

六角蜂窝晶格的有序结构*

宋庆功¹⁾ 丛选忠²⁾ 张庆军¹⁾ 莫文玲¹⁾ 戴占海¹⁾

¹⁾ 河北理工学院数理系, 唐山 063009

²⁾ 河北唐山师范学院物理系, 唐山 063000

(2000 年 3 月 10 日收到, 2000 年 5 月 2 日收到修改稿)

用密度波理论确定了六角蜂窝晶格的 6 种有序结构类型、7 种完全有序结构. 对钌(Ru)晶体(0001)表面吸附的氧(O)原子形成的有序结构、插层化合物 Na_xTiS_2 中的 Na 离子形成的有序结构给予解释.

关键词: 六角蜂窝晶格, 有序结构, 密度波

PACC: 6830, 6860

1 引 言

近年来低维问题引起了人们的极大兴趣, 随着实验研究的广泛而深入, 已经发现许多材料中存在原子(或离子)的二维有序结构以及有序—无序相变, 这对材料的性能有重要影响. 从理论上确定二维有序结构的形成机制和条件将为材料的制备、研究开发提供依据. 六角蜂窝晶格是晶体材料中较常见的一种二维基本结构. 石墨片层、六方氮化硼片层均为这种结构^[1, 2]; 钌(Ru)晶体和石墨晶体(0001)表面吸附的原子或离子也可形成与之相关的有序结构^[3-6]. 过渡金属二硫族化合物插层化合物(如 Na_xTiS_2)的 van der Waals 间隙中的金属离子也可

形成与之相关的有序结构^[7]. 在 Fullerene 结构中, 其他原子替代碳原子也可形成相关的有序结构. 因此, 对六角蜂窝晶格的有序结构类型的研究具有普遍意义. 本文将用密度波理论确定六角蜂窝晶格的有序结构类型.

2 理论方法

六角蜂窝晶格(如图 1(a)所示)可视为由两套平面三角 Bravais 格子相互套构成的复式格子(如图 1(b)所示). 用 \mathbf{R} 表示原胞格矢, \mathbf{h}_α 表示第 α ($\alpha = 1, 2$)套 Bravais 格子相对原点的位移, 则每一格点的位置可表示为

$$\mathbf{R}_\alpha = \mathbf{R} + \mathbf{h}_\alpha (\alpha = 1, 2). \quad (1)$$

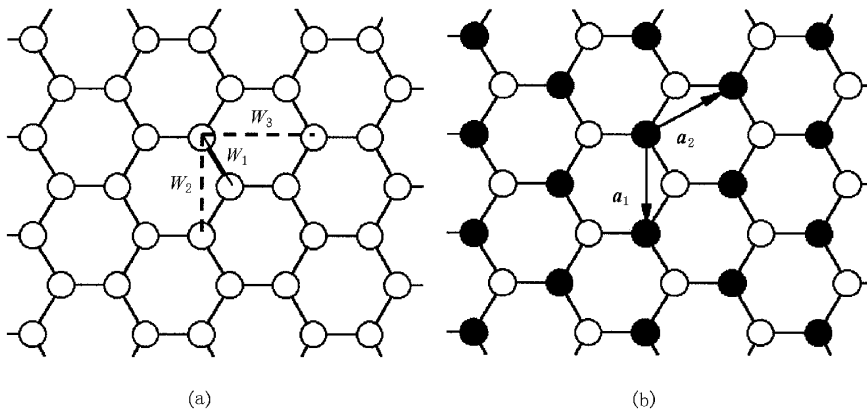


图 1 六角蜂窝晶格及其 Bravais 格子

* 河北省自然科学基金(批准号:197221)资助的课题.

设系统的格点总数为 N , A 和 B 两种离子的数目分别为 N_A 和 N_B , 则 $N_A + N_B = N$, $c = N_A/N$ 为 A 种离子的浓度. $P(\mathbf{R}_\alpha)$ 表示 A 种离子在格点 \mathbf{R}_α 的占据概率, 在完全无序态, $P(\mathbf{R}_\alpha) = c$; 在有序态, $P(\mathbf{R}_\alpha)$ 将偏离 c . 根据密度波理论^[8,9], $P(\mathbf{R}_\alpha)$ 表示为

$$P(\mathbf{R}_\alpha) = c + \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k}} U_{\sigma}(\alpha, \mathbf{k}) Q_{\sigma}(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}), \quad (2)$$

式中 $U_{\sigma}(\alpha, \mathbf{k})$ 是极化矢量, $Q_{\sigma}(\mathbf{k})$ 是密度波振幅. 此二元系统的离子间相互作用 Hamilton 量的本征值为

$$E = U_0 - \frac{N_A}{2} \sum_{\alpha\beta} \sum_{\mathbf{R}} W_{\alpha\beta}(\mathbf{R}) + \frac{N}{2} \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k}} \lambda_{\sigma}(\mathbf{k}) |Q_{\sigma}(\mathbf{k})|^2, \quad (3)$$

式中 U_0 是纯 A 种离子占据和纯 B 种离子占据情况下系统的相互作用能之和, $W_{\alpha\beta}(\mathbf{R} - \mathbf{R}')$ 是相互作用能参数, 它可表示为

$$W_{\alpha\beta}(\mathbf{R} - \mathbf{R}') = W_{AA}^{\alpha\beta}(\mathbf{R} - \mathbf{R}') + W_{BB}^{\alpha\beta}(\mathbf{R} - \mathbf{R}') - 2W_{AB}^{\alpha\beta}(\mathbf{R} - \mathbf{R}'), \quad (4)$$

式中 $W_{\alpha\beta}^{\alpha\beta}(\mathbf{R} - \mathbf{R}')$ (q, r 可取 A 或 B) 表示第 α 套 Bravais 格子 \mathbf{R} 位置上的 q 离子与第 β 套 Bravais 格子 \mathbf{R}' 位置上的 r 离子之间的有效相互作用能之和.

(3) 式中 $\lambda_{\sigma}(\mathbf{k})$ 是 \mathbf{k} 空间相互作用能参数 $V_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ 的本征值. $V_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ 满足

$$V_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{R}} W_{\alpha\beta}(\mathbf{R}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}). \quad (5)$$

$\lambda_{\sigma}(\mathbf{k}), V_{\alpha\beta}(\mathbf{k}), U_{\sigma}(\alpha, \mathbf{k})$ 满足

$$\sum_{\beta} V_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) U_{\sigma}(\beta, \mathbf{k}) = \lambda_{\sigma}(\mathbf{k}) U_{\sigma}(\alpha, \mathbf{k}). \quad (6)$$

最稳定的有序态对应 E 的极小值, 由 (3) 式可知, 这对应 $\lambda_{\sigma}(\mathbf{k})$ 的极小值. 它由 \mathbf{k} 空间 Brillouin 区的高对称点 (\mathbf{k} 星) 和极化矢量 $U_{\sigma}(\alpha, \mathbf{k})$ 决定, 并且不受相互作用能参数 $W_{\alpha\beta}(\mathbf{R})$ 的影响. 考虑到能量的简并和系统在 \mathbf{k} 空间的对称性, 并利用 $Q_{\sigma}(\mathbf{K}_{js}) = \eta_{s\sigma} \gamma_{s\sigma}(j_s)$ (\mathbf{K}_{js} 为 \mathbf{k} 星波矢)^[10], 密度波函数 $P(\mathbf{R}_\alpha)$ 可表示为

$$P(\mathbf{R}_\alpha) = c + \frac{1}{2} \sum_s \sum_{\sigma} \eta_{s\sigma} \sum_{j_s} [\gamma_{s\sigma}(j_s) U_{\sigma}(\alpha, \mathbf{K}_{j_s}) \cdot \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}) + \gamma_{s\sigma}^*(j_s) U_{\sigma}^*(\alpha, \mathbf{K}_{j_s}) \cdot \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R})], \quad (7)$$

式中 s 代表 \mathbf{k} 星, σ 代表能量支, $\eta_{s\sigma}$ 是对应 \mathbf{k} 星 s 和能量支 σ 的长程序参量, $\gamma_{s\sigma}(j_s)$ 是相应的第 j_s 个对

称性参数. 根据 (7) 式可确定最稳定的有序结构类型.

3 有序结构类型的确定

三角晶格基矢及倒格子基矢的选取可参考文献 [11]. 用 W_i 表示第 i 近邻有效相互作用能参数 (如图 1(a) 所示), 仅考虑 $i=3$ 范围内的相互作用, 由 (5) 式可得

$$V_{1\Gamma}(\mathbf{k}) = V_{2\Gamma}(\mathbf{k}) = 2W_2 \{ \cos(2\pi l_1) + \cos(2\pi l_2) + \cos[2\pi(l_1 + l_2)] \}, \quad (8)$$

$$V_{1\Delta}(\mathbf{k}) = V_{2\Delta}(\mathbf{k}) = W_1 \{ 1 + \exp(i2\pi l_1) + \exp[i2\pi(l_1 + l_2)] \} + W_3 \{ 2\cos(2\pi l_2) + \exp[i2\pi(l_1 + l_2)] \}, \quad (9)$$

(8) 和 (9) 式中 l_1, l_2 分别为波矢 \mathbf{k} 的两个分量. 三角 Bravais 格子的 Brillouin 区高对称点 (\mathbf{k} 星) 对应的不等效有序波矢分别为

$$\Gamma \text{ 星 } (0, 0); M \text{ 星 } (1/3, 1/3);$$

$$X \text{ 星 } (1/2, 0), (0, -1/2), (-1/2, 1/2).$$

据此, 可确定有序结构类型如下:

3.1 $\lambda_{\sigma}(\mathbf{k})$ 在 Γ 星取极小值

将波矢 $(0, 0)$ 代入 (8) 和 (9) 式, 得到 $V_{\alpha\beta}(0, 0)$ ($\alpha, \beta = 1, 2$). 求解方程 (6), 得到本征值和极化矢量

$$\lambda_{1\Gamma}(\Gamma) = 6W_2 - 3(W_1 + W_3), U_1 = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad (10)$$

$$\lambda_{2\Gamma}(\Gamma) = 6W_2 + 3(W_1 + W_3), U_2 = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (11)$$

$\lambda_{1\Gamma}(\Gamma)$ 和 $\lambda_{2\Gamma}(\Gamma)$ 均可作为极小值. 在 $W_1 + W_3 > 0$ 条件下, $\lambda_{1\Gamma}(\Gamma) < \lambda_{2\Gamma}(\Gamma)$, $\lambda_{1\Gamma}(\Gamma)$ 使 E 为极小值, 可得到与之对应的密度波函数为

$$P(\mathbf{R}_1) = c + \frac{\sqrt{2}}{2} \eta_{\Gamma 1} \gamma_{\Gamma 1}, \quad (12)$$

$$P(\mathbf{R}_2) = c - \frac{\sqrt{2}}{2} \eta_{\Gamma 1} \gamma_{\Gamma 1}. \quad (13)$$

这给出 A (或 B) 离子在两套 Bravais 格子上有不同的占据概率. 在完全有序条件下, $\eta_{\Gamma 1} = 1$, $P(\mathbf{R}_\alpha) = 1$ 或 0 , 可得到 $c = 1/2$, $\gamma_{\Gamma 1} = \sqrt{2}/2$. 第一套 Bravais 格子完全被 A 离子占据, 另一套格子完全被 B 离子占据, 如图 2(a) 所示. 这种有序结构类型属于复式三角晶格, 原胞为 $a_0 \times a_0$.

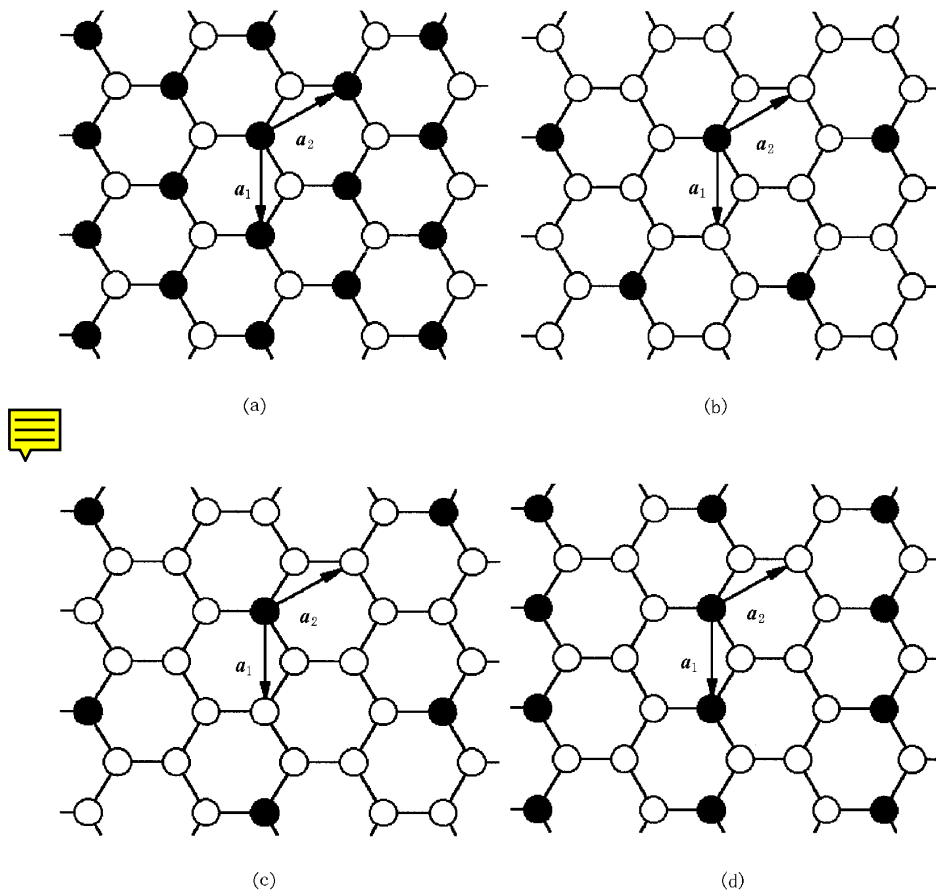


图2 六角蜂窝晶格的有序结构(1)

(a) $2a_0 \times a_0$ 有序结构 ;(b) $\sqrt{3}a_0 \times \sqrt{3}a_0$ 有序结构 ;(c) $2a_0 \times 2a_0$ 有序结构 ;(d) $\sqrt{3}a_0 \times a_0$ 有序结构

在钌(Ru)石墨晶体表面吸附的原子或原子有序化、插层化合物的插层金属离子有序化等问题中,与 A、B 两种粒子对应的多是离子(或原子)和空位,而离子的浓度 c 往往小于 $1/2$. 此情况下 $\lambda_1(\Gamma)$ 为极小值也不能使 A、B 两种粒子完全有序排列,但能保证这两套 Bravais 格子的不等效性. 据此,可以考虑第一套格子被离子和空位以一定概率占据,第二套格子优先被空位完全占据并可保持不动. 在完全有序条件下,离子和空位将在第一套三角 Bravais 格子上发生二次有序化^[12]. 仅考虑 k 空间 Brillouin 区的高对称点 M 星和 X 星对应的有序波矢,我们确定了三角晶格的三种有序结构^[11]. 将这些结果用到六角蜂窝晶格上,给出如图 2(b)(c)(d) 所示的三种有序结构,它们对应的原胞分别为 $\sqrt{3}a_0 \times \sqrt{3}a_0$, $2a_0 \times 2a_0$, $\sqrt{3}a_0 \times a_0$, 离子浓度 c 分别为 $1/6$, $1/8$, $1/4$.

如果 $W_1 + W_3 < 0$, $\lambda_2(\Gamma) < \lambda_1(\Gamma)$, $\lambda_2(\Gamma)$ 使 E 为极小值,两套 Bravais 格子等效, A (或 B) 离子在两套 Bravais 格子上有相同的占据概率,不能形成有

序结构,如图 1(a) 所示.

3.2 $\lambda_\sigma(k)$ 在 M 星取极小值

由波矢 $(1/3, 1/3)$ 代入(8)和(9)式,得到 $V_{\alpha\beta}(1/3, 1/3) (\alpha, \beta = 1, 2)$. 求解方程(6),得到本征值和极化矢量

$$\lambda_1(M) = -3W_2, U_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (14)$$

$$\lambda_2(M) = -3W_2, U_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (15)$$

与(14)式相应的密度波函数为

$$P(\mathbf{R}_1) = c + \eta_{MI} \gamma_{MI} \cos\left[\frac{2\pi}{3}(n_1 + n_2)\right] \quad (16)$$

$$P(\mathbf{R}_2) = c. \quad (17)$$

此情况下 A 离子在第一套 Bravais 格子上有序排列,在第二套 Bravais 格子上随机排列,如图 3(a) 所示. 这种有序结构类型属于复式三角晶格,原胞为 $\sqrt{3}a_0 \times \sqrt{3}a_0$.

3.3 $\lambda_\sigma(k)$ 在 X 星取极小值

同理,可得到本征值和极化矢量

$$\lambda_1(X) = -2W_2 - (-W_1 + 3W_3), U_1 = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (18)$$

$$\lambda_2(X) = -2W_2 + (-W_1 + 3W_3), U_2 = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (19)$$

(1) 当 $-W_1 + 3W_3 > 0$ 时, $\lambda_1(X)$ 使 E 为极小值. 对对称性参数 $\gamma_{X1}(1)$, $\gamma_{X1}(2)$ 和 $\gamma_{X1}(3)$ 的不同选取可有两种情况:

(a) $\gamma_{X1}(1) = \gamma_{X1}(2) = \gamma_{X1}(3) = \gamma_{X1} \neq 0$. 密度波函数为

$$P(\mathbf{R}_1) = c + \frac{\sqrt{2}}{2} \eta_{X1} \gamma_{X1} [\cos n_1 \pi + \cos n_2 \pi + \cos(n_1 - n_2)\pi], \quad (20)$$

$$P(\mathbf{R}_2) = c - \frac{\sqrt{2}}{2} \eta_{X1} \gamma_{X1} [\cos n_1 \pi + \cos n_2 \pi + \cos(n_1 - n_2)\pi], \quad (21)$$

这一密度波函数确定的有序结构类型如图 3(b) 所示, 它的 Bravais 格子仍属于三角晶格, 原胞为 $2a_0 \times 2a_0$.

(b) $\gamma_{X1}(1) = \gamma_{X1} \neq 0$, $\gamma_{X1}(2) = \gamma_{X1}(3) = 0$. 密度波函数为

$$P(\mathbf{R}_1) = c + \frac{\sqrt{2}}{2} \eta_{X1} \gamma_{X1} \cos n_1 \pi, \quad (22)$$

$$P(\mathbf{R}_2) = c - \frac{\sqrt{2}}{2} \eta_{X1} \gamma_{X1} \cos n_1 \pi. \quad (23)$$

这一密度波函数确定的有序结构类型如图 3(c) 所示, 它的 Bravais 格子属于正交晶格, 原胞为 $\sqrt{3}a_0 \times a_0$, 离子浓度 $c = 1/2$.

(2) 当 $-W_1 + 3W_3 < 0$ 时, $\lambda_2(X)$ 使 E 为极小值. 同样, 对对称性参数 $\gamma_{X2}(1)$, $\gamma_{X2}(2)$ 和 $\gamma_{X2}(3)$ 的不同选取可有两种情况:

(a) $\gamma_{X2}(1) = \gamma_{X2}(2) = \gamma_{X2}(3) = \gamma_{X2} \neq 0$. 密度波函数为

$$P(\mathbf{R}_1) = P(\mathbf{R}_2) = c + \frac{\sqrt{2}}{2} \eta_{X2} \gamma_{X2} [\cos n_1 \pi + \cos n_2 \pi + \cos(n_1 - n_2)\pi]. \quad (24)$$

这一密度波函数确定的有序结构类型如图 3(d) 所示, 它的 Bravais 格子仍属于三角晶格, 原胞为 $2a_0 \times 2a_0$, 离子浓度 $c = 1/4$.

(b) $\gamma_{X2}(1) = \gamma_{X2} \neq 0$, $\gamma_{X2}(2) = \gamma_{X2}(3) = 0$. 密度波函数为

$$P(\mathbf{R}_1) = P(\mathbf{R}_2) = c + \frac{\sqrt{2}}{2} \eta_{X2} \gamma_{X2} \cos n_1 \pi. \quad (25)$$

这一密度波函数确定的有序结构类型如图 3(e) 所示, 它的 Bravais 格子属于正交晶格, 原胞为 $\sqrt{3}a_0 \times a_0$, 离子浓度 $c = 1/2$.

以上由 Brillouin 区高对称点 (k 星) 对应的有序波矢, 根据密度波理论分别确定了 6 种有序结构类型, 如图 2(a) 2(a) 3(a) 3(b) 3(c) 3(d) 3(e) 所示. 考虑 Γ 星为极值点情况下的二次有序化, 共给出 7 种可能的完全有序结构, 如图 2(a) 2(b) 2(c) 2(d) 2(c) 2(d) 2(e) 所示, 它们分别对应离子浓度 $c = 1/2, 1/6, 1/8, 1/4, 1/2, 1/4, 1/2$.

4 分析与讨论

近年来, 人们已经发现许多材料中存在六角蜂窝结构或与之相关的有序结构以及相关的有序—无序相变. 根据本文中确定的有序结构类型可对其中一些典型的结构给出较好的解释.

众所周知, 石墨片层、六方氮化硼片层的结构均与图 2(a) 所示的 $a_0 \times a_0$ 有序结构相同. 最近, Stampfl 等^{3]}, He 等^{4,5]} 在 Ru(0001) 表面吸附 O 原子得到的 $a_0 \times a_0$ 结构也与图 2(a) 相同. 这种有序结构的形成表明两套三角 Bravais 格子不等价, 这对应 $\lambda_1(\Gamma)$ 为极小值且小于 0. 在忽略高阶近邻相互作用能参数的情况下, $\lambda_1 = 6W_2 - 3(W_1 + W_3)$, 因而有 $W_1 + W_3 > 2W_2$. 这给出了 A, B 两种离子按 AB($c = 1/2$) 形式结合成六角蜂窝结构时, 相互作用能参数之间的基本关系.

在离子浓度 c 偏离 $1/2$ 的情况下, 不能形成图 2(a) 所示有序结构. 根据二次有序化理论, 我们得到 3 种有序结构, 实验上已经发现这些有序结构. 例如, Mitchell 等^{6]} 对 Ru 晶体(0001) 表面吸附的 O 原子层的结构进行研究, 得到稳定的 $2a_0 \times 2a_0$ 有序结构和 $2a_0 \times a_0$ 有序结构(与 $\sqrt{3}a_0 \times a_0$ 有序结构等效), 它们分别与图 2(c) 和 (d) 所示的有序结构一致. O 原子在 Ru 晶体(0001) 表面只占据间隙位, 这些间隙位构成六角蜂窝晶格, 当满足条件 $W_1 + W_3 > 2W_2$, 并且浓度 $c = 1/2$ (对应覆盖度 $\theta_0 = 1$) 时, 形成 $a_0 \times a_0$ 结构; 浓度 $c = 1/4$ (对应覆盖度 $\theta_0 = 0.5$) 时, 形成 $2a_0 \times a_0$ 结构; 浓度 $c = 1/8$ (对应覆盖度

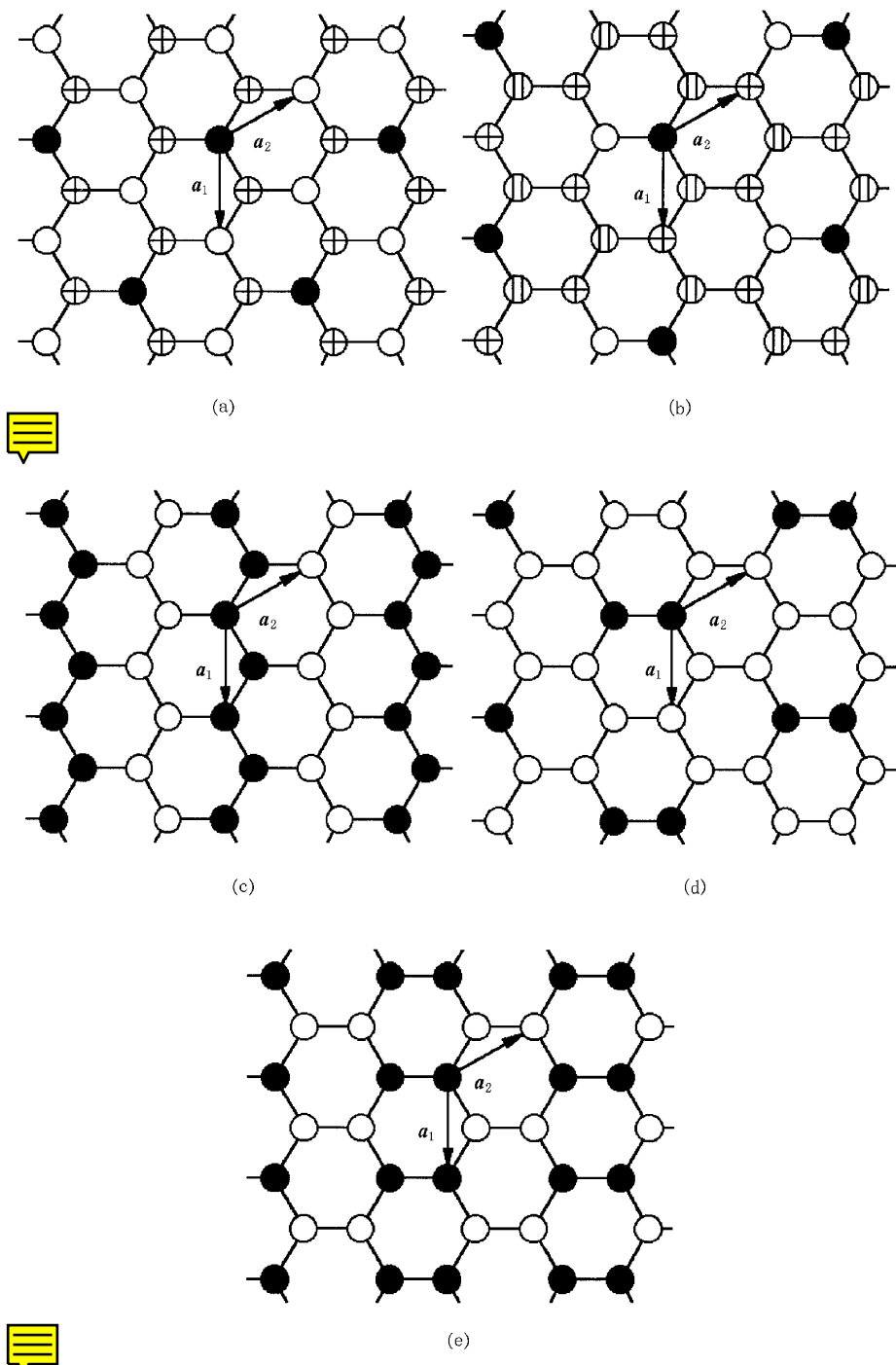


图3 六角蜂窝晶格的有序结构(2)

(a) $\sqrt{3}a_0 \times \sqrt{3}a_0$ 有序结构 ; (b) $2a_0 \times 2a_0$ 有序结构 ; (c) $\sqrt{3}a_0 \times a_0$ 有序结构 ; (d) $2a_0 \times 2a_0$ 有序结构 ;
 (e) $\sqrt{3}a_0 \times a_0$ 有序结构

$\theta_0 = 0.25$ 时 形成 $2a_0 \times 2a_0$ 结构.

再如 , 由于 Na_xTiS_2 晶体具有阶梯结构和多型特点 , 只能确定其可能的结构和离子浓度范围 , Hibma^[7]对 Na_xTiS_2 晶体样品进行 X 射线结构分析 , 发现 , 在 $0.07 \leq x \leq 0.216$ (对 3 阶样品 , $x = 1/9$ 相应

于 $c = 1/6$) 范围内 , 有 $\sqrt{3}a_0 \times \sqrt{3}a_0$ 有序结构形成 , 与图 2(b) 一致 . 在 $0.07 \leq x \leq 0.200$ (对 2 阶样品 , $x = 1/8$ 相应于 $c = 1/8$) 和 $0.652 \leq x \leq 0.762$ (对 1 阶样品 , $x = 3/4$ 相应于 $c = 7/8$) 范围内 , 有 $2a_0 \times 2a_0$ 有序结构形成 , 与图 2(c) 一致 .

本文确定的各种有序结构在理论上是可能的,但在具体材料上不一定均能实现.不同材料呈现不同的晶体结构,恰恰表明材料中粒子间相互作用能参数的不同.再者,对由两种粒子构成的二元系统,相互作用能参数也与具体的粒子浓度有关.众所周知,材料的结构对其性能有重要影响.从理论上确定材料结构的形成机制和条件(如相互作用能参数等)将为材料的制备、研究开发提供依据,密度波理论为此提供了很好的范例.当然,要从理论上确定具体材料的结构还有大量的工作要做.

- [1] D. Fristot, A. Charlier, M. F. Charlier, L. Lang, S. Doyen-Lang, *J. Phys.: Condens. Matter*, **3** (1991), 5323.
- [2] Wei-xin Xu, Wen-long Xue, *Technology of Advanced Ceramics* (Shanghai Jiaotong University Press, 1989) [in Chinese] 徐维新、薛文龙(编译), *精细陶瓷技术* (上海交通大学出版社, 1989).
- [3] C. Stampfl, S. Schwegmann, H. Over, M. Scheffler, G. Ertl, *Phys. Rev. Lett.*, **77** (1996), 3371.
- [4] P. He, K. Jacobi, *Phys. Rev.*, **B55** (1997), 4751.
- [5] Pi-mo He, K. Jacobi, *Acta Physica Sinica*, **48** (1999), 248 [in Chinese] 何丕模, K. Jacobi, *物理学报*, **48** (1999), 284.
- [6] W. J. Mitchell, Y. Wang, M. Schick, W. H. Weinberg, *J. Chem. Phys.*, **102** (1995), 8185.
- [7] T. Hibma, *Physica*, **99B** (1980), 136.
- [8] Bing-lin Gu, Zhi-feng Huang, Jun Ni *et al.*, *Phys. Rev.*, **B51** (1995), 7104.
- [9] Bing-lin Gu, Qing-gong Song, Jun Ni, *J. Appl. Phys.*, **85** (1999), 819.
- [10] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, *Statistical Physics* (3rd ed), Part I (Pergamon Press, Oxford, 1980), 419.
- [11] Qing-gong Song, Jing-nan Liu, Bing-lin Gu, *Science in China (A)*, **36** (2) (1993), 191.
- [12] A. G. Khachaturyan, *Theory of Structural Transformations in Solids* (Wiley, New York, 1983).

ORDERED STRUCTURES OF HEXAGONAL HONEYCOMB LATTICE*

SONG QING-GONG¹⁾ CONG XUAN-ZHONG²⁾ ZHANG QING-JUN¹⁾

MO WEN-LING¹⁾ DAI ZHAN-HAI¹⁾

¹⁾ Department of Mathematics and Physics, Hebei Institute of Technology, Tangshan 063009, China

²⁾ Department of Physics, Hebei Tangshan Normal Institute, Tangshan 063000, China

(Received 10 March 2000; revised manuscript received 2 May 2000)

ABSTRACT

In this paper we determined 6 ordered structure types and 7 perfect ordered structures of hexagonal honeycomb lattice by using concentration-wave theory. And we proposed an explanation for the ordered structures of O atoms absorbed by (0001) surfaces of Ru crystal and Na ions in intercalation compound Na_xTiS_2 .

Keywords: hexagonal honeycomb lattice, ordered structure, concentration-wave

PACC: 6830, 6860