

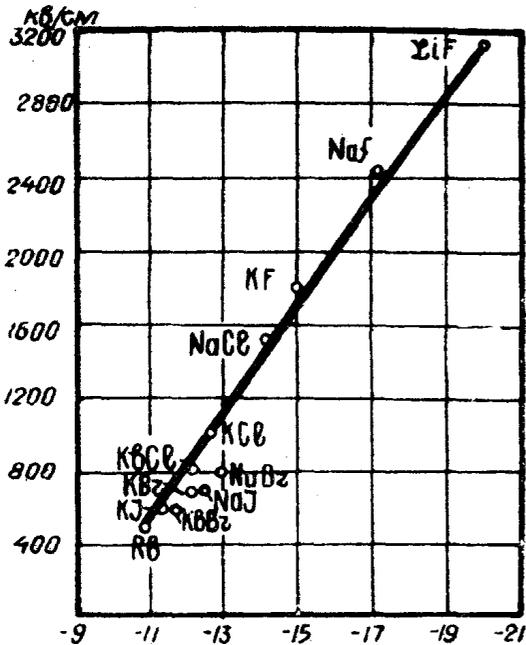


Таблица 1

Энергия решетки кристаллов солей щелочно-галогидного ряда и ее аддитивные составляющие (по Борну и Гейперт-Мейеру) в  $\times 10^{12}$  эрг/молекулу.

| № п.п. | Название вещества | Электростатическая часть $\frac{ae^2}{r_0}$ | Отталкивание $B(r_0)$ | Ван-дер-Ваальсова часть $\frac{e}{r_0^6}$ | Колебательная энергия при абсолютном нуле $\sum \frac{1}{2} h\nu$ | Общая энергия $U$ по уравн. (1) | Электрич. прочн. в мв см |
|--------|-------------------|---|-----------------------|---|---|---------------------------------|--------------------------|
| 1      | LiF               | 19,81                                       | 3,06                  | 0,09                                      | 0,27  | 16,44                           | 3,1                      |
| 2      | NaF               | 17,22                                       | 2,45                  | 0,14                                      | 0,20  | 17,71                           | 2,4                      |
| 3      | KF                | 14,93                                       | 1,95                  | 0,24                                      | 0,15  | 13,06                           | 1,8                      |
| 4      | NaCl              | 14,18                                       | 1,63                  | 0,20                                      | 0,12  | 12,63                           | 1,5                      |
| 5      | KCl               | 12,71                                       | 1,44                  | 0,27                                      | 0,1   | 11,39                           | 1,0                      |
| 6      | RbCl              | 12,20                                       | 1,38                  | 0,32                                      | 0,08  | 11,06                           | 0,8                      |
| 7      | NaBr              | 13,39                                       | 1,43                  | 0,19                                      | 0,10  | 12,05                           | 1,0                      |
| 8      | KBr               | 12,11                                       | 1,29                  | 0,25                                      | 0,08  | 10,99                           | 0,7                      |
| 9      | RbBr              | 11,60                                       | 1,22                  | 0,28                                      | 0,06  | 10,60                           | 0,6                      |
| 10     | NaJ               | 12,35                                       | 1,19                  | 0,22                                      | 0,08  | 11,3                            | 0,8                      |
| 11     | KJ                | 11,30                                       | 1,10                  | 0,26                                      | 0,07  | 10,39                           | 0,6                      |
| 12     | RbJ               | 10,86                                       | 1,07                  | 0,28                                      | 0,05  | 10,02                           | 0,5                      |

Электрическая прочность и электростатическая часть энергии решетки

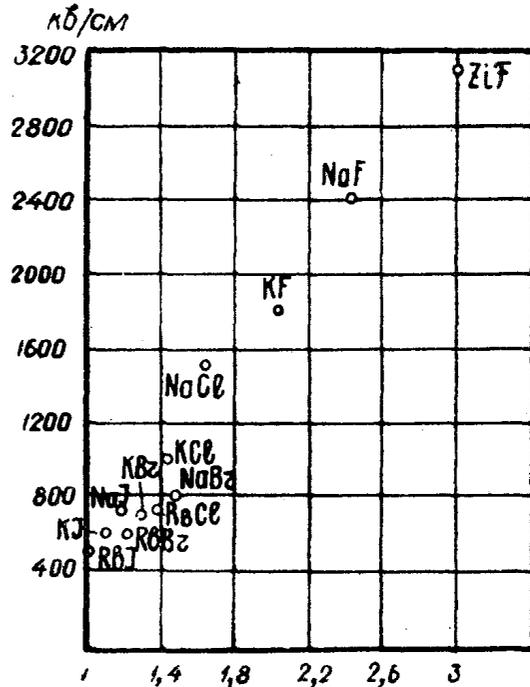


Электростатическая часть энергии решетки

$$U_s = \frac{ae^2}{r_0} \times 10^{12} \frac{\text{эрг}}{\text{молекулу}}$$

Фиг. 1. Зависимость между частью энергии, обусловленной электростатическими силами притяжения, и электрической прочностью для кристаллов щелочно-галогидных солей.

Электрическая прочность и энергия сил отталкивания



Энергия сил отталкивания  $B(r_0)$  в  $10^{12}$  эрг/молекулу

Фиг. 2. Зависимость между частью энергии, обусловленной электростатическими силами отталкивания, и электрической прочностью для кристаллов щелочно-галогидного ряда.

Согласно данным, приведенным на фиг. 1, электрическая прочность ионных кристаллов растет с увеличением потенциальной энергии сил притяжения в решетке. Это возрастание может быть обусловлено как возра-

станием числителя  $z^2 e^2 \alpha$ , так и уменьшением расстояния между ионами, то есть постоянной решетки.

Уравнение прямой на фиг. 1 имеет вид:

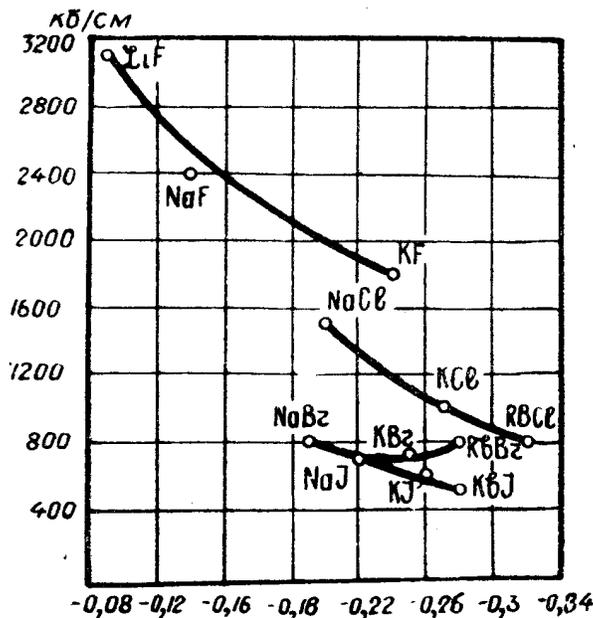
$$E_{пр} = 0,28 U_0 - 2,51,$$

где  $E$  в  $мв/см$  и  $U_0$  — в  $10^{12}$  эрг/молекулу.

Таким образом, чем больше величина энергии, затраченной на образование данной решетки и проявляющейся в части потенциальной энергии, обусловленной силами притяжения ( $-U_0$ ), тем больше и ее электрическая прочность.

На фиг. 2 показано, что с увеличением части потенциальной энергии решетки, обусловленной силами отталкивания, электрическая прочность возрастает. Эта часть решетки достигает 12% у RbJ, а у LiF—20% общей

Электрическая прочность и Ван-дер-Ваальсова часть энергии кристаллической решетки



Ван-дер-Ваальсова часть энергии кристаллической решетки в  $\times 10^{12}$  эрг/молекулу

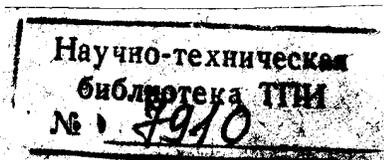
Фиг. 3. Зависимость между электрической прочностью и силами молекулярного сцепления.

энергии решетки. Простейшее выражение для части энергии, обусловленной силами отталкивания, дается в виде  $U_{от} = \frac{N}{2} \frac{p}{r^n}$ , где  $n$ —число

частиц в кристалле,  $p$ —величина, зависящая как от пространственного расположения частиц кристалла его структуры, так и от строения ионов. Возрастание энергии, обусловленной силами отталкивания, определяется уменьшением расстояния между ионами  $r_0$ . Уменьшение расстояния между ионами, то есть постоянной решетки, сопровождается повышением электрической прочности диэлектрика. Чем больше способность данной структуры выдерживать действие силы отталкивания, тем больше и прочность.

Из данных, приведенных на фиг. 3, следует, что электрическая прочность диэлектрика уменьшается с увеличением энергии сил молекулярного сцепления. Ее величина незначительна.

Для LiF она составляет 0,5%, а RbJ—2,8%  $U$ .



Эта часть энергии решетки обусловлена поляризацией ионов. В теории кристаллической решетки она записывается в виде  $\frac{c}{r^6}$ .

Универсальные силы молекулярного сцепления объяснены квантовой механикой на основе существования движения при температуре абсолютного нуля. Энергия сил молекулярного сцепления, по сравнению с внутренней энергией отдельных молекул, всегда мала.

Энергия сил молекулярной связи по квантовой механике двух независимых осцилляторов выражается формулой

$$\Delta W_m = -\frac{c}{r^6} = -\frac{1}{2} h\nu_0 \alpha^2,$$

где  $\frac{h\nu_0}{2}$  означает нулевую энергию несвязанного осциллятора, а  $\alpha$  — поляризуемость отдельного иона с зарядом и квазиупругим коэффициентом  $\alpha$  осциллятора ( $eE = \alpha x$ , где  $x$  — амплитуда колебаний осциллятора). Знак минус в выражении энергии  $\Delta W_m$  означает, что здесь имеет место притяжение.

Таким образом, постоянная  $c$  может быть определена из собственных частот и поляризуемости, связанных соотношением

$$\alpha \nu_0^2 = \frac{e^2}{4\pi^2 m}.$$

Из приведенного рассуждения следует существенный вывод о возрастании сил молекулярного сцепления пропорционально квадрату поляризуемости иона ( $\alpha^2$ ).

С увеличением поляризуемости частиц, образующих решетку, электрическая прочность кристалла быстро уменьшается. В данном случае мы также наблюдаем уменьшение величины электрической прочности диэлектрика вследствие роста поляризуемости при возрастании энергии сил молекулярной связи в решетке.

Уменьшение электрической прочности диэлектрика вследствие увеличения поляризуемости его частиц настолько велико, что перекрывает увеличение электрической прочности при возрастании нулевой энергии, описанное ранее. Это видно также и из следующего условия. Величина  $h\nu_0 = \frac{2}{3} \frac{e^2}{\alpha} \rho$ , где  $\rho$  — среднее расстояние от электрона до ядра. Таким образом получается

$$C = \frac{1}{3} \frac{e^2}{\alpha} \rho^2 \alpha^2 = \frac{1}{3} e^2 \rho^2 \alpha.$$

Между основными составляющими энергии решетки, обусловленными электростатическими силами притяжения и силами отталкивания, с одной стороны, и электрической прочностью, с другой стороны, наблюдается удовлетворительная линейная зависимость.

Выражаю благодарность проф. А. А. Воробьеву за обсуждение затронутых в статье вопросов.