

чения, обусловленного интерференцией (при выводе использовалось неравенство  $v_0 \gg \omega_0 a_i$ ):

$$I_{\text{инт}}(\theta, \varphi) = \frac{4N\pi^2 e^2 \omega'^2 v_0^2}{c^3} \sum_{\nu=1}^{\infty} \nu^2 \exp\left(-\frac{L^2 \omega'^2 \nu^2}{2c^2}\right) \sin \theta (1 - \cos^2 \theta \cos^2 \varphi) \times \\ \times J_{\nu}^2\left(\frac{\omega a_0}{c} \cos \theta \sin \varphi\right), \quad (2)$$

$$\omega' = \frac{\omega_0}{1 - v_0 \cos \theta \cos \varphi / c}$$

Из формулы (2) следует, что экспоненциальное затухание интерференционного излучения определяется диаметром пучка  $L$ , а не его угловыми размерами, если они в свою очередь существенно меньше 1 рад.

Выражая  $\omega_0$  через  $l_0$ , где  $l_0$  — пространственный период магнитного поля, получим, что интерференционные эффекты существенны при  $L > l_0(c/v_0 - \cos \theta \cos \varphi)/\pi\sqrt{2}$ . Следует также отметить, что угловое распределение интерференционного излучения отличается от углового распределения ондуляторного излучения одной частицы. Причина этого в том, что длина волны излучения в релятивистском случае зависит от направления волнового вектора. Волны наименьшей частоты излучаются в направлении  $\theta = \pi/2$  или  $\varphi = \pi/2$ , что соответствует максимальной интенсивности интерференционного излучения для

$$l_0(c/v_0 - 1)/\pi\sqrt{2} < L < l_0 c/\pi v_0 \sqrt{2}.$$

Приведем некоторые численные оценки. Если  $l_0 \approx 0,1$  м,  $c/v_0 \approx 1,1$ , то интерференционное излучение можно наблюдать при  $L < 2,5$  см, а при  $L < 0,23$  см интерференционные эффекты будут играть определяющую роль.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Прохоров А. М. Когерентное излучение электронов в синхротроне в области сантиметровых волн. — Радиотехника и электроника, 1956, 1, с. 71.  
 [2] Адо Ю. М., Елян В. В. Когерентное излучение электронов в синхротроне. — Атомная энергия, 1960, 9, с. 455. [3] Самойлов И. М., Соколов А. А. К вопросу об азимутальной неустойчивости циркулирующих токов. — ЖЭТФ, 1960, 39, с. 257. [4] Schiff L. I. Production of particle energies beyond 200 Mev. — Rev. Scient. Instrum., 1946, 17, p. 6. [5] McMillan E. Radiation from a group of electrons moving in a circular orbit. — Phys. Rev., 1945, 68, p. 144. [6] Motz H., Thon W., Whitehurst R. N. Experiments on radiation by fast electron beams. — J. Appl. Phys., 1953, 24, p. 826. [7] Байер В. Н., Катков В. М., Фадин В. С. Излучение релятивистских электронов. М., 1973, с. 1—49. [8] Ferlenghi E. Effect of the coherent radiation on the phase distribution of a relativistic bunch. — Nuovo Cimento, 1967, 48 B, p. 73.

Поступила в редакцию  
04.12.79

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1981, Т. 22, № 6

УДК 539.292.011

#### БЛИЖНИЙ ПОРЯДОК В КЛАСТЕРНОЙ МОДЕЛИ СПЛАВА В ПРИБЛИЖЕНИИ КОГЕРЕНТНОГО ПОТЕНЦИАЛА

И. Г. Батырев, А. А. Кацнельсон

(кафедра физики твердого тела)

Характер атомного упорядочения в некоторых сплавах переходных металлов (например, CuPt, CuNi) в значительной степени определяется кластерными эффектами. Влияние их настолько существенно, что даже

для систем из одних и тех же элементов, но при разных концентрациях компонент возможно существование областей с разным типом взаимного расположения атомов. Так, в сплаве CuPt экспериментально, методом диффузного рассеяния [1] было установлено, что уменьшение концентрации Pt приводит к переходу от ближнего порядка по типу  $\text{CuPt}(L_1)$  к типу  $\text{Cu}_3\text{Pt}(L_2)$ .

Поэтому для теоретического исследования явлений упорядочения в этих системах воспользуемся кластерной моделью бинарного сплава, которая с успехом применялась для изучения магнитных свойств неупорядоченных сплавов [2—3]. Главным в этой модели является предположение о том, что электронное состояние каждого атома в сплаве в основном зависит от электронной структуры его  $Z_1$  ближайших соседей. Подробное изложение этого метода, являющегося по существу разновидностью приближения молекулярного поля, можно найти в работах [4—5]. Поэтому здесь будет кратко приведена схема расчета когерентных потенциалов, определяющих одноэлектронные свойства твердого раствора, и рассмотрено отличие способа вычисления плотности электронных состояний от принятого в указанных работах, заключающееся во введении параметра ближнего порядка на первой координационной сфере, который связан с вероятностью реализации определенной конфигурации кластера.

1. Рассмотрим однозонную модель бинарного сплава переходных элементов, плотность состояний которого будем аппроксимировать плотностью  $d$ -состояний. Сплав состава  $A_cB_{1-c}$ , где  $c$  — концентрация компоненты  $A$ , будем характеризовать гамильтонианом в приближении сильного взаимодействия, не учитывающим вырождение  $d$ -состояний, что можно делать для концентрированных твердых растворов:

$$H = \sum_n |n\rangle \varepsilon_n \langle n| + \sum_n \sum_{m \neq n} |n\rangle h_{nm} \langle m|,$$

где  $\varepsilon_n$  — атомный  $d$ -уровень атома  $n$  в сплаве, который равен  $\varepsilon_A$  или  $\varepsilon_B$ , если узел  $n$  занят атомами  $A$  или  $B$  соответственно;  $h_{nm}$  — интеграл перехода, отличный от нуля только для ближайших соседей и равный  $h_{AA}$ ,  $h_{AB}$ ,  $h_{BB}$ , если узлы  $n$  и  $m$  заняты атомами типа  $A$  и  $A$ ,  $A$  и  $B$ ,  $B$  и  $B$ , причем для  $h_{AB}$  выберем факторизующееся приближение  $h_{AB} = (h_{AA}h_{BB})^{1/2}$ . Будем полагать, что зависимость  $\varepsilon_n$  от ближнего окружения описывается выражением

$$\varepsilon_n = \varepsilon_n^0 + U(n_n - n_n^0),$$

где  $\varepsilon_n^0$  — атомный  $d$ -уровень чистого элемента,  $n_n$  и  $n_n^0$  — число электронов на атом в сплаве и в чистом металле,  $U$  — эффективный интеграл электрон-электронного взаимодействия.

Предположение о структурной зависимости элементов гамильтониана сплава вызвано необходимостью учесть разную полуширину зон  $\omega_A = Z_1 h_{AA}$  и  $\omega_B = Z_1 h_{BB}$  чистых элементов (табл. 1).

Кластер, состоящий из центрального атома  $n$  и оболочки  $Z_1$  ближайших соседей, будем характеризовать типом центрального атома и числом ближайших соседей сорта  $A$  и  $B$  —  $N_A$  и  $N_B$  соответственно. Эффективную среду, определяющую одноэлектронные свойства сплава, найдем из условия когерентного рассеяния электрона на таком кластере, погруженном в эффективную среду. Ее определение сводится к нахождению когерентного потенциала  $\Sigma$  или более удобного при рассмотрении недиагонального беспорядка эффективного локатора  $l = (z - \Sigma)^{-1}$ . Диагональный в узельном представлении матричный элемент гринов-

ской функции определенной конфигурации кластера  $G_{nn}^k$ , зависящий как от типа атома в центральном узле  $n$ , так и от числа соседей сорта  $A$  и  $B$ , связан с матричным элементом гриновской функции среды, возмущенной только первой координационной сферой  $\Lambda_{nn}^k$ :

$$G_{nn}^k = \frac{\gamma_n^2}{z - \varepsilon_n} \left( 1 + \frac{\Lambda_{nn}^k}{1 - (\gamma_n^2/(z - \varepsilon_n) - l) \Lambda_{nn}^k} \frac{\gamma_n^2}{(z - \varepsilon_n)} \right),$$

где  $\Lambda_{nn}^k = U_0 + U^2(R) \langle T \rangle$ ,  $\langle T \rangle = Z_1 \langle \tau \rangle / (1 - Z_1 \langle \tau \rangle \Gamma)$ ,  $z = E + i0$ , среднее  $\langle \tau \rangle$  означает, что  $\langle \tau \rangle = (N_A t_A / (1 + \Gamma t_A) + N_B t_B / (1 + \Gamma t_B)) / Z_1$ ,

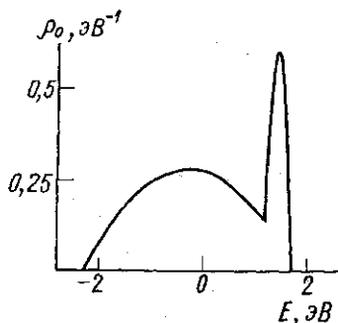
$$t_n = \frac{(\gamma_n^2/(z - \varepsilon_n) - l)}{1 + (\gamma_n^2/(z - \varepsilon_n) - l) U_0}. \quad \text{В этих соотношениях } \gamma_n^2 - \text{ величина, про-}$$

порциональная ширине зоны  $h_{nm} = \gamma_n h \gamma_m$ , где  $h$  — структурно независимый интеграл перехода «пустого» кристалла,  $U_0$ ,  $U(R)$  и  $\Gamma$  выражаются

Таблица 1

Параметры, характеризующие  
чистые переходные элементы  
(по данным работы [3])

| $n$ | $\varepsilon_n^0 - \varepsilon_{Pt}^0$<br>эВ | $2\omega_n$ , эВ | $n_n^0$ (эл./атом) |
|-----|--|------------------|--------------------|
| Ni  | 2  | 4,0              | 9,45               |
| Cu  | 1  | 3,5              | 9,95               |
| Pt  | 0  | 7,0              | 9,55               |



Модельная плотность состояний металла с ГЦК структурой

через матричный элемент гриновской функции  $G_{nn}(l) = \int \rho_0(E) dE / (l^2 - E)$ , где  $\rho_0(E)$  — плотность состояний «пустого» кристалла с полушириной зоны  $\omega = Z_1 h$ :

$$U_0 = l^{-2} G_{nn} - l^{-1}, \quad U(R) = l^{-1} U_0 / \omega, \quad \Gamma = (U(R) l^{-1} h^{-1} - G_{nn} l^{-2}) / (Z_1 - 1).$$

Для  $\rho_0(E)$  выберем форму плотности ГЦК металла (рис. 1), которая является аналитической моделью плотности состояний, полученной в зонных расчетах [6]:

$$\rho_0(E) = (2/\pi) \sum_{i=1,2} \sqrt{D_i - (E - E_i)^2} / F_i,$$

где  $D_i$ ,  $E_i$ ,  $F_i$  — константы, обеспечивающие  $\rho_0(E)$  вид, совпадающий с представленным на рисунке.

Эффективный локалор определяется из условия

$$G_{nn}(l) = \sum_{n=A,B} \sum_k P(k) G_{nn}^k C, \quad (1)$$

где  $P(k)$  — вероятность реализации определенной конфигурации кластера, связанная с параметром ближнего порядка на первой координационной сфере  $a_1$  соотношением

$$P(k) = \begin{cases} c(c + (1 - c) \alpha_1)^{NA} ((1 - c) (1 - \alpha_1))^{Z_1 - NA}, & \text{если } n = A, \\ ((1 - c) (1 - c + c \alpha_1))^{Z_1 - NA} (c (1 - \alpha_1))^{NA}, & \text{если } n = B, \end{cases}$$

$C$  — число конфигураций с одинаковым  $N_A$ , равное  $Z_1!/[N_A! \cdot (Z_1 - N_A)!]$ .

Уравнение (1) решалось итерационным методом:

$$l^{-1} = \sigma^{-1} + 1 / \sum_{n=A,B} \sum_k P(k) G_{nn}^k(\sigma) C - 1/G_{nn}(\sigma),$$

где  $\sigma$  — значение  $l$  на предыдущем шаге вычислений. Найденный эффективный локатор позволил определить плотность электронных состояний сплава

$$\rho(E) = -\frac{5}{\pi} \operatorname{Im} \sum_{n=A,B} (1/\gamma_n^2) \sum_k P(k) G_{nn}^k C.$$

2. Изложенная схема расчета  $\rho(E)$  была использована для определения конфигурационной части полной энергии

$$E_K = N \left[ 2 \int_{E_F} E \rho(E) dE - U (cn_A^2 + (1-c)n_B^2) + E_0 \right],$$

где  $E_F$  — ферми-уровень металла, определяющийся из соотношения

$$2 \int_{E_F} \rho(E) dE = cn_A^0 + (1-c)n_B^0, \text{ где } n_A = 2 \int_{E_F} \rho_A(E) dE, \quad n_B = 2 \int_{E_F} \rho_B(E) dE,$$

$N$  — число атомов в решетке,  $E_0$  — конфигурационная часть электростатической энергии,  $\rho_A(E)$  и  $\rho_B(E)$  — компоненты плотности, равные

$$\rho_n(E) = -\frac{5}{\pi} \operatorname{Im} G_{nn} / [(1 + ((z - \epsilon_n)/\gamma_n^2 - l^{-1}) G_{nn}) \gamma_n^2] \quad (n = A, B).$$

Вклад  $E_0$  в  $E_K$  согласно [7] с учетом только ближайших соседей характеризуется выражением

$$E_0 = (2/\pi) \alpha_1 Z_1 c (1-c) (\Delta Z^*)^2 \int (\sin(qR)/qR) \exp(-q^2/4\eta) dq,$$

где  $\Delta Z^* = Z^*_A - Z^*_B$ ,  $Z^*_A$ ,  $Z^*_B$  — эффективные валентности [8],  $R$  — радиус первой координационной сферы, который определялся нами по правилу Вегарда,  $q$  — волновой вектор,  $\eta$  — параметр Эвальда.

Вычисленные  $\rho(E)$ ,  $E_K$  позволили в рамках статистической теории ближнего порядка определить  $\alpha_1$  из соотношения

$$\alpha_1 = (1 - \alpha_1)^2 c (1 - c) \left( \exp \left( -\frac{\partial E_K}{\partial \alpha_1} / N k_B T c (1 - c) Z_1 \right) - 1 \right), \quad (2)$$

где  $k_B$  — постоянная Больцмана,  $T$  — температура.

В теории псевдопотенциала твердых растворов [7], позволившей успешно рассчитать характер атомного упорядочения, а также определить величину  $\alpha_1$  для широкого круга сплавов,  $E_K$  предполагалась линейно зависящей от  $\alpha_1$  и решение (2) сводилось к нахождению корней квадратного уравнения. В данной работе  $E_K$  — нелинейная функция параметра ближнего порядка, поэтому определение  $\alpha_1$  из уравнения (2) возможно лишь численными методами, причем величина  $\partial E_K / \partial \alpha_1$  активно влияет на сходимость итерационного процесса.

Результаты вычислений, которые проводились на ЭВМ БЭСМ-6, представлены в табл. 2, в которой для сравнения приведены значения  $\alpha_1$ , полученные экспериментально методом диффузного рассеяния [1]. Для большинства рассмотренных систем, среди которых есть сплавы как с ближним порядком, так и с ближним расслоением, наблюдается совпадение знака  $\alpha_{1 \text{ рас}}$  с  $\alpha_{1 \text{ экс}}$ , хотя рассчитанные значения параметра

Теоретически вычисленные значения  $\alpha_1$  в сравнении с экспериментальными результатами

| Параметр<br>$\alpha_1$ | Система               |                       |      |                       |                       |
|------------------------|-----------------------|-----------------------|------|-----------------------|-----------------------|
|                        | CuPt<br>(29 ат. % Pt) | CuPt<br>(50 ат. % Pt) | CuNi | NiPt<br>(11 ат. % Pt) | NiPt<br>(31 ат. % Pt) |
|                        | Температура, °C       |                       |      |                       |                       |
|                        | 500                   | 890                   | 1021 | 1050                  | 1050                  |
| $\alpha_{1рас}$        | -0,18                 | -0,05                 | 0,36 | -0,12                 | -0,20                 |
| $\alpha_{1экс}$        | -0,1                  | 0,00                  | 0,12 | -0,013                | -0,133                |

ближнего порядка по абсолютной величине заметно превосходят  $|\alpha_{1экс}|$ . Это отличие вполне естественно для такого полуквантитативного подхода, каким является предлагаемый метод расчета  $\alpha_1$ . Однако симптоматично, что он позволил получить правильный знак  $\alpha_1$  и качественно верную зависимость параметра ближнего порядка от концентрации компонент. Полученный результат для сплава CuPt имеет принципиальное значение. Упорядочение в этой системе отличается от других твердых растворов тем, что при сравнительно малой концентрации Pt ( $\sim$  до 30 ат. % Pt) сплав упорядочивается по типу  $Cu_3Pt(L1_2)$ , а при концентрации  $\approx$  50 ат. % Pt в сплаве возникает упорядочение по типу  $CuPt(L1_1)$ . В результате этого параметр ближнего порядка на первой координационной сфере существенно отрицателен вблизи  $Cu_3Pt$  и близок к нулю у сплава эквивалентного состава. Легко видеть, что рассчитанные в данной работе значения  $\alpha_1$  отражают указанные концентрационные особенности. Это означает, что использованная здесь кластерная модель, сущность которой состоит в том, что основные особенности плотности состояний твердого раствора должны определяться электронным строением ближайших соседей атома сплава, довольно хорошо согласуется с экспериментом. Если учесть, что в псевдопотенциальной теории, по крайней мере во втором порядке теории возмущений, в приближении сферы Ферми, которая эквивалентна парной модели, не учитывающей реальной электронной структуры сплавов,  $\alpha_1$  зависит от концентрации компонент по закону, слабо отличающемуся от параболического, то становится ясно, что успех предпринятого здесь расчета определяется в конечном счете учетом, хотя бы приближенно, реальной электронной структуры сплавов.

Однако использованная нами  $\rho_0(E)$  с резко выделенным пиком в вершине зоны является довольно грубой моделью плотности состояний переходных металлов. Поэтому наряду с исследованием более широкого круга сплавов предложенным методом оценки знака  $\alpha_1$  для лучшего согласия расчета с экспериментом следует совершенствовать исходные плотности состояний.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Иверонова В. И., Кацнельсон А. А. Ближний порядок в твердых растворах. М.: Наука, 1977, 253 с. [2] Van der Rest J., Gautier F., Brouers F. Off-diagonal disorder and energy of formation in transitional alloys.— J. Phys. F: Metal Phys., 1975, 5, p. 2283—2293. [3] Van der Rest J. Local environment and magnetic properties in transitional binary alloys: III.— J. Phys. F: Metal Phys., 1977, 7, p. 1051—1068. [4] Brouers F., Ducastelle F., Van der Rest J. Random transfer integrals in disordered alloys.— J. Phys. F: Metal Phys., 1973, 3, p. 1704—1715. [5] Brouers F., Gautier F., Van der Rest J. Local environment and magnetic properties in tran-

sitional binary alloys: I.—J. Phys. F: Metal Phys., 1975, 5, p. 975—994. [6] Yasu-  
hi M., Hayashi E., Shimizu M. Consistent band calculation for vanadium and  
chromium.—J. Phys. Soc., Japan, 1970, 29, p. 1446—1455. [7] Katsnelson A. A.,  
Silonov V. M., Farid A. Khwaja. Electronic theory of short-range order in  
alloys using the pseudopotential approximation and its comparison with experiments.—  
Phys. Stat. Sol. (b), 1979, 91, p. 11—33. [8] Animalu A. O. E. Electronic structure  
of transition metals. I. Quantum defects and model potential.—Phys. Rev., 1973, B 8,  
p. 3542—3554.

Поступила в редакцию  
07.12.79

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1981, Т. 22, № 6

УДК 533.933

### ИССЛЕДОВАНИЕ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ БЫСТРЫХ ЭЛЕКТРОНОВ ПО ЭНЕРГИЯМ В ПОЛОЖИТЕЛЬНОМ СТОЛБЕ И В ОТРИЦАТЕЛЬНОМ СВЕЧЕНИИ ГЕЛИЕВОГО РАЗРЯДА НИЗКОГО ДАВЛЕНИЯ

Л. М. Волкова, А. М. Девятов, Е. А. Кралькина, А. В. Куралова

(кафедра электроники)

В последнее время исследование функции распределения электронов по энергиям (ФРЭЭ) находится в центре внимания многих исследователей. Это связано с тем, что форма распределения электронов по энергиям в различных энергетических областях свидетельствует о многообразии физических процессов, происходящих в ионизированных газах: о наличии и скорости тех или иных элементарных процессов, о развитах неустойчивостей и т. д.

В настоящей работе для определения функции распределения быстрых электронов, т. е. электронов с энергиями  $\varepsilon$ , превышающими энергию возбуждения уровней гелия  $\varepsilon_h$ , было использовано уравнение, связывающее интенсивности спектральных линий  $I(x)$ , излучаемых плазмой, с искомой ФРЭЭ  $f(\varepsilon)$  [1, 2]:

$$I(x) = Cv(x) \int_{\varepsilon_h(x)}^{\infty} q(x, \varepsilon) \sqrt{\varepsilon} f(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (1)$$

где  $C$  — const,  $x$  — параметр, характеризующий данную спектральную линию,  $q(x, \varepsilon)$ ,  $v(x)$  — эффективное сечение возбуждения и частота  $x$ -й спектральной линии.

Необходимость такого подхода к определению ФРЭЭ была обусловлена тем, что вопрос обоснованности использования зондового метода в отрицательном сечении, где искомая  $f(\varepsilon)$  может быть анизотропна, до сих пор не решен.

Исследование функции распределения в гелиевом разряде проводилось при давлениях газа 0,3; 0,1; 0,05 и 0,025 мм рт. ст. и разрядном токе 25 мА. Длина газоразрядной трубки была равна 70 см, внутренний диаметр — 3 см. Разрядная трубка размещалась параллельно оптической оси спектрографа ИСП-51, на фокальной поверхности которого была установлена выходная щель. Измерение интенсивности спектральных линий проводилось поперек трубки на различных расстояниях от катода. Изменение интенсивности свечения плазмы вдоль газоразрядной трубки (от катода к аноду) при различных давлениях гелия показано на рисунках 1, а—4, а. ФРЭЭ рассчитывалось в 24 точ-