

ГЕОФИЗИКА, ГЕОФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ПОИСКОВ ПОЛЕЗНЫХ ИСКОПАЕМЫХ

DOI: 10.26730/1999-4125-2021-3-74-83

УДК 539.8

ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИЕ ПОТЕНЦИАЛЫ И ЭНЕРГИЯ В КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СРЕДАХ

ELECTROSTATIC POTENTIALS AND ENERGY IN CRYSTALLINE MEDIA

Польшгалов Юрий Иванович,
доктор физ.-мат. наук, профессор
Yuri I. Polygalov, Dr. of Physical and Mathematical Sciences
Шепелева Софья Алексеевна,
канд. техн. наук, доцент, e-mail: shepelevasa@kuzstu.ru
Sofya A. Shepeleva, Candidate of Engineering Sciences

Кузбасский государственный технический университет имени Т.Ф. Горбачева, 650000, Россия,
г. Кемерово, ул. Весенняя, 28
T.F. Gorbachev Kuzbass State Technical University, 28 Vesennyaya Street, Kemerovo, 650000,
Russian Federation

Аннотация:

Рассмотрена электростатика слоев кристалла на основе соединений $A^1B^3C_2^6$ с решеткой халькопирита. Построена элементарная прямоугольная ячейка слоев кристалла, удовлетворяющая условию сходимости при расчете электростатических потенциалов по методу Монкхорста. Показано, что электростатические потенциалы на ионах и энергии слоев в приповерхностной области кристалла возрастают по модулю и сходятся к объемным значениям на расстоянии порядка 2 нм от поверхности кристалла. Установлено, что при неизменной величине тетрагонального сжатия Υ с увеличением анионного смещения δ происходит рост по модулю потенциалов на анионах и одновалентных катионах, и заметное падение на трехвалентных катионах. Показано, что при неизменном анионном смещении с ростом Υ уменьшаются по модулю слоевые электростатические потенциалы и кулоновские энергии слоев кристалла. Сравнение проведенных нами расчетов объемных энергий по методу Монкхорста и Эвальда показывает их совпадение с точностью до пятого знака после запятой.

Ключевые слова: кристаллические среды, потенциалы на ионах, энергия слоев, методы Монкхорста и Эвальда, тетрагональное сжатие, анионное смещение, решетка халькопирита.

Информация о статье: поступило в редакцию 13.03.2021

Abstract:

The electrostatics of slab layers based on compounds $A^1B^3C_2^6$ with a chalcopyrite lattice is considered. An elementary rectangular cell of slab layers is constructed that satisfies the convergence condition when calculating electrostatic potentials using the Monkhorst method. It is shown that the electrostatic potentials on the ions and the energy of the layers in the near-surface region of the slab increase in modulus and converge to the volume values at a distance of ~ 2 nm from the surface of the slab. It was found that at a fixed value of tetragonal compression Υ with increasing anionic displacement δ there is a growth of the modulus potentials on the anions and monovalent cations, and a noticeable drop in trivalent cations. It is shown that the layer electrostatic potentials and the Coulomb energies of the slab layers decrease in modulus with an increase in the anionic displacement. A comparison of our calculations of volume energies by the Monkhorst and Ewald method shows their coincidence with an accuracy of up to the fifth decimal place.

Keywords: crystalline media, ion potentials, layer energy, Monkhorst and Ewald methods, tetragonal compression, anion displacement, chalcopyrite lattice.

Article info: received March 13, 2021

В настоящее время изучены процессы сорбции-десорбции свободного газа в крупных порах и трещинах каменных углей [1-3], условия существования и образования газовых гидратов природного газа [4], однако нет четкого определения понятия «твердый углегазовый раствор» (ТУГР)[5].

В работе [6] описывается эксперимент по изучению влияния электростатического поля на сорбционную метаноемкость углей, для чего методом сорбционных весов Мак-Бена на вакуумной установке изучалась равновесная сорбция и десорбция метана фракцией угля 0,25-0,50 мм для трех пластов Кузбасса разной стадии метаморфизма в статическом электрическом поле. Оказалось, что для образцов углей марки Д и КЖ сорбция метана в электростатическом поле значительно выше, чем без него, а при вакуумировании этих углей в них оставался метан, количество которого различно для разных марок угля и уменьшается с возрастом угля: для марки Д – 2,54 мг/г, марки КЖ – 2,26 мг/г, марки Т – 0 мг/г. Поскольку исследования проводились только в электростатических полях, следовательно, разработка методики образования твердых углегазовых растворов должна основываться на существовании электростатических полей в углях, что является актуальной задачей для выяснения природы твердых углегазовых растворов.

Природа газодинамических явлений сложна, на их формирование оказывает влияние множество факторов. До конца не ясно, что именно приводит к образованию или высвобождению значительного количества газа и переходу его в свободное состояние: разрыв внутримолекулярных связей метильных групп с «бахромой» и образование молекул метана или выделение молекул метана из межплоскостного пространства угля. Успешное решение задачи прогноза вида газодинамического явления, кроме реализации традиционных путей, должно основываться на результатах изучения возможных связей молекул метана с твердым углеводородом, процессов разрыва (деструкции) межатомных связей угольного вещества с освобождением молекул метана. Поэтому расчет электростатического поля угля, создаваемого метильными группами, содержащимися в «бахроме» макромолекулы угля, представляет значительный научный интерес.

В настоящее время для моделирования пространственной и электронной структуры молекул широко применяют различные методы квантовой химии. Рассмотрим электростатику слоев кристаллической структуры на основе соединений $A^1B^3C_6^6$ с решеткой халькопирита для разработки методики расчета электростатических потенциалов в объемной структуре с учетом кислородсодержащих и метильных групп «бахромы» макромолекул угля.

Многие физические свойства ионных кристаллов зависят от электростатических потенциалов. Такие потенциалы важны в оценке энергий связи и сжимаемости кристаллов [7]. Подобная схема была использована Левином и Марком [8] для расчета внутренних электронных поверхностных состояний в кристаллах с решеткой сфалерита, имеющих большую долю ионной составляющей химической связи (CdS). Для применения модели Зейтца при расчете поверхностных электронных состояний необходимо знать, как меняется электростатический потенциал при переходе от поверхности кристалла к его объему. Кроме того, предложенный Зейтцем [9] простой метод вычисления энергетической зонной структуры ионных кристаллов основан на использовании электростатических потенциалов. Знание величины электростатической энергии в приповерхностной области кристалла полезно для оценки стабильности структуры поверхности ионных кристаллов. Самой стабильной будет поверхность с наименьшей полной энергией, приходящейся, скажем, на пару поверхностных ионов. Вклад кулоновской составляющей в эту энергию должен быть преобладающим (до 90 %) [10].

Существуют различные способы вычисления объемных электростатических потенциалов. Остановимся на методе Эвальда [11]. В методе Эвальда электростатический потенциал

$$\varphi(\vec{r}) = \sum_{i=1}^s q_i \pi(\vec{r} - \vec{r}_i), \quad (1)$$

где s – число атомов в выбранной элементарной ячейке решетки, \vec{r}_i – радиус – вектор i – того иона в элементарной ячейке, q_i – его заряд, с помощью преобразования Эвальда [12] приводится к виду

$$\varphi(\vec{r}_i) = \sum_{\vec{a}_l} \sum_{j=1}^s q_j \left[\frac{\operatorname{erfc}\left(\frac{|\vec{r}_j - \vec{r}_i + \vec{a}_l|}{2\sqrt{\eta}}\right)}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i + \vec{a}_l|} \right] - \frac{q_i}{\sqrt{\pi\eta}} + \frac{4\pi}{\Omega} \sum_{b_0 \neq 0} \left\{ \sum_{j=1}^s q_j \cos(\vec{b}_n, \vec{r}_j - \vec{r}_i) \right\} \cdot |\vec{b}_n|^2 \cdot e^{-|\vec{b}_n|^2 \eta} \quad (2)$$

Здесь Ω – объем элементарной ячейки, s – число ионов в элементарной ячейке.

В первом слагаемом суммирование проводится по векторам прямой решетки, а в третьем слагаемом – по векторам обратной решетки. Второе слагаемое представляет вклад от так называемого собственного потенциала (потенциал от ионов той подрешетки, в которой находится рассматриваемый i – тый ион). По определению,

$$\operatorname{erfc}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty e^{-t^2} dt.$$

Для расчета слоевых потенциалов использовался метод Монхорста [13].

В этом методе кристалл (слэб) строится из слоев с некоторой образующей плоскостью, выбираемой таким образом, чтобы дипольный момент соответствующей элементарной ячейки слоя, обладающей двумерной трансляционной периодичностью, был параллелен плоскости слоя. Тогда кулоновская энергия слоя

$$E_{cl} = \frac{1}{2} \sum_{m'n't'} \frac{q_{nt} q_{n't'}}{|\vec{R}_{mnt} - \vec{R}_{m'n't'}|} \quad (3)$$

где q_{nt} – заряд иона, представима в виде

$$E_{cl} = E_1 + E_2 + E_3 \quad (4)$$

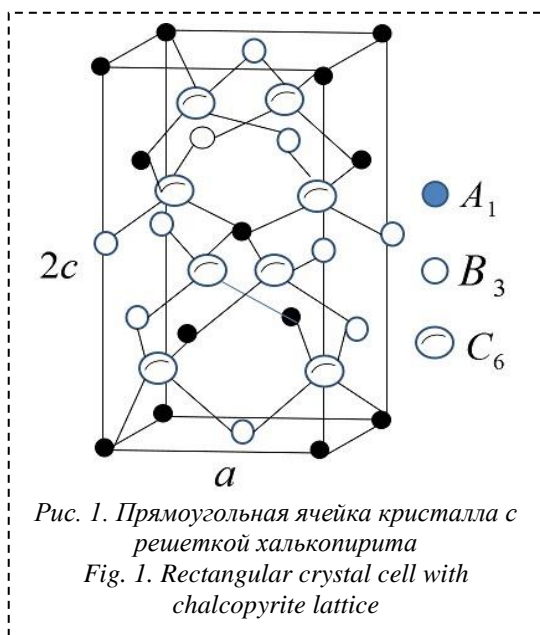
$$E_1 = \frac{\pi M^2}{A_0 K_2} (\sum_{nt} q_{nt}^2) F_2(\alpha, t) \quad (5)$$

$$E_2 = \frac{\pi M^2}{A_0 K_2} \sum_{n't'} q_{nt} q_{n't'} P(x_1, x_2, y_i \alpha t) \quad (6)$$

$$E_3 = -\frac{\pi M^2}{A_0} \sum_{n't'} q_{nt} q_{n't'} |\hat{z} \cdot (\vec{R}_{nt} - \vec{R}_{n't'})| \quad (7)$$

Потенциал на месте иона с номером nt равен

$$\Phi(\vec{R}_{nt}) = \frac{2\pi}{A_0 K_2} q_{nt} F_2(\alpha, t) + \frac{\pi}{A_0} \sum_{(nt \neq n't')} q_{n't'} [q_{n't'} P(x_1, x_2, y; \alpha t) / K_2 - |\hat{z} \cdot (\vec{R}_{nt} - \vec{R}_{n't'})|] \quad (8)$$



В формулах (5-8): A_0 – площадь элементарной ячейки образующей кристаллической плоскости, F_2 и P – функции, зависящие от структуры слоя. Они описаны в [14]. \vec{R}_{nt} – радиус-вектор иона в элементарной ячейке слоя, \hat{z} – единичный вектор нормали к плоскости слоя, K_2 – величина одного из векторов обратной двумерной решетки слоя. На рис. 1 представлена прямоугольная ячейка кристалла с решеткой халькопирита. Прimitивная ячейка образуется основными векторами

$$\vec{a}_1 = a \left(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \gamma \right), \vec{a}_2 = a \left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \gamma \right), \vec{a}_3 = a \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\gamma \right), \quad (9)$$

где $\gamma = \frac{c}{a}$, a и c – постоянные решетки.

Координаты атомов в примитивной ячейке

$$\vec{x}_1 = (1, 0, 0) Ag, \vec{x}_2 = \left(1, \frac{1}{2}, \frac{\gamma}{2} \right) Ag,$$

$$\vec{x}_3 = \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{\gamma}{2} \right) Ga, \vec{x}_4 = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0 \right) Ga,$$

$$\vec{x}_5 = \left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3\gamma}{4} \right) S, \vec{x}_6 = \left(\frac{1}{4} + \delta, \frac{3}{4}, \frac{\gamma}{4} \right) S,$$

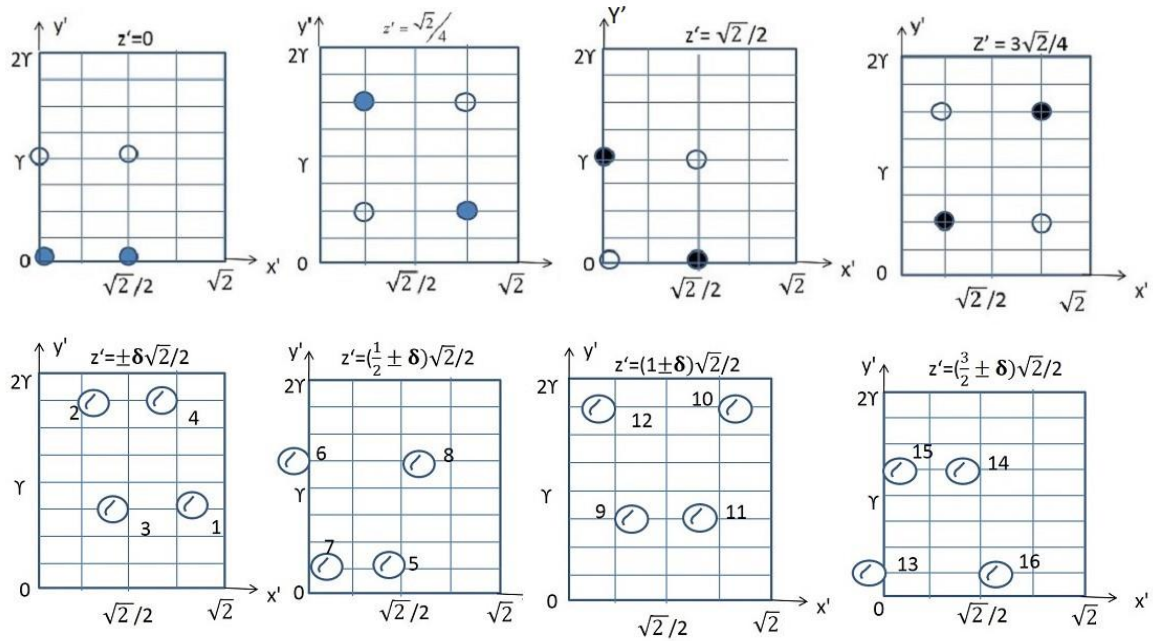


Рис. 2. Элементарные ячейки трансляционно-периодических плоскостей из ионов I (Ag), III (Ga), VI (S) групп, параллельных плоскости (110) исходного кристалла

Fig. 2. Elementary cells of translational-periodic planes from ions of I (Ag), III (Ga), VI (S) groups parallel to the plane (110) of the initial crystal

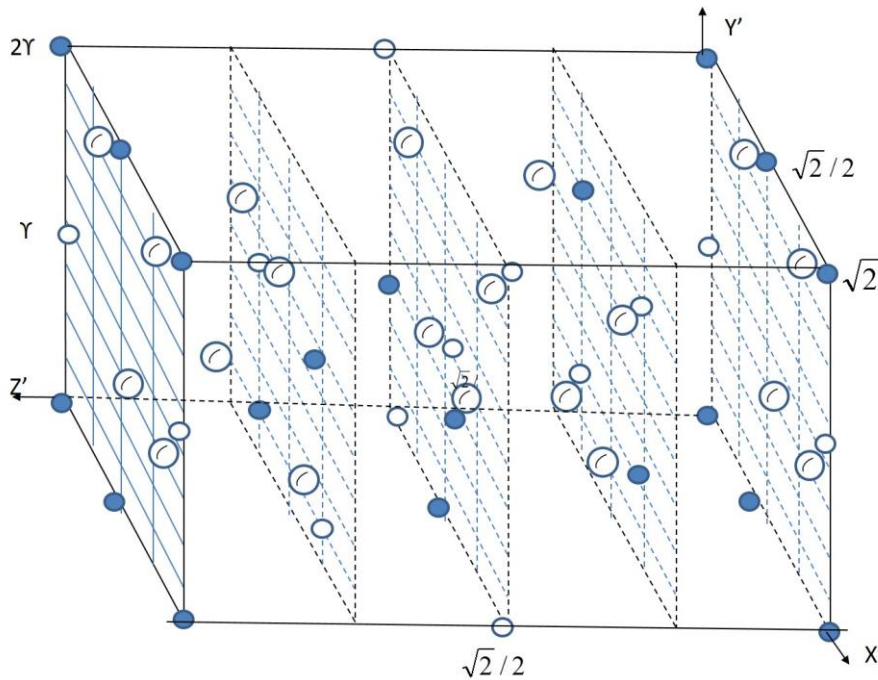


Рис. 3. Прямоугольная элементарная ячейка слоев слэба
 Fig. 3. Rectangular elementary cell of slab layers

$$\vec{x}_7 = \left(\frac{3}{4} - \delta, \frac{1}{4}, \frac{Y}{4}\right) S, \vec{x}_8 = \left(\frac{3}{4}, \frac{3}{4} + \delta, \frac{3Y}{4}\right) S$$

Здесь δ – анионное смещение.

На рис. 2 представлены элементарные ячейки трансляционно-периодических плоскостей из ионов I (Ag), III (Ga), VI (S) групп, параллельных плоскости (110) исходного кристалла.

В виде стопки этих плоскостей на рисунке 3 представлена прямоугольная элементарная ячейка слоев слэба.

Основные трансляционные векторы слоя слэба следующие:

Таблица 1.

Ион	X'	Y'	Z'
1S	$(1,5 + \delta) * \sqrt{2}/2$	$(\gamma/4) * 3$	$(-\delta) * \sqrt{2}/2$
2S	$(0,5 + \delta) * \sqrt{2}/2$	$(\gamma/4) * 7$	$(-\delta) * \sqrt{2}/2$
3S	$(0,5 - \delta) * \sqrt{2}/2$	$(\gamma/4) * 3$	$\delta * \sqrt{2}/2$
4S	$(1,5 - \delta) * \sqrt{2}/2$	$(\gamma/4) * 7$	$\delta * \sqrt{2}/2$
5S	$(1 - \delta) * \sqrt{2}/2$	$\gamma/4$	$(0,5 - \delta) * \sqrt{2}/2$
6S	$(-\delta) * \sqrt{2}/2$	$(\gamma/4) * 5$	$(0,5 - \delta) * \sqrt{2}/2$
7S	$\delta * \sqrt{2}/2$	$\gamma/4$	$(0,5 + \delta) * \sqrt{2}/2$
8S	$(1 + \delta) * \sqrt{2}/2$	$(\gamma/4) * 5$	$(0,5 + \delta) * \sqrt{2}/2$
9S	$(0,5 + \delta) * \sqrt{2}/2$	$(\gamma/4) * 3$	$(1 - \delta) * \sqrt{2}/2$
10S	$(1,5 + \delta) * \sqrt{2}/2$	$(\gamma/4) * 7$	$(1 - \delta) * \sqrt{2}/2$
11S	$(1,5 - \delta) * \sqrt{2}/2$	$(\gamma/4) * 3$	$(1 + \delta) * \sqrt{2}/2$
12S	$(0,5 - \delta) * \sqrt{2}/2$	$(\gamma/4) * 7$	$(1 + \delta) * \sqrt{2}/2$
13S	$(-\delta) * \sqrt{2}/2$	$\gamma/4$	$(1,5 - \delta) * \sqrt{2}/2$
14S	$(1 - \delta) * \sqrt{2}/2$	$(\gamma/4) * 5$	$(1,5 - \delta) * \sqrt{2}/2$
15S	$\delta * \sqrt{2}/2$	$(\gamma/4) * 5$	$(1,5 + \delta) * \sqrt{2}/2$
16S	$(1 + \delta) * \sqrt{2}/2$	$\gamma/4$	$(1,5 + \delta) * \sqrt{2}/2$
17Ag	0	0	0
18Ag	$\sqrt{2}/2$	0	0
18Ag	$\sqrt{2}/2$	γ	0
20Ag	0	γ	0
21Ag	$\sqrt{2}/4$	$\gamma/2$	$(\sqrt{2}/4)$
22Ag	$(\sqrt{2}/4) * 3$	$\gamma/2$	$(\sqrt{2}/4)$
23Ag	$(\sqrt{2}/4) * 3$	$(\gamma/2) * 3$	$(\sqrt{2}/4)$
24Ag	$(\sqrt{2}/4)$	$(\gamma/2) * 3$	$(\sqrt{2}/4)$
25Ga	0	0	$\sqrt{2}/2$
26Ga	0	γ	$\sqrt{2}/2$
27Ga	$\sqrt{2}/2$	γ	$\sqrt{2}/2$
28Ga	$\sqrt{2}/2$	0	$\sqrt{2}/2$
29Ga	$(\sqrt{2}/4) * 3$	$\gamma/2$	$(\sqrt{2}/4) * 3$
30Ga	$(\sqrt{2}/4)$	$\gamma/2$	$(\sqrt{2}/4) * 3$
31Ga	$(\sqrt{2}/4)$	$(\gamma/2) * 3$	$(\sqrt{2}/4) * 3$
32Ga	$(\sqrt{2}/4) * 3$	$(\gamma/2) * 3$	$(\sqrt{2}/4) * 3$

$$\vec{h}_1 = a(\sqrt{2}, 0), \vec{h}_2 = a(0, 2\gamma) \quad (11)$$

В этой же системе координат в таблице 1 приведены координаты атомов в элементарной ячейке слоя, удовлетворяющей условию сходимости кулоновских сумм: дипольный момент слоя в направлении оси Z' равен нулю.

Координаты атомов элементарной ячейки слоя слэба на основе соединения $A^1B^3C_2^6$ с решеткой халькопирита.

В таблицах 2-3 приведены результаты расчета электростатических потенциалов на катионах и анионах $AgAlS_2$ и $AgGaS_2$.

Электростатические потенциалы ϕ_1, ϕ_3, ϕ_6 на катионах первой, третьей и анионах шестой групп $AgAlS_2$ в зависимости от Z'. W – электростатическая энергия, приходящаяся на объем элементарной ячейки слоеслэба. Энергии приведены в единицах e^2/a , где e – заряд электрона, a – постоянная решетки.

Таблица 2.

Соединение	ϕ_1	ϕ_3	ϕ_6	Z' (в ед. $a \frac{\sqrt{2}}{2}$)	W	№ Слоя		
AgAlS ₂ $\Upsilon=0,901$, $\delta=0,054$ $\delta=0,05$	-	-	6.8365 6.8154	$-\delta$	-278.7556 -277.6616	1		
	-4.165 -4.224	-10.145 -10.092	-	0				
	-	-	8.3045 8.2666	δ				
	-4.4540 -4.529	-11.1300 -11.061	-	$\frac{3}{2}$				
	-	-	8.3335 8.2945	$\frac{3}{2} + \delta$				
	-	-	8.3321 8.293	$-\delta + 2$				
	-4.4555 -4.5305	-11.1279 -11.0596	-	2	-284.6778 -283.5334	2		
	-	-	8.3324 8.293	$\delta + 2$				
	-4.45540 -4.53049	-11.1281 -11.0597	-	$\frac{3}{2} + 2$				
	-	-	8.3324 8.2934	$\frac{3}{2} + \delta + 2$				
	-4.45540 -4.53049	-11.1281 -11.0597	8.3324 8.2934	$>3,55$			-284.6784 -283.5340	3

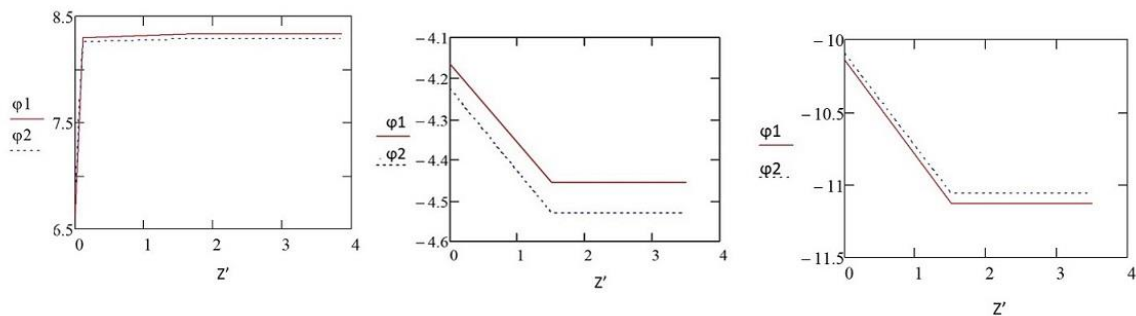


Рис. 4. Электростатические потенциалы ϕ_1 и ϕ_2 на анионах, трех- и одновалентных катионах AgAlS₂ в зависимости от Z' . Потенциал ϕ_1 соответствует анионному смещению $\delta = 0,054$, а ϕ_2 соответствует $\delta = 0,05$. Тетрагональное сжатие $\Upsilon = 0,901$

Fig. 4. The electrostatic potentials of ϕ_1 and ϕ_2 on anions, three- and monovalent cations AgAlS₂ depending on Z' . Potential ϕ_1 corresponds to anionic displacement $\delta = 0.054$, and ϕ_2 corresponds to $\delta = 0.05$. Tetragonal compression $\Upsilon = 0.901$

Электростатические потенциалы ϕ_1 , ϕ_3 , ϕ_6 на катионах первой, третьей и анионах шестой групп AgGaS₂ в зависимости от Z' . W – электростатическая энергия, приходящаяся на объем элементарной ячейки слоевслэба. Энергии приведены в единицах e^2/a , где e – заряд электрона, a – постоянная решетки.

Таблица 3.

Соединение	Φ_1	Φ_3	Φ_6	Z' (в ед. $a \frac{\sqrt{2}}{2}$)	W	¹ № слэба
AgGaS ₂ $\Upsilon=0,8946$ $\delta=0,054$ $\delta=0,05$	-	-	6.8559 6.8346	$-\delta$	-277.6616 -278.2966	1
	-4.1767 -4.2357	-10.1714 -10.1175	-	0		
	-	-	8.3274 8.2891	δ		
	-4.462209 -4.5376	-11.1542 -11.0855	-	$\frac{3}{2}$		
	-	-	8.3532 8.3138	$\frac{3}{2} + \delta$	-283.5334 -284.1635	2
	-	-	8.3519 8.3125	$-\delta + 1$		
	-4.4636 -4.5391	-11.1522 -11.0833	-	1		
	-	-	8.3519 8.3130	$\delta + 1$		
-	-	8.3522 8.3128	$\frac{3}{2} + 1$	-283.5340 -284.1642	3	
-4.4635 -4.5390	-11.1523 -11.0835	-	$\frac{3}{2} + \delta + 1$			
-	-	8.3522 8.3128	$>2,5$			

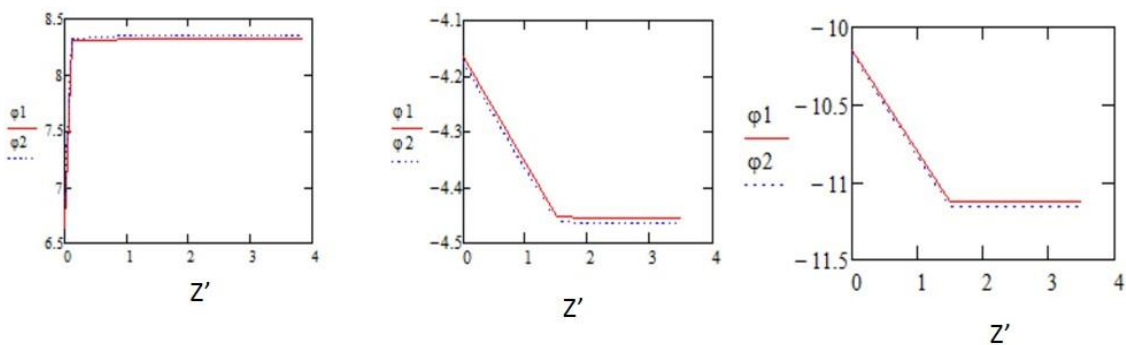


Рис. 5. Электростатические потенциалы ϕ_1 и ϕ_2 на анионах, трех- и одновалентных катионах в зависимости от Z' при неизменном $\delta = 0,054$. Потенциал ϕ_1 соответствует AgAlS₂, ($\Upsilon= 0,901$), а ϕ_2 соответствует AgGaS₂ ($\Upsilon= 0,8946$)

Fig. 5. Electrostatic potentials ϕ_1 and ϕ_2 on anions, three- and monovalent cations depending on Z' at constant $\delta = 0.054$. Potential ϕ_1 corresponds to AgAlS₂, ($\Upsilon= 0.901$), and ϕ_2 corresponds to AgGaS₂ ($\Upsilon= 0.8946$)

Из данных, приведенных в таблицах 2-3 и на рисунках 4-5, следует, что с ростом расстояния от поверхности слэба в направлении оси Z' потенциалы на атомах растут по модулю и стабилизируются при $Z' \sim 2$ нм. Растут также по модулю кулоновские энергии W , стабилизируясь во втором слое.

Таблица 4.

Соединение	AgAlSe ₂	AgGaTe ₂	AgGaSe ₂	AgAlSe ₂	AgInS ₂	AgInSe ₂
γ	0.9205	0.9935	0.9825	0.9205	0.960	0.958
δ	0,02	0/0	0..0	0.02	0.0	0.0
1W	-267.5077	-255.7764	-268.3139	-267.5077	-258.5861	-258.7539
2W	-273.0170	-261.1572	-273.8101	-273.0170	-263.9076	-264.0717
3W	-273.0175	-261.1579	-273.8106	-273.0175	-263.9081	-264.0723

Соединение	AgInTe ₂ CuGaTe ₂	CuAlS ₂	CuGaSe ₂	CuAsSe ₂	CuInS ₂	CuAlTe ₂
γ	1.0	0.980	0.9825	0.977	1.0	0.9875
δ	0.025	0.025	0.0	0.02	0.06	0.0
1W	-261.6585	-263.4806	-256.6990	-262.4489	-276.2416	-256.3216
2W	-267.3322	-269.1307	-262.0607	-268.0375	-270.2004	-261.6911
3W	-267.3331	-269.1316	-262.0614	-268.0383	-276.2428	-261.6919

Соединение	CuTlSe ₂	CuTlS ₂	CuInTe ₂	CuInSe ₂	CuGaS ₂
γ	0.9975	1.0	1.00	1.0	0.974
δ	0.02	0.0	0.025	-0.030	0.025
1W	-260.6128	-270.2004	-261.6585	-247.3711	-264.0270
2W	-266.2280	-276.2416	-267.3322	-252.4173	-269.6699
3W	-266.2289	-276.2428	-267.3331	-252.4179	-269.6707

Из рис. 4 видно, что при неизменном γ с увеличением анионного смещения δ происходит рост по модулю потенциалов на анионах и одновалентных катионах, а также заметное падение на трехвалентных катионах.

Из рис. 5 и таблиц 2-3 следует, что при неизменном анионном смещении с ростом γ уменьшаются по модулю слоевые электростатические потенциалы и энергии.

Заметим, что проведенные нами расчеты энергий *W* по методу Эвальда с точностью до четырех знаков после запятой совпадают с результатами вычислений, представленных выше, а также с результатами расчета по методу Эвальда [15] для AgGaS₂.

В таблице 4 представлены результаты расчета слоевых энергий *W* для ряда соединений A¹B³C₂⁶ с решеткой халькопирита. Числа перед *W* нумеруют слои слэба. Значения γ и δ приведены в [10].

Энергии *W* слоевых элементарных ячеек для соединений A¹B³C₂⁶ с решеткой халькопирита. Энергии приведены в единицах e^2/a , где *e* – заряд электрона, *a* – постоянная решетки.

Приведенные в таблице 4 значения энергий с точностью до четвертого знака после запятой совпадают с энергиями 3*W*, вычисленными по методу Эвальда со следующими параметрами: $\eta = 2.5$, число векторов прямой прямоугольной решетки халькопирита (рис. 1) равно 92, число векторов обратной решетки равно 382. Видно, что для всех соединений, представленных в таблице, имеет место сходимость к объемным значениям 3*W* во втором слое слэба.

Разработана методика расчета электростатических потенциалов и энергии взаимодействия, которая может быть использована для расчета электростатических полей, создаваемых углями разной степени метаморфизма за счет различного содержания функциональных групп и установления их свойств в виде твердых углегазовых растворов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Малышев, Ю.Н. Фундаментально-прикладные методы решения проблемы метана угольных пластов / Ю.Н. Малышев, К.Н. Трубецкой, А.Т. Айруни. – М.: Изд-во АГН, 2000. – 519 с.
2. Kiryaeva, T.A. Evaluation of methane resources in Kuzbass in the context of new ideas on methane occurrence in coal beds / T.A. Kiryaeva // J Min Sci. – 2012. – V.48. – pp. 825-831.

3. Шепелева, С.А. Метан и выбросоопасность угольных пластов / С.А. Шепелева, В.В. Дырдин, Т.Л. Ким и др. – Томск: Изд-во Томского университета, 2015. – 178с.
4. Скорость образования и разложения газового гидрата, формирующегося в природном угле / В.Г. Смирнов, А.Ю. Манаков, В. В. Дырдин и др. // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2019. – Т. 62. – № 10 (742). – С. 112-121.
5. Разработка методики оценки термодинамики распада углеметановых геоматериалов / Г.Я. Полевщиков Е.С. Непейна, Е.М. Цуран // Вестник Кузбасского государственного технического университета. – 2015. – № 6. – С. 13-19.
6. Тарасов, Б.Г. Электроадсорбционный эффект в ископаемых углях Кузбасса / В.В. Дырдин, С.П. Панасейко // Физико-технические проблемы разработки полезных ископаемых – 1974. – № 6. – С. 98-100.
7. Tosi, M.P. Cohesion of ionic solids in the Born model // Solid State Physics - 1964. – V. 16. – P. 1-120.
8. Zeitz, F. Chapt. XII. The excited electronic states of solids // The Modern Theory of Solids (Mc Graw-Hill, New York) – 1967. – P. 407.
9. Levine, J.D., Mark, P. Theory and observation of intrinsic surface states of ionic crystals // Phys. Rev. B – 1966. – V. 144. – Pp. 751-763.
10. Павлов, П.В., Хохлов, А.Ф. Физика твердого тела // М.: Высш. Школа. – 1985. – 384 с.
11. Ewald, P. Evaluation of optical and electrostatic lattice potential // Ann. Phys – 1921. – V. 64. – Pp. 253-287.
12. Monkhorst, H.J., Schwalm, W.A. Electrostatics for periodic films of atoms. // Phys. Rev. B – 1981. – V. 23. – N 4. – Pp. 1729-1742.
13. Кучин, В.А., Курилов, В.Ф. Электромагнитное поле кристаллической решетки // Томск: Изд. ТГУ – 1985. – 117 с.
14. Тупицын, В.Е. Энергетическая зонная структура и динамика решетки некоторых соединений АПВ₂: диссертация ... кандидата физико-математических наук : 01.04.07. Кемерово. – 1983. – 161 с.
15. Jaffe, J.E., Zunger, A. Theory of the band gap anomaly in ABC₂ chalcopyrite semiconductors // Phys. Rev. B – 1984. – V. 29. – N4. – Pp. 1882-1906.

REFERENCES

1. Malyshev, Yu.N. Fundamental'no-prikladnye metody resheniya problemy metana ugol'nyh plastov / Yu.N. Malyshev, K.N. Trubeckoj, A.T. Ajruni. – М.: Изд-во АГН, 2000. – 519 с.
2. Kiryaeva, T.A. Evaluation of methane resources in Kuzbass in the context of new ideas on methane occurrence in coal beds / T.A. Kiryaeva // J Min Sci. – 2012. – V.48. – pp. 825-831.
3. Shepeleva, S.A. Metan i vybrosoopasnost' ugol'nyh plastov / S.A. Shepeleva, V.V. Dyrdin, T.L. Kim i dr. – Томск: Изд-во Томского университета, 2015. – 178с.
4. Skorost' obrazovaniya i razlozheniya gazovogo gidrata, formiruyushchegosya v prirodnom ugle / V.G. Smirnov, A.Yu. Manakov, V. V. Dyrdin i dr. // Izvestiya vysshih uchebnyh zavedenij. Fizika. – 2019. – Т. 62. – № 10 (742). – S. 112-121.
5. Razrabotka metodiki ocenki termodinamiki raspada uglemetanovyh geomaterialov / G.Ya. Polevshchikov E.S. Nepeina, E.M. Curan // Vestnik Kuzbasskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta. – 2015. – № 6. – S. 13-19.
6. Tarasov, B.G. Elektroadsorbcionnyj effekt v iskopaemyh uglyah Kuzbassa / V.V. Dyrdin, S.P. Panasejko // Fiziko-tekhicheskie problemy razrabotki poleznyh iskopaemyh – 1974. – № 6. – S. 98-100.
7. Tosi, M.P. Cohesion of ionic solids in the Born model // Solid State Physics - 1964. – V. 16. – P. 1-120.
8. Zeitz, F. Chapt. XII. The excited electronic states of solids // The Modern Theory of Solids (Mc Graw-Hill, New York) – 1967. – P. 407.
9. Levine, J.D., Mark, P. Theory and observation of intrinsic surface states of ionic crystals // Phys. Rev. B – 1966. – V. 144. – Pp. 751-763.
10. Pavlov, P.V., Hohlov, A.F. Fizika tverdogo tela // М.: Vyssh. SHkola. – 1985. – 384 с.
11. Ewald, P. Evaluation of optical and electrostatic lattice potential // Ann. Phys – 1921. – V. 64. – Pr. 253-

287.

12.Monkhorst, H.J., Schwalm, W.A. Electrostatics for periodic films of atoms. // Phys. Rev. B – 1981. – V. 23. - N 4. – P.P. 1729-1742.

13.Kuchin, V.A., Kurilov, V.F. Elektromagnitnoe pole kristallicheskoj reshetki //Tomsk: Izd. TGU – 1985. – 117 s.

14.Тупицын, В.Е.Энергетическая зонная структура и динамика решетки некоторых соединений АИВ2: диссертация ... кандидата физико-математических наук : 01.04.07. Кемерово. – 1983. – 161 с.

15.Jaffe, J.E., Zunger, A. Theory of the band gap anomaly in ABC₂ chalcopyrite semiconductors //Phys.Rev. B – 1984. – V.29. – N4. – Pr. 1882-1906.

Библиографическое описание статьи

Польгалов Ю.И., Шепелева С.А.
Электростатические потенциалы и энергия в кристаллических средах // Вестник Кузбасского государственного технического университета. – 2021. – № 3 (145). – С. 74-83.

Reference to article

Polygalov Yu.I., Shepeleva S.A. Electrostatic potentials and energy in crystalline media. Bulletin of the Kuzbass State Technical University, 2021, no.3 (145), pp. 74-83.