

кривой, если угловая ширина (по α) падающего излучения позволяет получать КУВ от различных ее участков.

Развитая матричная теория позволяет рассматривать произвольные профили изменения $\chi_0(z)$ и $\chi_h(z)$; усложнение структуры поля по сравнению с френелевским затуханием учитывается автоматически. Таким образом, в данной работе дано полное решение задачи кинематической скользящей дифракции.

В заключение автор выражает признательность Ф. Н. Чуховскому, С. А. Степанову и В. А. Бушуеву за полезные обсуждения проблемы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Имамов Р. М., Кондрашкина Е. А. // Кристаллография. 1986. 31, № 3. С. 582. [2] Имамов Р. М., Кондрашкина Е. А., Александров П. А. и др. // Поверхность. 1987. № 3. С. 41. [3] Имамов Р. М., Кондрашкина Е. А., Новиков Д. В., Степанов С. А. // Кристаллография. 1987. 32, № 4. С. 852. [4] Dosch H., Battermann B. W., Wack D. C. // Phys. Rev. Lett. 1986. 56, N 11. P. 1144. [5] Brunel M., Bergevin F. // Acta Cryst. 1986. A 42. P. 299. [6] Андреева М. А., Щеглов М. П., Кютт Р. Н. // Тез. II совещ. по всесоюзной компл. программе «Рентген» (Черновцы, сент. 1987 г.). Ереван, 1987. С. 166. [7] Андреев А. В., Ковьев Э. К. // Изв. АН СССР, сер. физ. 1983. 47, № 10. С. 1984. [8] Aleksandrov P. A., Afanas'ev A. M., Melkonyan M. K., Stepanov S. A. // Phys. Stat. Sol. (a). 1984. 81. P. 47. [9] Александров П. А., Афанасьев А. М., Степанов С. А. // Поверхность. 1984. № 8. С. 9. [10] Александров П. А., Афанасьев А. М., Степанов С. А. // Кристаллография. 1984. 29, № 2. С. 197. [11] Андреева М. А., Борисова С. Ф., Хапачев Ю. П. // Металлофизика. 1986. 8, № 5. С. 44. [12] Андреева М. А. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1986. 27, № 6. С. 86. [13] Eisenberger P., Magga W. C. // Phys. Rev. Lett. 1981. 46, N 16. P. 1081. [14] Robinson I. K., Kuk Y., Feldman L. C. // Phys. Rev. 1984. B29, N 8. P. 4762. [15] Vineyard G. H. // Phys. Rev. 1982. B 26, N 8. P. 4146. [16] Dietrich S., Wagner H. // Phys. Rev. Lett. 1983. 51, N 16. P. 1469. [17] Dietrich S., Wagner H. // Z. f. Phys. B. 1984. 56. P. 207. [18] Степанов С. А. Дис. ... канд. физ.-мат. наук. М. (ИКАН), 1985. [19] Андреева М. А. // Поверхность. 1988. № 12. С. 17. [20] Александров П. А., Степанов С. А. // Поверхность. 1986. № 6. С. 117. [21] Brennan S., Eisenberger P. // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. 1984. 222. P. 164.

Поступила в редакцию
26.10.87

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1989. Т. 30, № 3

УДК 536.413.3:539.213.2

ТЕПЛОВОЕ РАСШИРЕНИЕ АМОРФНЫХ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА В ИНТЕРВАЛЕ 4,2—300 К

[В. Е. Роде], С. А. Сорокина, Л. А. Архипкин, Е. Ю. Сумароков

(кафедра магнетизма)

Измерен коэффициент теплового расширения аморфных инварных сплавов Fe—(15±25) ат.%. В интервале температур 4,2—300 К и оценен магнитный вклад в тепловое расширение. Результаты интерпретируются в терминах сосуществования ферро- и антиферромагнитной компонент в аморфном сплаве.

В настоящее время существует целый ряд аморфных сплавов, проявляющих инварные свойства [1]. Однако природа инвариности этих сплавов до конца не изучена. Общепризнан тот факт, что инварные аномалии связаны с магнетизмом, однако исследования магнитной структуры достаточно сложны. При этом используются дифракция нейтронов, методы, основанные на эффекте Мёссбауэра, и другие. Как

отмечают авторы работы [2], хотя в принципе идентификация магнитного состояния стекол Fe—В возможна с помощью дифракции нейтронов, фактически было сделано лишь несколько успешных определений статической магнитной структуры металлических стекол. Дифракция нейтронов не дала достаточной информации о природе магнитного порядка в аморфных ферромагнетиках. «Магнитный» сигнал составляет обычно много менее 10% от полной интенсивности рассеяния, за исключением некоторых стекол на основе РЗМ. Существуют трудности как в выделении «магнитного» сигнала, так и в определении относительных величин когерентного и некогерентного вкладов в рассеяние. В этой связи заметим, например, что до настоящего времени авторы многих работ ссылаются на идентификацию антиферромагнитной фазы ГЦК-железа Абрагамсом с соавт. в 1962 г. [3], хотя после выхода этой работы в литературе не было описано ни одного прямого эксперимента, однозначно свидетельствующего об антиферромагнетизме γ -железа.

В настоящей работе измерен температурный коэффициент линейного расширения (КТР) аморфных инварных сплавов Fe—В с содержанием бора от 15 до 25 ат. % в интервале температур 4,2—300 К.

Образцы представляли собой ленты, полученные скоростной закалкой из расплава, размерами $70 \times 0,025 \times 7$ мм. Образцы были проверены на рентгеноаморфность. КТР измерялся на установке, описанной в работе [4]. Результаты измерения КТР образца $Fe_{82,5}B_{17,5}$ представлены на рис. 1. Для оценки решеточного α_L и магнитного α_m вкладов в КТР применялся метод Вайта [5]. При расчете использовались значения КТР аморфного сплава $Fe_{83}B_{17}$ в парамагнитной области [1], низкотемпературной теплоемкости аморфного сплава $Fe_{80}B_{20}$ [6] и высокотемпературной теплоемкости борида железа [7].

КТР сплава $Fe_{82,5}B_{17,5}$ во всем интервале температур 4,2—300 К не превышает $3 \cdot 10^{-6} K^{-1}$ и имеет минимум $\sim (-0,5) \cdot 10^{-6} K^{-1}$ в области температур 4,2—35 К. Отрицательный магнитный вклад в КТР существует во всем исследованном температурном интервале. Таким образом, температурные зависимости КТР и магнитного вклада аналогичны соответствующим зависимостям в случае кристаллического инвара $Fe_{65}Ni_{35}$. Как показано в работе [8] (см. также [9]), аномалия теплового расширения сплавов Fe—Ni определяется сосуществованием ферромагнитной (ФМ) и антиферромагнитной (АФМ) компонент в сплаве и обменным взаимодействием между ними. Носителем антиферромагнетизма в сплаве Fe—В могли быть, по нашему мнению, как области, в которых среднее координационное число атомов железа для атома Fe равно 12, так и области с неизвестным средним координационным числом. Выбор того или иного варианта мог быть сделан на основе приводимого ниже расчета. Подробнее о различных типах областей будет сказано в ходе дальнейшего изложения. Цель настоящей работы состояла в том, чтобы в рамках определенной модели структуры, опирающейся на литературные данные о рентгеновской дифракции на аморфных сплавах Fe—В и о магнитном моменте атома железа в ферромагнитных сплавах, показать необходимость существования в сплаве Fe—В АФМ компоненты.

В аморфных сплавах имеется широкое распределение величин расстояний r между ближайшими соседними атомами Fe. Оно включает в себя диапазон расстояний, характерных для кристаллического Fe и сплавов на основе α - и γ -железа [10] (рис. 2). Как отмечается в работах [11; 12, с. 74—75], магнитный момент атома железа определяется главным образом количеством атомов Fe в его первой коорди-

национной сфере (ПКС) и/или радиусом ПКС. В настоящей работе нами используется гипотеза Тауэра и Вейса о возможности существования атома Fe в γ -фазе в двух различных состояниях: в γ_2 -состоянии со сравнительно большим магнитным моментом и ферромагнитным упорядочением, в γ_1 -состоянии с малым атомным магнитным моментом и антиферромагнитным упорядочением [13]. Атом железа в состоянии γ_2 имеет несколько больший эффективный объем, чем в состоянии γ_1 . Физическая причина существования атомов железа в двух разных состояниях γ_1 и γ_2 связана с влиянием локального окружения на магнитные свойства этих атомов [14].

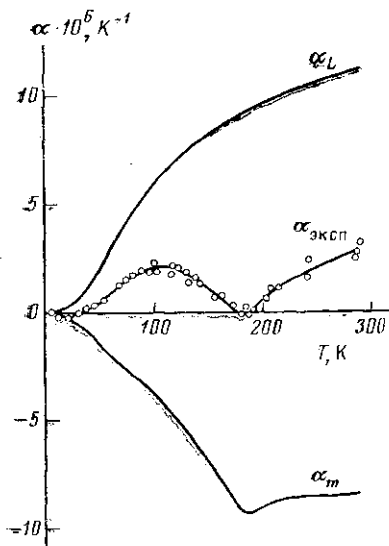


Рис. 1

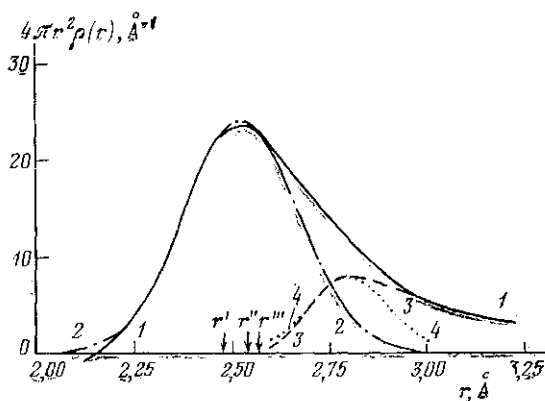


Рис. 2

Рис. 1. Температурный коэффициент линейного расширения (КТР) $\alpha_{\text{эксп}}$, магнитный α_m и решеточный α_L вклады в КТР аморфного сплава $\text{Fe}_{82,5}\text{V}_{17,5}$ в зависимости от температуры

Рис. 2. 1-й пик парциальной парной функции атомного распределения Fe—Fe аморфного сплава $\text{Fe}_{82,5}\text{V}_{17,5}$ (1); гауссовские распределения, сумма которых приблизительно воспроизводит кривую 1-го пика (2, 4); кривая (3) воспроизводит результат вычитания (2) из (1); r' , r'' , r''' — радиусы первой координационной сферы для кристаллического железа в α -фазе, антиферромагнитной и ферромагнитной γ -фазах соответственно [12]

Для интерпретации поведения КТР аморфного сплава $\text{Fe}_{82,5}\text{V}_{17,5}$ рассмотрим следующую модель. Предположим, что в сплаве существуют области (кластеры), в каждой из которых атомы железа имеют в ПКС количество атомов Fe, равное или 12 (как в γ -железе), или 8 (как в α -железе). В соответствии с гипотезой Тауэра и Вейса будем считать, что кластеры типа γ -железа, т. е. с 12 атомами Fe в ПКС, могут быть двух сортов: с АФМ упорядочением и скомпенсированным полным магнитным моментом и с ФМ упорядочением. Предположим, что средний магнитный момент, приходящийся на атом Fe в нашем

аморфном сплаве, является средневзвешенной суммой средних магнитных моментов, приходящихся на атом Fe в различных типах областей.

Итак, мы используем приближение, в котором к сделанным выше предположениям добавляются следующие:

1) расстояния $r_{\text{Fe-Fe}}$ между ближайшими соседними атомами железа в кластерах с ФМ упорядочением типа α -Fe распределены по симметричному закону с центром в r_α ;

2) аналогичные расстояния в кластерах типа ФМ γ_2 -железа и АФМ γ_1 -железа подчиняются двум симметричным распределениям с центрами соответственно в r_{γ_2} и r_{γ_1} ;

3) центры трех симметричных распределений совпадают с расстоянием, которому соответствует максимум 1-го пика функции радиального распределения Fe—Fe. Из рис. 2 видно, что расстояния $r_{\text{Fe-Fe}}$ в кристаллическом α - и γ -железе попадают в область максимума 1-го пика.

С использованием данных о приведенной функции атомного распределения Fe—Fe $G(r)$ сплава $\text{Fe}_{83}\text{B}_{17}$ [15] и средней атомной плотности ρ_0 этого сплава [16] по формуле $4\pi r^2 \rho(r) = G(r)r + 4\pi r^2 \rho_0$ [12, с. 34] нами был рассчитан 1-й пик парциальной функции распределения атомов Fe $4\pi r^2 \rho(r)$ (ФР) для нашего сплава (см. рис. 2). В силу несимметричности 1-го пика ФР (кривая 1) можно предположить, что при больших расстояниях в пределах пика в него дают вклад некие кластеры с неизвестным координационным числом K для атомов Fe и неизвестным магнитным моментом M , приходящимся на атом Fe. Назовем эти кластеры K -компонентой. В настоящей работе подбиралось гауссово распределение (кривая 2 на рис. 2), описывающее восходящую часть 1-го пика ФР. Затем оно вычиталось из кривой 1. Полученная разность (кривая 3) аналогично представлялась гауссовым распределением (кривая 4).

Известно, что кривая $4\pi r^2 \rho(r)$ обладает следующим свойством: площадь под участком этой кривой от r_1 до r_2 равна среднему количеству атомов в сферическом слое, определяемом этими радиусами, в центре которого находится выбранный атом. То есть площадь 1-го пика ФР равна среднему координационному числу выбранного атома [17]. Говоря о «среднем», следует помнить, что у различных атомов Fe число атомов железа в ПКС может быть различным вследствие аморфности структуры (по той же причине будет различным и радиус ПКС). Если бы ПКС всех атомов Fe содержали одинаковое число атомов железа, то площадь 1-го пика ФР была бы равна этому числу, а сам пик имел бы при прочих равных условиях тем большую ширину, чем шире было бы распределение радиусов ПКС.

Введем обозначения, необходимые для расчета. Пусть x — доля K -компоненты в сплаве (число атомов Fe в кластерах K -компоненты, отнесенное к полному числу атомов Fe в образце), y_1 и y_2 — доли областей с атомным ближним порядком типа γ_1 - и γ_2 -железа, z — доля областей с атомным ближним порядком типа α -железа.

Известно, что в α -фазе атом Fe имеет магнитный момент 2,2 μ_B , а в ферромагнитной γ -фазе 2,8 μ_B [12, с. 74—75], в сплаве $\text{Fe}_{82,5}\text{B}_{17,5}$ — приблизительно 2,2 μ_B [1]. В различных ферромагнитных сплавах железные атомы Fe имеют магнитный момент от 1,4 μ_B до 2,8 μ_B [18]. Представив 1-й пик ФР в виде суммы двух гауссовых распределений, как это было описано выше, мы получили площадь, соответствующую вкладу от кластеров типа α - и γ -железа, равную 8,8 (атомов в ПКС),

и площадь 2,1 (атомов в ПКС), соответствующую K -компоненте. Отсюда получаем два уравнения:

$$Kx=2,1, \quad (1)$$

$$8z+12y_1+12y_2=8,8. \quad (2)$$

Третье уравнение очевидно:

$$x+y_1+y_2+z=1 \quad (3)$$

Четвертое уравнение отражает сказанное о величинах магнитных моментов железа в разных фазах (таким образом, каждому типу кластеров ставится в соответствие свое значение магнитного момента атома Fe, среднее по всем атомам в кластерах данного типа; мы предполагаем это значение равным наблюдаемому в такой кристаллической фазе железа, в которой координационное число равно среднему координационному числу в кластерах данного типа):

$$AMx+2,2z+2,8y_2=2,2. \quad (4)$$

Здесь в левой части уравнения стоят значения магнитных моментов в единицах магнетона Бора, взятые с соответствующими весами, в правой части — магнитный момент в тех же единицах, приходящийся на атом железа в сплаве $Fe_{82,5}B_{17,5}$. Величина $A=1$ или $A=0$ в зависимости от того, предполагаем ли мы K -компоненту ферро- или антиферромагнитной соответственно.

Исследуем возможные решения системы этих четырех уравнений.

Если предположить, что K -компонента антиферромагнитна, т. е. $A=0$, система уравнений (1) — (4) запишется в виде

$$2,8y_2+2,2z=2,2,$$

$$12y_1+12y_2+8z=8,8,$$

$$x+y_1+y_2=1,$$

$$Kx=2,1.$$

Рассматривая y_1 в качестве параметра, получим, что при изменении y_1 от нуля до 0,052 x изменяется соответственно от 0,12 до 0,85, y_2 — от 0,44 до 0,097, z — от 0,44 до нуля, а K — от 17,5 до 2,5. Этот формальный результат говорит о том, что содержание АФМ компоненты в сплаве (совокупности кластеров типа γ -Fe и кластеров K -компоненты) может принимать значение из интервала $0,12 < y_1 + x < 0,9$, которое зависит от величины K . Из простых соображений ясно, что реальная физическая ситуация должна соответствовать большим значениям K (и соответственно меньшей доле АФМ областей). Очевидно, малые числа атомов Fe в ПКС атома железа должны были бы соответствовать большим концентрационным неоднородностям в богатом железом (82,5 ат. %) аморфном сплаве или большому свободному объему. Таким образом, возможна ситуация, когда в аморфном сплаве $Fe_{82,5}B_{17,5}$ имеются два типа областей со скомпенсированным полным магнитным моментом: K -компонента и области со средним числом атомов Fe в ПКС атома железа, равным 12. При этом K , по-видимому, велико (ближе к 17, чем к 3), а общее содержание АФМ компоненты в сплаве составляет 15—17%.

Если предположить, что K -компонента ферромагнитна, т. е. $A=I$, система уравнений (1)—(4) запишется в виде

$$Mx + 2,8y_2 + 2,2z = 2,2,$$

$$12y_1 + 12y_2 + 8z = 8,8,$$

$$x + y_1 + y_2 + z = 1.$$

$$Kx = 2,1.$$

Анализ совместности уравнений этой системы приводит к следующим выводам.

При $4 \leq K \leq 7$ решения системы не имеют физического смысла ($z < 0$).

При $K \geq 8$ значения M лежат в интервале от 1,4 мв до 2,8 мв, причем по мере увеличения K количество АФМ компоненты ограничивается все более узким интервалом значений, смещающимся в область низкого ее содержания в сплаве. Проиллюстрируем эту тенденцию. При $K=8$ это интервал от 8 до 21%, при $K=12$ — от 7 до 16%, при $K=17$ — от 6 до 12%, и далее интервал остается еще бóльшим, по крайней мере, трех процентов, в то время как значения K становятся слишком велики, чтобы иметь физический смысл.

Таким образом, и в случае ферромагнитной K -компоненты содержание y_1 АФМ компоненты типа γ_1 -железа не равно нулю, а значение этой величины y_1 коррелирует с величинами K и M .

Этими двумя вариантами исчерпываются возможные физически реальные ситуации в нашем сплаве. Тем самым наличие антиферромагнитной компоненты можно считать доказанным. Имеющиеся в нашем распоряжении данные не позволяют сделать более точные выводы о магнитной структуре исследуемого сплава. Но в рамках предложенной выше модели можно сделать заключение о сосуществовании ферро- и антиферромагнитных компонент в сплаве Fe—В. На основании этого можно предположить, что инварный эффект в аморфном сплаве Fe—В возникает вследствие обменного взаимодействия между ФМ и АФМ компонентами по тому же механизму, который был предложен для Fe—Ni инваров [8].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Fukamichi K., Masumoto T., Kikuchi M.//IEEE Trans. Magnetic. 1979. MAG-15, N 6. P. 1404. [2] Cowlam N., Carr G. E.//J. Phys. F. 1985. 15, N 5. P. 1109. [3] Abrahams S. C., Guttman L., Kasper J. S.//Phys. Rev. 1962. 127. P. 2052. [4] Роде В. Е., Кавалеров В. Г., Лялин А. И., Финкельберг С. А.//Приб. и техн. эксперимента. 1984. № 6. С. 193. [5] White G. K.//Proc. Phys. Soc. 1965. 86. P. 159; Rode V. E., Lyalin A. I., Finkelberg S. A.//J. Appl. Phys. 1982. 53, N 11. P. 8122. [6] Pan V. M., Dekhtyar I. Ya., Osipovskii M. E. et al.//Phys. Stat. Sol. (a). 1983. 76. P. 197. [7] Сидоренко Ф. А., Серебрянников Н. Н., Будожанов В. Д. и др. Теплофиз. высоких температур. 1977. 15, № 1. С. 42. [8] Роде В. Е.//Изв. АН СССР, сер. физ. 1980. 44, № 7. С. 1386. [9] Власов К. Б., Мицек А. И.//ФММ. 1962. 14. С. 487. [10] Pearson W. B. Handbook of Lattice Spacings. L.: Pergamon Press. 1959. [11] Gradmann U., Isbert H. O.//J. Magn. and Magn. Mat. 1980. 15—18. P. 1109; Jaccarino V., Walker L. R.//Phys. Rev. Lett. 1965. 15. P. 258. [12] Хандрих К., Кобе С. Аморфные ферро- и ферримагнетики. М., 1982. Tauer K. J., Weiss R. J.//Bull. Amer. Phys. Soc. 1961. 6. P. 125; Weiss R. J.//Proc. Phys. Soc. 1963. 82. P. 281. [14] Chikazumi S.//J. Magn. and Magn. Mat. 1979. 10. P. 113; Chikazumi S.//Ibid. 1980. 15—18. P. 1130; Matsui M., Adachi K., Chikazumi S.//J. Appl. Phys. 1980. 51. P. 6319; Suzuki Y., Miyajima H., Kido G. et al.//J. Phys. Soc. Japan. 1981. 50. P. 817; Dupre F., Menzinger F., Sacchetti F.//J. Phys. F. 1981. 11. P. 2179; Hesse J., Muller J. B., Wiechmann B., Ullrich H.//J. Magn. and Magn. Met. 1980. 15—18. P. 1195.

[15] Waseda Y.//Progr. Mater. Science. 1981. 26. P. 1—122. [16] Cowlam N., Sakata M., Davies H. A.//J. Phys. F. 1979. 9, N 11. P. L203. [17] Золотухин И. В. Физические свойства аморфных металлических материалов. М., 1986. С. 31—32. [18] Physics and Applications of Invar Alloys/Ed. by H. Saito. Tokyo, 1978; Collins M. F.//Proc. Phys. Soc. 1965. 86. P. 973.

Поступила в редакцию
01.02.88

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1989. Т. 30, № 3

УДК 517.955.8:537.222.22

ПРИБЛИЖЕННОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ПУАССОНА В МОДЕЛИ ДВУМЕРНОЙ ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ СТРУКТУРЫ

Л. В. Калачев, И. А. Обухов

(кафедра математики)

Методом пограничных функций построено асимптотическое приближение по малому параметру к решению уравнения Пуассона для электростатического потенциала в прямоугольной области, моделирующей двумерную полупроводниковую структуру.

1. Постановка задачи. Моделирование явлений переноса заряда в полупроводниковых структурах необходимо при решении различных теоретических и прикладных задач. Особенно актуальной является задача численного моделирования процессов, протекающих в полупроводниковых приборах [1, 2].

При описании этих процессов обычно исходят из уравнений хорошо известной дрейфово-диффузионной модели, которые в случае невырожденного полупроводника имеют вид [1, 3]

$$\alpha^2 \Delta \Psi = n - p - N,$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -u_n - \beta^2 \nabla j_n, \quad \frac{\partial p}{\partial t} = -u_p + \beta^2 \nabla j_p,$$

$$j_n = \mu_n n \nabla \Phi_n, \quad j_p = \mu_p p \nabla \Phi_p,$$

$$j = j_n + j_p + \frac{\alpha^2}{\beta^2} \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \Psi),$$

$$n = \exp \{ \Psi - \Phi_n \}, \quad p = \exp \{ \Phi_p - \Psi \}. \quad (1)$$

Система (1) записана в безразмерном виде. Приняты следующие обозначения: $\alpha = L_0/L$, где L_0 — длина Дебая [2, 3], а L — характерный для задачи размер; Ψ — электростатический потенциал, измеряемый в единицах kT/e (k — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура, e — заряд электрона); n , p , N — концентрации электронов, дырок и плотность заряда легирующей примеси в единицах собственной концентрации n_i ; $u_n = u_p$ — члены, описывающие процессы генерации — рекомбинации носителей заряда; $\beta^2 = \alpha^2 \tau / \tau_0$, где τ_0 — время диффузии на длину Дебая, а τ — характерное для задачи время; j , j_n , j_p — плотности токов в единицах $j^* = -en_i D_0 / L_0$, D_0 — величина размерности коэффициента диффузии; μ_n и μ_p — подвижности носителей заряда; $\Phi_{n,p}$ — квазиуровни Ферми, измеряемые в тех же единицах, что и Ψ .

Решение существенно нелинейной самосогласованной системы (1) может быть получено методом последовательных приближений. При