma}{\partial r_c} \left(\frac{\partial P}{\partial r_c} \right)^{-1} \Big|_{r_c^{(0)}} \frac{1}{R_e} \quad (16)$$

наряду с $\gamma^{(1)}/R_e$ в выражении для $\gamma(R_e)$. Некоторые данные о зависимостях $\partial \gamma / \partial r_c$ и $\partial P / \partial r_c$ содержатся в обзоре [17]. Анализ показывает, что эта поправка имеет отрицательный знак.

При описании свойств металлов радиус остова псевдопотенциала находится из условия стабильности однородного металла (равенство нулю давления в объеме). Полученные значения $r_c^{(0)}$ затем используются в расчетах поверхностного натяжения, т.е. в неоднородном случае. Модели неоднородного металла, имеющего границу, обязаны обеспечить равенство нулю давления в объеме точно так же, как и в однородном случае. Из существующих вычислительных схем этому требованию удовлетворяют схемы [17-20], где условие полной стабильности следует из уравнений Эйлера-Лагранжа для электронной и ионной компонент. В моделях, где не учитывается ионная релаксация и ионный профиль задан изначально ступенькой, давление в объеме должно быть равно нескомпенсированному поверхностному давлению

$$\Delta P^s = n^+ \left(\varphi^{(0)}(0) - \varphi^{(0)}(-\infty) \right), \quad (17)$$

где $\varphi^{(0)}(0)$ и $\varphi^{(0)}(-\infty)$ — значения потенциала на поверхности и в объеме. Для простых металлов оценки указывают, что ΔP^s сравнимо с модулем Юнга. Тем не менее такая сильная «модельная» неравновесность слабо сказывается в расчетах $\gamma^{(0)}$, так как среднее расстояние между атомами задается изначально таким же, как и в равновесном случае.

Реальная поверхность конденсированного вещества не является гладкой. Идея «атомной» шероховатости поверхности явилась плодотворной при объяснении анизотропии поверхностной энергии [1,21]. Равновесная форма кристалла конечных размеров состоит из плоских участков, ребер, вершин [14,22]. На это указывают и вычисления «формы поверхности» и распределения межатомных расстояний в Na_N , Cs_N , Mg_N кластерах [23]. Поверхность частицы может быть аппроксимирована сферой только для определенного набора чисел атомов $N_m = 13, 55, 147, 309 \dots$, которым соответствуют m «сферических» атомных слоев, $m = 1, 2, 3, 4 \dots$. Такие кластеры обычно представляют как выпуклые многогранники (см., например, [7,24]). В реальной физической ситуации, когда распределение зарядовой плотности для ядер описывается не сглаженной функцией, как в (6), а набором дельта-функций, трудно с математической точностью задать положение эквимолекулярной поверхности кластера с произвольным числом атомов N . Указанная неопределенность имеет порядок размера ячейки радиусом r_0 . В частности, это связано с тем, что минимальным объемом, для которого могут быть сформулированы уравнения механики сплошных сред, является объем ячейки Вигнера-Зейца [25]. Поэтому, учитывая несферичность поверхности частицы, мы будем принимать за радиус поверхности, на которой действует поверхностное натяжение, радиус сферы, описанной вокруг кластера, $R'_e \approx R_e + r_0$. Недавно такая процедура предложена в [7] для кластеров аргона. При таком формальном изменении R_e полная поверхностная энергия частицы не изменяется [12], поэтому

$$F^s = \gamma(R_e)A(R_e) = \gamma(R'_e)A(R'_e). \quad (18)$$

Полагая, что $R_e \gg r_0$,

$$\gamma(R'_e) = \frac{A(R_e)}{A(R'_e)}\gamma^{(0)} \left(1 - \frac{\delta_1}{R_e}\right) \approx \gamma^{(0)} \left(1 + \frac{\delta_1 - 2r_0}{R'_e}\right). \quad (19)$$

2. Результаты вычислений и их обсуждение

Для самосогласованных расчетов $\delta_1 = \gamma^{(1)}/\gamma^{(0)}$ использовались три набора пробных функций

$$n_i^{(0)}(z) = n^+ \left(1 - 0.5 \exp(z/M), z < 0; 0.5 \exp(-z/M), z > 0\right),$$

$$n_e^{(0)}(z) = n^+ \left(1 - 0.5 \exp(z/L), z < 0; 0.5 \exp(-z/L), z > 0\right), \quad (20)$$

$$\begin{aligned} n_i^{(0)}(z) &= n^+ / (1 + \exp(z/M)), \\ n_e^{(0)}(z) &= n^+ / (1 + \exp(z/L)), \end{aligned} \quad (21)$$

$$n_i^{(0)}(z) = n^+ \left(1 - A_1 \exp(\alpha_0(z - z_0)) \cos \nu(z - z_0), z < z_0; \right. \\ \left. A_2 \exp(-\beta_0(z - z_0)), z > z_0 \right),$$

$$n_e^{(0)}(z) = n^+ \left(1 - 0.5 \exp(z/L), z < 0; 0.5 \exp(-z/L), z > 0 \right). \quad (22)$$

Оптимальные значения вариационных параметров находились прямой минимизацией из условия минимума

$$\gamma(L, M, \dots) \Rightarrow \text{minimum} \quad (23)$$

в двухкомпонентной модели [17-20] для функций (20) и (21) и в модели однокомпонентной плазмы [26,27] для (20) и (22). Вид функций $g_{ab}(n_e, n_i)$ и значения параметров собраны в [17].

Аналитические выражения для электростатической компоненты в (7) и (8) находились путем интегрирования одномерного уравнения Пуассона

$$d^2 \varphi^{(0)} / dz^2 = 4\pi \left(n_i^{(0)}(z) - n_e^{(0)}(z) \right) \quad (24)$$

с граничным условием $\varphi^{(0)}(\infty) = 0$. В результате получено

$$d\varphi^{(0)} / dz = 2\pi n^+ \left(L \exp(-|z|/L) - M \exp(-|z|/M) \right), \quad (25)$$

$$d\varphi^{(0)} / dz = 4\pi n^+ \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \frac{1}{k} \left(L \exp(-k|z|/L) - M \exp(-k|z|/M) \right), \quad (26)$$

$$d\varphi^{(0)} / dz = 4\pi n^+ \begin{cases} \frac{L}{2} e^{z/L} - A_1 e^{\alpha_0(z-z_0)} \frac{[\alpha_0 \cos \nu(z-z_0) + \nu \sin \nu(z-z_0)]}{\alpha_0^2 + \nu^2}, & z < z_0, \\ -z + \frac{L}{2} e^{z/L} - \frac{A_2}{\beta_0} e^{-\beta_0(z-z_0)}, & z_0 \leq z \leq 0, \\ \frac{L}{2} e^{-z/L} - \frac{A_2}{\beta_0} e^{-\beta_0(z-z_0)}, & z > 0 \end{cases} \quad (27)$$

для (20), (21) и (22) соответственно.

Данные вычислений $\gamma^{(0)}$ и $\delta_1 = \gamma^{(0)} / \gamma^{(1)}$ по формулам (7) и (8) для Na и Cs приведены в табл. 1. Для сравнения здесь помещены результаты кон-шэмовских вычислений в модели твердого стабильного желе [10]. Во всех версиях величина δ_1 положительна. Такой же знак у δ_1 получен в приближении ближайших соседей для твердых кластеров аргона [7]: $\gamma^{(0)} = 30.0 \text{ erg/cm}^2$, $\delta_1 = 7.2a_0$ (значение $\gamma^{(0)}$ примерно вдвое превышает экспериментальную величину).

Электростатическая компонента дает сравнительно малый вклад в $\gamma^{(1)}$, и его величина сильно зависит от вида пробных функций. Например, для «симметричных» функций (20) и (21) $d\varphi^{(0)} / dz$ представляет собой четную функцию z , поэтому вклад этой составляющей в (8) равен

Данные вычислений $\gamma^{(0)}$, $\delta_1 = \gamma^{(1)}/\gamma^{(0)}$ по формулам (7) и (8) в различных версиях метода функционала плотности в тройной точке для Na и Cs.

Данные минимизации для плоского случая взяты из работ:

a — [26], b — [27], c — [18;19], d — [20], e — [17], f — [10]. $1a_0 = 5.29 \cdot 10^{-9}$ см.

В строке, соответствующей схеме e, — вариант двухкомпонентной модели, в котором пренебрегается эффектами зонной структуры

		$r_c^{(0)}(a_0)$	$\gamma^{(0)}$, erg/cm ²	$\delta_1(a_0)$
a	Na	1.67	464	2.97
		1.70	453	3.04
	Cs	2.16	215	3.06
		2.67	171	3.84
b	Na	1.70	433	2.33
	Cs	2.16	190	2.43
		2.67	158	2.73
c	Na	1.90	126	3.02
	Cs	3.125	62	2.58
d	Na	1.90	121	3.75
	Cs	3.125	76	2.38
e	Na	1.90	167	3.58
	f	Na	1.76	171
Cs		2.72	60	1.30

нулю, а градиентная компонента имеет сильный максимум в области $z > 0$, поэтому $\delta_1 > 0$. В виде теста значения δ_1 могут быть извлечены из экспериментальных значений теплоты испарения q и энергии образования вакансии ε_{vac} .

Рассмотрим процесс испарения металла как процесс создания новых поверхностей радиусом r_0 , $r_0 = Z^{1/3}r_s$ (для сжиженных инертных газов r_0 — среднее расстояние между атомами). Тогда теплота испарения (энергия сублимации) может быть записана в виде [1]

$$q \approx 4\pi r_0^2 \gamma^{(0)} (1 + \delta_1/r_0). \quad (28)$$

Следует отметить, что еще в работе [28] было замечено, что для некоторых веществ при низких температурах соблюдается соотношение, составленное из наблюдаемых величин

$$\alpha = 4\pi r_0^2 \gamma_{\text{exp}}^{(0)} / q_{\text{exp}} \approx \text{const}. \quad (29)$$

В работе [29] оно было использовано при исследовании нуклеации в ионизованных парах металлов. Для ряда элементов значения α представлены в табл. 2. За исключением Mg, Zn, Cd, величина α примерно равна 2/3. Если принять $\gamma^{(0)}$ в (29) равным экспериментально измеренному $\gamma_{\text{exp}}^{(0)}$, то в соответствии с (29) и данными табл. 2 равенство в (28) выполняется при

$$\delta_1/r_0 \approx 1/2. \quad (30)$$

Полуэмпирические оценки α и δ_1/r_0 . Данные для q , $\gamma^{(0)}$, ϵ_{vac} взяты из [31-33]

Элемент	q , eV	$4\pi r_0^2 \gamma_{\text{exp}}^{(0)}$, eV	ϵ_{vac} , eV	α	δ_1/r_0
Li	1.6	0.95	0.34	0.60	0.65
			0.40		0.60
Na	1.10	0.68	0.42	0.63	0.44
			0.26		0.62
K	0.91	0.58	0.39	0.64	0.40
			0.23		0.60
Rb	0.81	0.54	0.27	0.67	0.50
			0.15		0.69
Cs	0.78	0.52	0.28	0.67	0.47
			0.14		0.70
Cu	3.40	2.20	1.28	0.64	0.45
Ag	2.88	2.01	1.11	0.70	0.44
Au	3.77	2.43	0.89	0.64	0.62
			0.96		0.59
Mg	1.76	1.58	0.90	0.90	0.24
			0.58		0.43
Zn	1.30	1.47	0.54	1.13	0.41
			0.45		0.49
Cd	1.11	1.41	0.52	1.27	0.36
			0.40		0.47
Al	3.32	1.79	0.66	0.54	0.67
In	2.45	1.50	0.55	0.61	0.63
			0.46		0.68
Tl	1.78	1.35	0.46	0.76	0.59
Sn	3.08	1.51	0.54	0.49	0.70
Pb	2.04	1.38	0.50	0.68	0.61
			0.56		0.57
Fe	3.50	2.90	1.60	0.69	0.37
Ne	0.0224	0.0150	0.0207	0.67	0.038
Ar	0.0802	0.0529	0.0759	0.66	0.029
			0.0559		0.18
Kr	0.112	0.0737	0.0860	0.66	0.13
			0.0771		0.18
Xe	0.156	0.010	0.0107	0.64	0.19

Определим энергию образования вакансии ε_{vac} как работу по созданию из малой неоднородности пустоты радиусом r_0 в упругом континууме

$$\varepsilon_{\text{vac}} = \int_a^{r_0} P(r) 4\pi r^2 dr. \quad (31)$$

Далее, подставляя (9) и (10) в (31), получим

$$\varepsilon_{\text{vac}} = \int_a^{r_0} \gamma^{(0)} (1 - \delta_1/2r) 4\pi r dr. \quad (32)$$

Используя также гипотезу Гиббса о сохранении малой неоднородности в момент исчезновения (возникновения) «поверхности натяжения» [12], можно формально положить $a = 0$ и записать

$$\varepsilon_{\text{vac}} = 4\pi r_0^2 \gamma^{(0)} (1 - \delta_1/r_0). \quad (33)$$

В более упрощенном виде ($\delta_1 = 0$) выражение (33) было использовано при интерпретации уравнения Симона для нормальных веществ [30].

Теперь величину δ_1/r_0 можно вычислить из определений (28) и (33), используя экспериментальные значения для q (в тройной точке) и ε_{vac}

$$\frac{\delta_1}{r_s} = \frac{\beta - 1}{\beta + 1}, \quad (34)$$

где $\beta = q/\varepsilon_{\text{vac}}$. Последний столбец в табл. 2 указывает на высокую чувствительность δ_1/r_0 к точности измерения ε_{vac} . Тем не менее, учитывая условный характер оценок, величина δ_1/r_0 примерно равна 1/2 для приведенных в табл. 2 металлов, что подтверждает (30); $\delta_1 = 1.78(2.51)$ и $2.70(4.05)a_0$ для Na и Cs соответственно, что согласуется по знаку и порядку величины с δ_1 из табл. 1.

Теперь в соответствии с (1) и (19) $\delta \approx \delta_1 - 2r_0$. Используя данные [20] из табл. 1 для Cs ($r_s = 5.79a_0$) и Na ($r_s = 4.05a_0$) в тройной точке, получаем $\delta = -9.2$ и $-4.4a_0$ для Cs и Na соответственно. Если предположить, что $\delta_1 \approx r_0/2$ из табл. 2, то $\delta \approx -3r_0/2$ и $\delta \approx -8.2, -6.1, -5.5, -4.5a_0$ для Cs, Na, Pb, Au соответственно. Для сравнения приведем данные эксперимента [4]: $\delta = -11.4$ и $-10.4a_0$ для частиц Pb и Au.

Автор выражает благодарность А.Г.Храпаку за полезное обсуждение.

Список литературы

- [1] Perdew J.P., Wang Y., Engel E. // Phys. Rev. Lett. 1991. V. 66. N 4. P. 508-511.
- [2] Погосов В.В. // ФТТ. 1993. Т. 35. № 4. С. 1010-1021.
- [3] Морохов И.Д., Чижик С.П., Гладких Р.Т., Григорьева Л.К., Степанова С.В. // Изв. АН ССР. Металлы. 1979. № 6. С. 159-161.
- [4] Гладких Н.Т., Григорьева Л.К., Дукаров С.В., Зильберварг В.Е., Ларин В.И., Нагаев Э.Л., Чижик С.П. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 5. С. 13-22.
- [5] Hemingway S.J., Henderson J.R., Rowlinson J.S. // Faraday Sympos. Chem. Soc. 1981. V. 16. N 1. P. 33-40.

- [6] Fisher M.P.A., Wortis M. // *Phys. Rev.* 1984. V. B29. N 11. P. 6252-6260.
- [7] Vogelsberger W., Fritsche H.-G., Müller E. // *Phys. Status Sol. (b)*. 1988. V. 148. N 1. P.155-164.
- [8] Жуховицкий Д.И. // *Журн. физической химии*. 1993. Т. 67. № 10. С. 1962-1965.
- [9] Нагаев Э.Л. // *УФН*. 1992. Т. 162. № 9. С. 49-124.
- [10] Fiolhas C., Perdew J.P. // *Phys. Rev.* 1992. V. B45. N 11. P. 6207-6215.
- [11] Ekaradt W. // *Phys. Rev.* 1984. V. B29. N 4. P. 1558-1564; Utreras-Diaz C.A., Shore H.B. // *Phys. Rev.* 1989. V. B40. N 15. P. 10345-10350; Engel E., Perdew J.P. // *Phys. Rev.* 1991. V. B43. N 2. P. 1331-1337; Brack M. // *Rev. Mod. Phys.* 1993. V. 65. N 3. P. 677-732.
- [12] Русанов А.И. *Фазовые равновесия и поверхностные явления*. Л.: Химия, 1967. 388 с.
- [13] Buff F.P. // *J. Chem. Phys.* 1955. V. 23. N 2. P. 419-422.
- [14] Shuttleworth R. // *Proc. Phys. Soc.* 1950. V. A63. N 2. P. 444-502.
- [15] Пааш Г., Хитшольд М. *Достижения электронной теории металлов* / Под ред. П. Пише и М.Хитшольда. М.: Мир, 1984. Т. 2. 652 с.
- [16] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Теория упругости*. М.: Наука, 1965. 202 с.
- [17] Погосов В.В. // *Обзоры по теплофизическим свойствам веществ*. М., ИВТАН, 1989. № 5. С. 4-75.
- [18] Yakubov I.T., Khrapak A.G., Pogosov V.V., Trigger S.A. // *Phys. Status Sol. (b)*. 1988. V. 145. N 2. P. 455-463.
- [19] Iakubov I.T., Khrapak A.G., Pogosov V.V., Trigger S.A. // *Solid State Commun.* 1985. V. 56. N 8. P. 709-712.
- [20] Погосов В.В., Храпак А.Г. // *Теплофизика высоких температур*. 1987. Т. 25. № 6. С. 1231-1233.
- [21] Smoluchowski R. // *Phys. Rev.* 1941. V. 60. N 2. P. 661-671.
- [22] Ландау Л.Д. *Собрание трудов*. М.: Наука, 1969. Т. 2. С. 119.
- [23] Lopez M.J., Iñiguez M.P., Alonso J.A. // *Z. Phys.* 1991. V. D19. P. 141-143; Mañanes A., Alonso J.A., Lammers U., Borstel G. // *Phys. Rev.* 1991. V. B44. N 14. P. 7273-7282; Glossman M.D., Iñiguez M.P., Alonso J.A. // *Z. Phys.* 1992. V. D22. P. 541-545.
- [24] Gordon M.B., Cyrot-Lackmann F., Dejonqueres M.C. // *Surf. Sci.* 1979. V. 80. N 1. P. 159-164.
- [25] Ziesche P., Grafenstein J., Nielsen O.H. // *Phys. Rev.* 1988. V. B37. N 14. P. 8167-8178.
- [26] Evans R., Hasegawa M. // *J. Phys.* 1981. V. C14. N 15. P. 5225-5246.
- [27] Goodisman J., Rosinberg M.-L. // *J. Phys.* 1983. V. C16. N 4. P. 1143-1152.
- [28] Langmiur I. // *Chem Rev.* 1933. V. 13. N 1. P. 147-177.
- [29] Погосов В.В., Храпак А.Г. // *Теплофизика высоких температур*. 1988. Т. 28. № 2. С. 209-217.
- [30] Храпак А.Г. // *Письма в ЖЭТФ*. 1990. Т. 51. № 8. С. 403-405.
- [31] *Таблицы физических величин* / Под ред. И.К.Кикоина. М.: Атомиздат, 1976. 1008 с.
- [32] Орлов А.Н., Трушин Ю.В. *Энергии точечных дефектов*. М.: Энергоатомиздат, 1983. 81 с.
- [33] Chadwick A.V., Glyde H.R. *Rare Gas Solids* / Ed. M.L.Klein and J.A.Venables. London-New York: Academic Press, 1977. P. 444.

Запорожский машиностроительный институт

Поступило в Редакцию
28 сентября 1993 г.
В окончательной редакции
7 января 1994 г.