

тройной сверхструктуре образуются только пары типа «марганец — марганец» и «марганец — железо», а пары «железо — железо» не образуются. Любое отклонение от полного порядка приводит к появлению пар типа «железо — железо» и к уменьшению числа пар типа «марганец — марганец» и «марганец — железо».

В работе [17] проведен расчет энергий межатомного взаимодействия в сплавах переходных металлов и, в частности, показано, что энергия взаимодействия атомов марганца друг с другом превосходит энергию взаимодействия атомов железа: $E_{MnMn} > E_{FeFe}$, а энергия взаимодействия атомов железа с атомами марганца занимает промежуточное значение между E_{MnMn} и E_{FeFe} . Отсюда ясно, что благодаря такому различию в энергиях межатомного взаимодействия более выгодным с энергетической точки зрения становится увеличение в системе $Eg(Fe_{1-x}Mn_x)_2$ числа пар «марганец — марганец» и «марганец — железо» и уменьшение числа пар «железо — железо». Именно такая ситуация и реализуется при упорядочении атомов в этой системе.

Подобная закономерность в локальном распределении атомов железа и марганца была обнаружена в системе $Ti(Fe_{1-x}Mn_x)_2$ [13] и в сплавах «марганец — железо» с различной атомно-кристаллической структурой [8].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Теслюк М. Ю. Металлические соединения со структурами фаз Лавеса. М.: Наука, 1969. [2] Wallace W. E. Rare Earth Intermetallics. N. Y.—Ldn., 1973. [3] Тейлор К. Интерметаллические соединения редкоземельных металлов. М.: Мир, 1974. [4] Белов К. П. Редкоземельные магнетики и их применение. М.: Наука, 1980. [5] Илюшин А. С. Введение в структурную физику редкоземельных интерметаллических соединений. М.: Изд-во МГУ, 1984. [6] Белов К. П., Звездин А. К., Кадомцева А. М., Левитин Р. З. Ориентационные переходы в редкоземельных магнетиках. М.: Наука, 1979. [7] Илюшин А. С. Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон., 1980, 21, № 1, с. 94. [8] Илюшин А. С., Никанорова И. А. Там же, 1982, 23, № 5, с. 27. [9] Илюшин А. С., Корчажкин В. В. ФММ, 1980, 49, с. 1323. [10] Ilyushin A. S., Wallace W. E. J. Solid State Chemistry, 1976, 17, p. 131. [11] Илюшин А. С. ФММ, 1977, 43, с. 1249. [12] Жданов Г. С., Илюшин А. С., Никитина С. В. Дифракционный и резонансный структурный анализ. М.: Наука, 1980. [13] Sharon T. E., Tsuei C. C. Phys. Rev. B, 1970, 2, p. 2302. [14] Merches M., Narasimhan K. S. V. E., Wallace W. E., Ilyushin A. S. AIP Conf. Proc., 1976, N 34, p. 233. [15] Wertheim G. K., Wernick J. H. Phys. Rev., 1962, 125, p. 1937. [16] Чекин В. В. Мёссбауэровская спектроскопия сплавов железа, золота и олова. М.: Энергоиздат, 1981. [17] Панин В. Е., Хон Ю. А., Наумов И. И. Теория фаз в сплавах. Новосибирск: Наука, 1984.

Поступила в редакцию
05.02.85

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1986, т. 27, № 2

УДК 537.534

РАСЧЕТ РАСПЫЛЕНИЯ МОНОКРИСТАЛЛА НИКЕЛЯ ПРИ МАГНИТНОМ ФАЗОВОМ ПЕРЕХОДЕ

В. Н. Самойлов, В. А. Эльтеков, В. Е. Юрасова

(кафедра электроники; кафедра математики)

В ряде газоразрядных приборов используются конструкционные магнитные материалы, точка Кюри которых лежит в рабочем диапазоне приборов. Для таких материалов важно знать, как изменяется коэффициент распыления S при переходе из ферро- в парамагнитное состояние ($f \rightarrow p$). В [1—2] было обнаружено, что при $f \rightarrow p$ переходе происходит скачкообразное увеличение на 20—30% S для Ni и Gd и такое

же уменьшение S для коэлинвара. Согласно [3], такой эффект связан с различием потенциалов взаимодействия $U(r)$ двух атомов ферромагнетика с параллельной и хаотической ориентацией спинов. Ферромагнитная добавка $\Delta U_f(r)$ к потенциалу взаимодействия для Ni определена в [3]. Изменение $U(r)$ при $f \rightarrow p$ переходе должно привести к изменению энергии связи E_b атомов на поверхности и числа атомов в каскаде столкновений, движущихся обратно к поверхности N_c . Это в свою очередь должно вызвать изменение коэффициента распыления S , который, согласно [4], пропорционален $1/E_b$ и зависит от N_c .

В настоящей работе было рассчитано, как изменяются энергия связи атома на поверхности грани (001) монокристалла никеля и распыление при учете ферромагнитной добавки к потенциалу взаимодействия.

1. Энергия связи рассчитана на основе статического приближения [5] по формуле

$$E_b = - \sum_{i=1}^{\infty} U(r_i),$$

где $U(r)$ — потенциал взаимодействия двух атомов Ni, расположенных на расстоянии r друг от друга (суммирование ведется по всем атомам кристалла). Предполагалось, что вылет рассматриваемого атома не изменяет положений остальных атомов кристалла. В качестве потенциала взаимодействия атом—атом в парамагнитном состоянии использован потенциал Морзе

$$U_p(r) = D(e^{-2\alpha(r-r_0)} - 2e^{-\alpha(r-r_0)})$$

с константами $D=0,4205$ эВ, $\alpha=1,4199$ А⁻¹, $r_0=2,780$ А. В ферромагнитном состоянии, согласно [3],

$$U_f(r) = U_p(r) + \Delta U_f(r),$$

$$\Delta U_f(r) = -5,16e^{-0,8112r^2}. \quad (1)$$

Более резкий спад $\Delta U_f(r)$ (как e^{-r^2}) по сравнению с экспоненциальным уменьшением $U_p(r)$ приводит к уменьшению относительной роли ферромагнитной добавки для взаимодействия с атомами второй, третьей и следующих координационных сфер. Поэтому оценка изменения E_b при магнитном переходе с помощью рассмотрения взаимодействия с атомами только первой сферы является явно недостаточной. Величина блока, использованного для определения энергии связи на поверхности, варьировалась от размеров одной координационной полусферы до полубесконечного кристаллита. При исследовании зависимости E_b от температуры предполагалось, что тепловые колебания испытывает только рассматриваемый атом, остальные атомы считались покоящимися в своих узлах. Тепловые колебания рассчитывались по модели Дебая — Уоллера с температурой Дебая для Ni $T_D=470$ К. Для нахождения среднего значения энергии связи при заданной температуре T смещение атома из узла решетки проводилось 5000 раз.

На рис. 1 представлена зависимость величины энергии связи атома в парамагнитном и ферромагнитном состояниях для грани (001) Ni от величины кристаллита. Рассматриваемый атом находится в узле решетки на поверхности. Из рис. 1 видно, что энергия связи резко возрастает при увеличении размера кристаллита (добавлении к нему атомов 2-й, 3-й и последующих координационных сфер). При увеличении размера кристаллита до 8 полусфер энергия связи выходит на насыщение (относительное отклонение от уровня насыщения составляет менее 1%). Таким образом, кристаллит, достаточный для расчета энергии связи с точностью лучше 1%, должен включать не менее 8 координационных полусфер, т. е. более 80 атомов. Величина E_b в парамагнитном состоянии, посчитанная для случая полубесконечного кристаллита, равна 5,500 эВ и находится в хорошем согласии с результатом работы [5] (5,55 эВ). Величина E_b в ферромагнитном состоянии, посчитанная нами для случая полубесконечного кристаллита, равна 5,775 эВ. Таким образом, относительное увеличение E_b при $f \rightarrow p$ переходе составляет 5%.

На рис. 2 представлена зависимость величины E_b от температуры. Изменение E_b при изменении T на 1000 К составляет ~3%. В области фазового перехода наблюдается скачок E_b величиной ~5%.

Очевидно, полученное изменение энергии связи при увеличении температуры с учетом перехода мишени из ферромагнитного в парамагнитное состояние следует принимать во внимание в расчетах изменения распыления никеля при переходе через точку Кюри T_c .

2. Распыление рассчитано по динамической модели блока атомов с потенциалами взаимодействия без притяжения [6]. В ферромагнитном состоянии к потенциалу Ni—Ni прибавлялась величина $\Delta U_f(r)$ (1). Блок состоял из 6 атомных слоев в плос-

кости (001) по 68—69 атомов в каждом слое. На поверхности вводился сферический потенциальный барьер высотой 4,435 эВ. Расчет распыления проводился при нормальном падении ионов Ag^+ с энергией 200 эВ на грань (001) Ni.

Относительное увеличение S для грани (001) Ni при магнитном фазовом переходе без учета изменения энергии связи на поверхности составило $\sim 17\%$ (по модели без учета тепловых колебаний атомов решетки). Это обусловлено увеличением сечения взаимодействия атом—атом при $f \rightarrow p$ переходе. С учетом изменения энергии связи увеличение S при $f \rightarrow p$ переходе составило $\sim 22\%$. Последняя величина хорошо соответствует экспериментальным результатам (см. [2]).

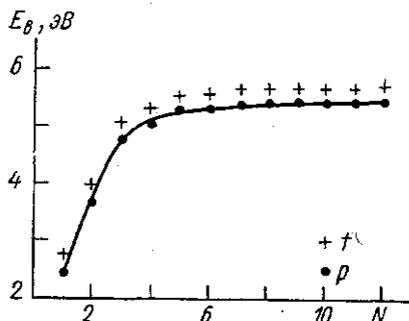


Рис. 1. Изменение энергии связи атома в узле решетки на поверхности грани (001) Ni в зависимости от числа (N) координационных полусфер атомов в блоке, моделирующем кристалл

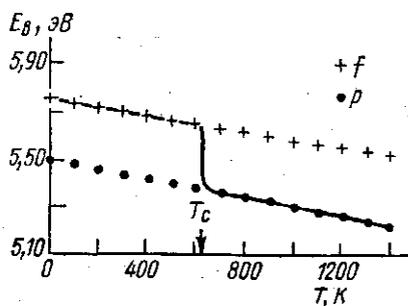


Рис. 2. Температурная зависимость энергии связи атома на поверхности грани (001) Ni с учетом магнитного фазового перехода для $T_D = 470$ К

Также были рассчитаны пространственные распределения атомов в каскаде столкновений, движущихся наружу через поверхность кристалла, без учета энергии связи и распыленных атомов в проекции на плоский коллектор. В первом случае доминирует интенсивное и широкое центральное пятно [001]. Также присутствуют четыре пятна типа <011>. Пространственное распределение распыленных атомов состоит из четырех пятен <011>. Центральное пятно отсутствует, так как движущиеся в этом направлении частицы каскада являются низкоэнергетичными ($E < E_b$) и не могут покинуть кристалл. При магнитном фазовом переходе картина распылений грани (001) Ni качественно не менялась. Число атомов, распыленных в направлениях <011> в парамагнитном состоянии Ni, увеличивалось по сравнению со случаем ферросостояния так же, как и коэффициент распыления.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Юрасова В. Е., Черныш В. С., Кувакин М. В., Шелякин Л. Б. Письма в ЖЭТФ, 1975, 21, с. 197. [2] Yugasova V. E. Vacuum, 1983, 33, p. 565. [3] Кувакин М. В. Автореф. канд. дис. М. (МГУ), 1979. [4] Sigmund P. Phys. Rev., 1969, 184, p. 383. [5] Jackson D. P. Rad. Effects, 1973, 18, N 3—4, p. 185. [6] Shulga V. I. Ibid., 1980, 51, N 1—2, p. 1.

Поступила в редакцию
22.04.85