

式中

$$a_4 = b^2, \quad a_5 = a_{5a} = a_{5\beta} = \frac{2 + \sqrt{3}}{4} b^2, \quad a_6 = \frac{\sqrt{3}}{2} b^2, \quad (5)$$

b 是格点间的距离.

由 (3), (4), (5) 式可得

$$\frac{A}{N} = \left[\frac{(2 - \sqrt{3})(x + 2y)}{4} + \frac{\sqrt{3}}{2} \right] b^2. \quad (6)$$

二、Gibbs 函 数

对二维系统, Gibbs 函数可以写为

$$G = U - TS + PA, \quad (7)$$

式中 U 是系统的内能; S 是熵; A 是二维系统的“体积”, 即总面积; P 是“压强”, 具有单位长度的力的量纲. 我们假设相互吸引势只发生在最近邻的两个原子之间, 并且都等于 $-\epsilon$, 若考虑到原子间的相互作用是成对的, 则晶格的势能 E 由下式给出:

$$\begin{aligned} \frac{E}{Nk_B T} &= - \frac{\epsilon}{2k_B T} [4n_4 + 5(n_{5a} + n_{5\beta}) + 6n_6] \\ &= - \frac{\epsilon}{2k_B T} [6 - (x + 2y)]. \end{aligned} \quad (8)$$

如果考虑到原子在格点周围的运动, 则

$$\frac{U}{Nk_B T} = - \frac{\epsilon}{2k_B T} [6 - (x + 2y)] + 1. \quad (9)$$

熵的贡献来自两部分, 其一是四种原子在一个平面内的排列的可能方式数; 其二是在格点附近的原子振动, 即

$$S = S_{\text{config}} + S_{\text{vib}}. \quad (10)$$

为了求得 S_{config} , 必须计算在一个平面内四种原子排列的可能方式数 W_1 ,

$$\begin{aligned} W_1 &= \frac{N!}{N_4! N_{5a}! N_{5\beta}! N_6!} \cdot (n_4 + n_{5a})^{(4N_4 + N_{5a})/2} \cdot (n_{5a} + n_{5\beta})^{(2N_{5a} + 4N_{5\beta})/2} \\ &\quad \cdot (n_4 + n_{5a} + n_{5\beta})^{(2N_{5a} + 2N_{5\beta} + 4N_4)/2} \cdot (n_{5a} + n_{5\beta} + n_6)^{(6N_6 + 2N_{5a} + N_{5\beta})/2}, \end{aligned} \quad (11)$$

式中 $N!/(N_4! N_{5a}! N_{5\beta}! N_6!)$ 是四种原子完全杂乱排列的方式数, 其余四个因子是考虑到把各种原子的最近邻及次近邻的格点分成 A, B, C, D 四类以后, 由于几何约束性所作的修正.

$$S_{\text{config}} = k_B \ln W_1.$$

利用 (3) 式及 Stirling 公式, 可得

$$\begin{aligned} \frac{S_{\text{config}}}{Nk_B} &= -y \ln y - mx \ln(mx) - (1-m)x \ln[(1-m)x] \\ &\quad - [1 - (x + y)] \ln[1 - (x + y)] + \frac{1}{2} (4y + mx) \ln(y + mx) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + (2-m)x \ln x + (x+2y) \ln(x+y) \\
 & + \frac{1}{2} [6 + (m-5)x - 6y] \ln(1-y).
 \end{aligned} \quad (12)$$

利用自由体积理论^[4-6] 可以算得原子的平均自由面积. 设 v_r 是 r -原子的自由面积, σ 为硬盘的直径, 并令

$$\alpha = \frac{b}{\sigma} - 1. \quad (13)$$

当 α 很小时,

$$v_4 \cong 4\alpha^2\sigma^2, \quad v_5 \cong (2 + \sqrt{3})\alpha^2\sigma^2, \quad v_6 \cong 2\sqrt{3}\alpha^2\sigma^2. \quad (14)$$

于是, 平均自由面积 $\bar{v}$ 为

$$\bar{v} = 2\sqrt{3}\alpha^2\sigma^2[1 + c(x+2y)], \quad (15)$$

$$\text{式中 } c = \frac{2\sqrt{3}-3}{6}.$$

因此

$$\begin{aligned}
 \frac{S_{\text{vib}}}{Nk_B} &= \ln \left[\left(\frac{2\pi M K_B T}{h^2} \right) \bar{v} \right] + 1 \\
 &= \ln(2\pi M k_B T / h^2) + \ln(2\sqrt{3}\alpha^2\sigma^2) \\
 &\quad + \ln[1 + c(x+2y)] + 1.
 \end{aligned} \quad (16)$$

当系统全部由正三角形作密堆积时, 总面积 A_0 为

$$A_0 = \frac{\sqrt{3}}{2} \sigma^2 N. \quad (17)$$

由 (6) 式得

$$\frac{A}{A_0} = [1 + c(x+2y)](1+\alpha)^2. \quad (18)$$

因此, PA 项可写为

$$\frac{PA}{Nk_B T} = \frac{PA_0}{Nk_B T} [1 + c(x+2y)](1+\alpha)^2. \quad (19)$$

利用 (7), (9), (12), (16), (19) 式立刻可以得到系统的 Gibbs 函数 G 的表达式如下:

$$\begin{aligned}
 \frac{G}{Nk_B T} &= y \ln y + mx \ln(mx) + (1-m)x \ln[(1-m)x] \\
 &\quad + [1 - (x+y)] \ln[1 - (x+y)] - \frac{1}{2} (4y + mx) \ln(y + mx) \\
 &\quad - (2-m)x \ln x - (x+2y) \ln(x+y) \\
 &\quad - \frac{1}{2} [6 + (m-5)x - 6y] \ln(1-y) \\
 &\quad - \ln(2\sqrt{3}\alpha^2\sigma^2) - \ln[1 + c(x+2y)] \\
 &\quad - \frac{\varepsilon}{2k_B T} [6 - (x+2y)]
 \end{aligned}$$

$$-\ln\left(\frac{2\pi M k_B T}{h^2}\right) + \frac{PA_0}{Nk_B T} [1 + c(x+2y)](1+\alpha)^2. \quad (20)$$

由 $\frac{\partial}{\partial m}\left(\frac{G}{Nk_B T}\right) = 0$ 以及 $\frac{\partial}{\partial \alpha}\left(\frac{G}{Nk_B T}\right) = 0$ 的条件, 可得

$$\ln \frac{mx}{(1-m)\sqrt{(y+mx)(1-y)}} = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{3y}{y+mx}\right), \quad (21)$$

$$\alpha = \frac{1}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{4Nk_B T}{PA_0} [1 + c(x+2y)]^{-1}} - 1 \right). \quad (22)$$

对于给定的某一个 y 值, m 与 x 的关系以及 α 与 x 的关系可以由 (21), (22) 两式得到.

为了研究 $G/(Nk_B T)$ 对 x 和 y 的依赖关系, 我们引进一个新函数 $g(x, y)$, 使得它与 $G/Nk_B T$ 对 x 和 y 的依赖性是不同的, 并且假定 $x=0$ 时, $g(x, y)|_{x=0} = 0$.

$$\begin{aligned} g(x, y) = & mx \ln(mx) + (1-m)x \ln[(1-m)x] \\ & + [1-(x+y)] \ln[1-(x+y)] \\ & - \frac{1}{2} (4y+mx) \ln(y+mx) - (2-m)x \ln x - (x+2y) \ln(x+y) \\ & - \frac{1}{2} (m-5)x \ln(1-y) - \ln \left[\frac{1+c(x+2y)}{1+2cy} \right] - 2 \ln \left[\frac{\alpha(x)}{\alpha(0)} \right] \\ & - (1-y) \ln(1-y) + 4y \ln y + \frac{\varepsilon}{2k_B T} \cdot x \\ & + \frac{PA_0}{Nk_B T} \{ [1+\alpha(x)]^2 [1+c(x+2y)] - [1+\alpha(0)]^2 (1+2cy) \}. \end{aligned} \quad (23)$$

下面来讨论 4-原子的存在对相变点位置的影响. 为此, 我们取 $(PA_0/Nk_B T)$ 为某一个定值 (例如 $PA_0/Nk_B T = 6.90$). 由 (23) 式可见, 如果再取 y 为某一个数值 (例如 $y = 0.01$), 那么计算结果表明, 只要选择适当的 $(k_B T/\varepsilon)$ 值, 便可以得到唯一的一条 $g(x)$ 与 x 的关系曲线, 这条曲线, 在 $x=x^*$ 处, 恰好同时满足 $g(x)|_{x=x^*} = 0$ 以及

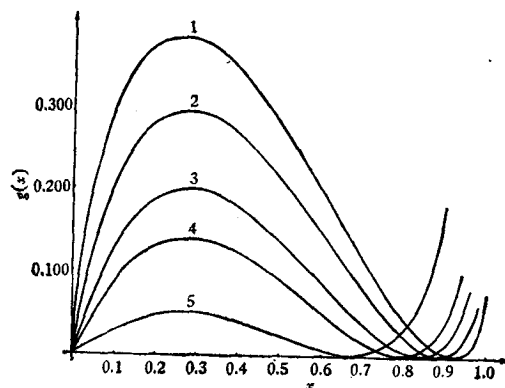


图 2 当 $PA_0/Nk_B T = 6.90$ 时, $g(x)$ 与 x 的关系图

- | | | |
|------------------|------------------------------------|--------------------|
| 1 为 $y = 0$, | $k_B T/\varepsilon \cong \infty$, | $x^* \cong 0.92$; |
| 2 为 $y = 0.01$, | $k_B T/\varepsilon \cong 2.4718$, | $x^* \cong 0.89$; |
| 3 为 $y = 0.03$, | $k_B T/\varepsilon \cong 1.0590$, | $x^* \cong 0.84$; |
| 4 为 $y = 0.05$, | $k_B T/\varepsilon \cong 0.7223$, | $x^* \cong 0.80$; |
| 5 为 $y = 0.10$, | $k_B T/\varepsilon \cong 0.4337$, | $x^* \cong 0.67$ |

$g'(x)|_{x=x^*} = 0$. 由于 $x = 0$ 相应于固相, 而 $x = x^* \approx 0$ 相应于液相, 因此 $x = x^*$ 是固、液两相的 Gibbs 函数相等的点, 也就代表固-液相变点的位置. 计算结果还表明, 若 $PA_0/Nk_B T$ 保持不变, 则 x^* 值与 y 有关, 见图 2.

三、物态方程和热容量

由 (18) 式和 (22) 式, 可得

$$\frac{PA_0}{Nk_B T} = \frac{A_0}{A} \left\{ 1 - \sqrt{[1 + c(x + 2y)] \frac{A_0}{A}} \right\}^{-1}. \quad (24)$$

此式便是系统的物态方程.

由 (24) 式可以得到图 3. 图 3 中的曲线 1, 3, 2 分别表示 6-原子固态 ($x = 0, y = 0$); 4-原子固态 ($x = 0, y = 1$) 以及 5-原子液态 ($x = 1, y = 0$) 的 P, T, A 之间的关系.

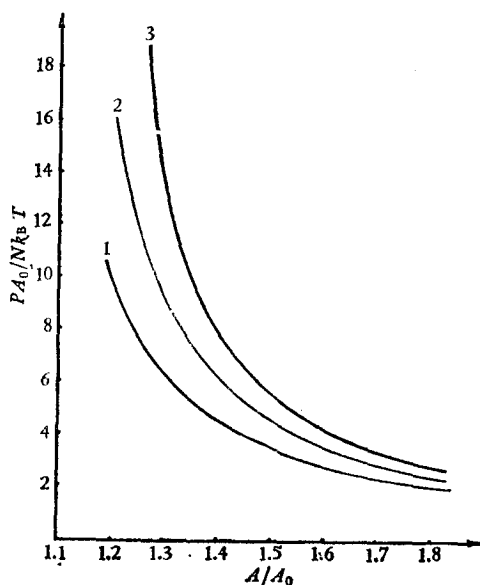


图 3 系统的物态方程

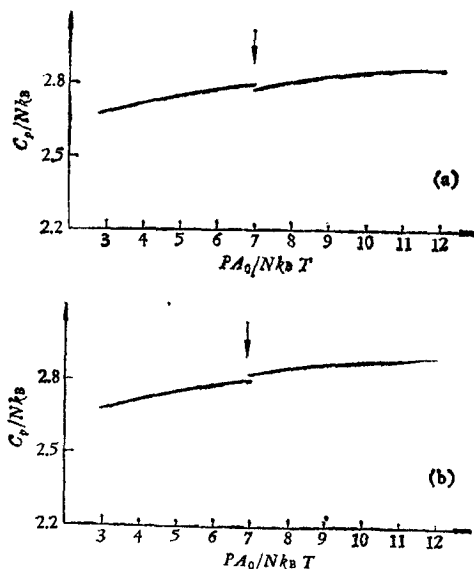


图 4 定压热容量, 箭头指出相变点的位置

(a) 表示当 $x = 0, y = 0$ 以及 $x \approx 0$ 时的情况;
(b) 表示当 $x = 0, y = 1$ 以及 $x \approx 0$ 时的情况

下面研究系统的定压热容量 C_p . 考虑到

$$\frac{C_p}{Nk_B} = T \frac{d}{dT} \left(\frac{S}{Nk_B} \right)_P. \quad (25)$$

并利用下列关系式:

$$T \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right) = P \left(\frac{\partial A}{\partial x} \right), \quad T \left(\frac{\partial S}{\partial y} \right) = P \left(\frac{\partial A}{\partial y} \right), \quad T \left(\frac{\partial S}{\partial \alpha} \right) = P \left(\frac{\partial A}{\partial \alpha} \right), \quad \left(\frac{\partial S}{\partial m} \right) = 0, \quad (26)$$

则得

$$\frac{C_p}{Nk_B} = [1 + c(x + 2y)](1 + \alpha)^2 \frac{\partial x}{\partial T} + 2c(1 + \alpha)^2 \frac{\partial y}{\partial T}$$

$$+ 2(1 + \alpha)[1 + c(x + 2y)] \frac{\partial \alpha}{\partial i} + 1, \quad (27)$$

式中

$$i = \frac{Nk_B T}{PA_0}. \quad (28)$$

(27) 式中所表示的 C_p/Nk_B 和 PA_0/Nk_B 之间的关系, 如图 4 所示. 由图 4 可知, 在相变点, C_p/Nk_B 的变化很小, 大约为 0.01.

四、结 论

以上的讨论表明, 对于二维硬盘系统, 如果进一步考虑 4-原子和引力势的存在, 则系统的相变仍然存在, 且相变点的位置(即 x^*)随着 4-原子所占百分数的增加而向 x^* 减小的方向移动; 在相变点, 定压比热的变化仍约 0.01; 系统的物态方程也将与 4-原子的所占百分数有关.

在本文中, 我们没有考虑空格点. 可以预见, 引进空格点后可能会出现固、液、气三相, 有关这些, 我们将在另外的文章中去讨论. 对于三维情况, 由于多面体的几何约束比较复杂, 熵的计算方法或许应重新考虑, 因此对它的研究尚有较大的困难.

参 考 文 献

- [1] H. Kawamura, *Prog. Theor. Phys.*, 61(1979), 1584
- [2] R. Collins, *Proc. Phys. Soc.*, 83(1964), 553.
- [3] J. D. Bernal, *Proc. Roy. Soc. A*, 280(1964), 299.
- [4] J. E. Lennard-Jones and A. F. Devonshire, *Proc. Roy. Soc. A* 163(1937), 63; 165(1938), 1.
- [5] L. G. Caron, *J. Chem. Phys.* 55(1971), 5227.
- [6] T. Ichimura, N. Ogita and A. Ueda, *J. Phys. Soc. Japan.*, 45(1978), 252.

THE THERMODYNAMIC PROPERTIES OF TWO-DIMENSIONAL SYSTEM

DU YI-JING CHEN LI-RONG YAN ZU-TONG

(Anhui Normal University, Wuhu)

ABSTRACT

H. Kawamura studied the solid-fluid phase transition of a two-dimensional hard disk system by using the Collins' model, but the 4 co-ordination was neglected. In this paper, we have taken into account the 4 co-ordination and the attractive interaction. The thermodynamic functions of the two-dimensional system are calculated. The dependence of the transition point on the percentage of 4 co-ordination is studied. The equation of state and specific heat are discussed.

正电子在铝中湮没 γ 射线能量的精密测量

王蕴玉 张天保 唐孝威

(中国科学院高能物理研究所)

1981 年 6 月 24 日收到

提 要

用 Ge(Li) 探测器测量正电子在两种不同来源的铝样品中的湮没辐射,以 ^{181}Hf 的 482 keV γ 峰做为基准,重复测定湮没峰与基准峰的相对位置,精密度达到 $\pm 6\text{ eV}$. 结果表明,在两种铝样品中的电子静止质量在 10 eV 水平上是一致的.

低能正电子在物质中慢化至热能,与电子发生湮没,放出两个能量为 511 keV 的光子. 当 γ 射线能量测量精密度达到 10 eV 水平时,必须考虑湮没正、负电子的动能和位能. 湮没 γ 射线的能量

$$E_{\gamma} = \frac{1}{2} (m_{e+}c^2 + m_{e-}c^2 + K_e + U_e + K_p + U_p),$$

式中 m_{e+} 和 m_{e-} 为正、负电子的静止质量; K_e , U_e 为电子的动能和位能; K_p , U_p 是正电子的动能和位能^[1]. 利用高分辨率的 Ge(Li) γ 谱仪精确测定湮没 γ 射线的能量,有可能成为研究凝聚态物质电子结合能的一种手段.

本工作选用高纯铝样品,对正电子在铝中湮没 γ 射线的能量进行精密测量. 用体积为 138 cm³ 的同轴型 Ge(Li) 谱仪做为探测器,它对 482 keV 的单能峰的分辨率 (FWHM) 为 1.45 keV. 将强度约 7 μCi 的 ^{22}Na 正电子源夹在相同的两片样品中间,置于距探测器 15 cm 处进行测量. 为了克服测量过程中谱仪零点漂移造成峰位置的改变,在测量湮没 γ 能峰的同时,测量 ^{181}Hf 放出的 482 keV γ 射线做为基准. ^{181}Hf 源强约 7 μCi . 测量时,将 ^{181}Hf 源放在待测样品的旁边,调节它的位置使两个峰的面积大致相当. 单次测量累积计数到 1.4×10^6 . 对谱仪进行了刻度,实验值是 105 eV/道.

实验测量了两种高纯铝样品 (同一型号的国产 AD-1 和苏联产 AD-1). 以前有人用角关联方法对正电子在金属铝中的湮没 γ 射线做过较详细的研究,得知正电子主要与传导电子发生湮没,抛物线成分比高斯成分大六倍^[2]. 本工作直接比较正电子在这两种铝样品中湮没 γ 射线的能量,因而不必对正、负电子的动能和位能进行校正,并且可以避免对湮没 γ 能峰做解谱.

实验使用的两种铝样品均经 600°C 退火,表面经过电解抛光. 样品厚度 1—2 mm.

数据分析由一台在线的 PDP11-04 计算机完成. 由于湮没能峰主要是倒抛物线形状,我们用一个二次曲线以最小二乘法拟合的计算程序求湮没 γ 峰位和基准 γ 峰位,从而