

рации атомов решетки, появления незамкнутых d -оболочек и соотношения размеров различных атомов в решетке могут существовать и более сложные структуры. Эти аспекты мы рассматривать не хотим.

Вопрос об основном состоянии металла поднимает проблемы, полностью отличные от тех, с которыми мы имели дело в предыдущем параграфе. Он гораздо ближе связан с электронной теорией, представленной в предыдущих главах книги *). Энергия связи металла (энергия когезии) определяется как энергия, необходимая для разложения металла на нейтральные атомы.

В качестве примера рассмотрим одновалентный металл. При кристаллизации каждый атом вносит в решетку единственный валентный электрон (помимо своих замкнутых оболочек). Совокупность валентных электронов образует электронный газ. Энергия связи может быть разделена на две части: энергию каждого электрона как частицы во взаимодействующем электронном газе и поправки, необходимые для учета факта внедрения электронного газа в кристаллическую решетку.

Первая часть уже рассчитана в модели желе **) (взаимодействующий электронный газ на фоне однородно распределенного положительного заряда) в приближении Хартри — Фока в ч. I, § 11. Из (ч. I.11.1) находим для энергии электрона Хартри — Фока выражение

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{e^2 k_F}{2\pi} \left(2 + \frac{k_F^2 - k^2}{kk_F} \ln \left| \frac{k + k_F}{k - k_F} \right| \right). \quad (1.41)$$

Средняя энергия на электрон следует отсюда путем интегрирования по ферми-сфере и деления на число электронов. Значение первого члена в (1.41) известно уже из (ч. I.6.18): $\bar{E} = (3/5)E_F$.

В литературе энергия электрона часто приводится как функция среднего расстояния r_s между электронами в электронном газе [определяемого равенством $(4\pi/3)r_s^3 = 1/n$, n — концентрация электронов] или безразмерной величины $r_s = r_0/a_0$ (a_0 — боровский радиус). У большинства металлов r_s лежит между 2 и 6. Большие r_s означают низкую концентрацию электронов и наоборот.

Из (1.41) имеем для средней энергии электрона Хартри — Фока (с эффективной массой m^*) как функции r_s

$$\bar{E}_{HF} = \left[\frac{2.21}{r_s^2} \left(\frac{m}{m^*} \right) - \frac{0.916}{r_s} \right] \text{Ry}. \quad (1.42)$$

Второй член является вкладом обменного взаимодействия, принимаемого во внимание в приближении Хартри — Фока.

Влияние кристалла рассмотрим в два этапа. Сначала заменяем

*) См. ч. I. (Примеч. пер.).

**) В отечественной литературе используется также термин «континуальная модель» (Примеч. пер.)