

давно [10] обнаружено квадрупольное расщепление мёссбауэровской линии ^{119}Sn в $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$; интерпретация этих данных, однако, оставалась неоднозначной, так как такое же расщепление могло быть вызвано и нарушением симметрии локального окружения атомов олова.

Проявление нецентральности атомов Sn в условиях замещения Te на Se мы объясняем следующим образом. Мы считаем, что в $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ атомы олова занимают нецентральные положения в комплексах (SnTe_6) , однако из-за высокого темпа туннельных перескоков между эквивалентными положениями их упорядочение при низкой температуре и малых x невозможно. Замещение части атомов Te на Se приводит одновременно к увеличению геометрических размеров потенциальной ямы и нарушению симметрии комплекса (различные смещения атома становятся неэквивалентными), что быстро уменьшает вероятность туннельных переходов. В этих условиях диполь-дипольное взаимодействие атомов Sn уже не подавляется туннельным движением и в системе происходит ФП.

Вывод о происходящих в кристаллах $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}_{1-y}\text{Se}_y$ ФП был подтвержден прямыми рентгеновскими измерениями, свидетельствующими об искажении решетки ниже T_c . К сожалению, сегнетоэлектрический характер этого ФП доказать не удалось из-за малой ширины запрещенной зоны в кристаллах, не позволившей создать в них качественный p - n -переход.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Лебедев А. И., Случинская И. А. // Изв. АН СССР, сер. физ. 1987. 51, № 10. С. 1683. [2] Лебедев А. И., Случинская И. А. // Письма в ЖЭТФ. 1987. 46, № 11. С. 425. [3] Лебедев А. И., Случинская И. А. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1988. 29, № 6. С. 100. [4] Балтрунас Д. И., Мотеюнас С. В., Старик П. М., Микитюк В. И. // Письма в ЖЭТФ. 1982. 36, № 1. С. 5. [5] Микитюк В. И. // Тез. докл. 2-й Всесоюз. конф. по материаловедению халькогенидных и кислородсодержащих полупроводников. Черновцы, 1986. Т. 2. С. 106. [6] Лебедев А. И., Случинская И. А. // Там же. С. 74. [7] Козловский В. Ф., Лебедев А. И. // ФТТ. 1988. 30, № 2. С. 531. [8] Козловский В. Ф., Лебедев А. И., Петров Ю. Е. // ФТТ. 1986. 28, № 12. С. 3610. [9] Абдуллин Х. А., Демин В. Н., Лебедев А. И. // ФТТ. 1986. 28, № 4. С. 1020. [10] Николаев И. Н., Потапов В. П., Шотов А. П., Юркевич Е. Е. // Письма в ЖЭТФ. 1977. 25, № 4. С. 185.

Поступила в редакцию
27.12.88

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1989. Т. 30, № 5

УДК 539.213.001

ИЗМЕНЕНИЕ СТРУКТУРЫ ЖИДКОГО АЛЮМИНИЯ ПРИ БЫСТРОМ ОХЛАЖДЕНИИ

О. С. Трушин, В. С. Степанюк, А. А. Кацнельсон

(кафедра физики твердого тела)

Методом молекулярной динамики исследовано изменение структуры алюминия при быстром охлаждении расплава. Показано, что расщепление второго пика парной корреляционной функции наступает уже на стадии переохлажденной жидкости.

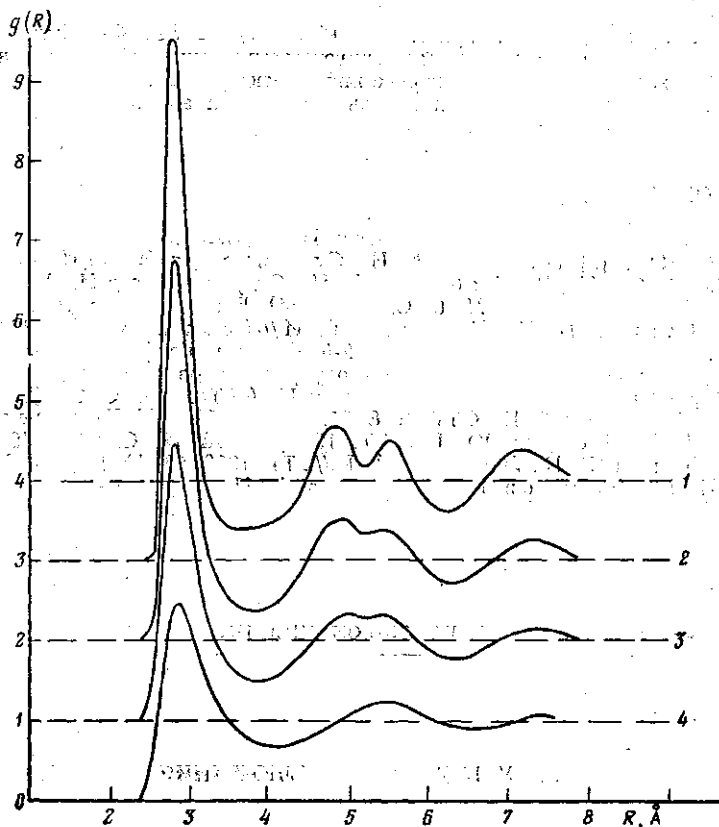
Зависимость структуры расплава от температуры уже изучалась в ряде работ [1—3]. Особый интерес вызывают структурные изменения при быстром охлаждении, которые возникают при получении аморфных металлов. Экспериментальные скорости охлаждения не превышают 10^{10} град·с $^{-1}$, что ограничивает круг металлов, которые могут быть получены в аморфной фазе.

Значительно дополняет эксперимент компьютерное моделирование [3]. При этом наиболее полно процессы структурных превращений прослеживаются методом молекулярной динамики [4].

В настоящей работе этим методом исследована зависимость структуры жидкого алюминия от температуры при быстром охлаждении. Потенциал межчастичного взаимодействия выбран в виде модифицированного потенциала Леннарда—Джонса:

$$V(R) = \epsilon \left[\frac{m}{n-m} \left(\frac{R_0}{R} \right)^n - \frac{n}{n-m} \left(\frac{R_0}{R} \right)^m \right], \quad (1)$$

где ϵ , m , n , R_0 — подгоночные параметры, полученные для ряда металлов в работе [5] с использованием экспериментальных данных для упругих свойств и энергии связи. Расчеты проведены в рамках NVE -ансамбля молекулярной динамики, в котором число частиц N , объем системы V и полная энергия E остаются постоянными.



Изменение функции радиального распределения при охлаждении жидкого алюминия: $T=90$ (1), 430 (2), 880 (3) и 1423 К (4)

В расчетной ячейке с периодическими граничными условиями, имеющей форму куба, рассмотрено движение 256 атомов, взаимодействующих по закону (1). Интегрирование уравнений движения проводилось методом «*leap-frog*» (с перешагиванием) [4], с временным шагом 10^{-15} с.

В исходном состоянии атомы были помещены в узлах ГЦК решетки и имели скорости, согласно распределению Максвелла, при начальной температуре. Объем ячейки выбран из условия равенства плотности системы экспериментальным данным при соответствующей температуре. В течение 3000 шагов система термостабилизировалась при температуре расплава $T=1423$ К.

Начиная с этой температуры система изохорически охлаждалась в течение 10 000 шагов до $T=80$ К путем масштабирования скоростей каждые 50 шагов. Средняя скорость охлаждения составила 10^{14} град·с $^{-1}$. Весь процесс включал в себя

этапы охлаждения и термостабилизации при нескольких температурах: 880, 430, 170 и 90 К. С использованием соотношения Эйнштейна для среднеквадратичного смещения атомов как функции времени:

$$\langle R^2 \rangle = 6Dt + C,$$

где t — время, C — константа, были найдены коэффициенты самодиффузии D при разных температурах. Полученные функции радиального распределения $g(r)$ (ФРР) усреднялись по 200 шагам.

Из анализа результатов, приведенных на рисунке, следует, что при охлаждении в модельной системе происходит постепенное изменение структуры и динамики частиц. Первый пик ФРР при этом не смещается, но становится выше. Второй пик превращается в плато при $T=880$ К, а затем при $T=430$ К начинает расщепляться. При этом коэффициент самодиффузии еще недостаточно велик: $D=7,0 \cdot 10^{-5}$ см²·с⁻¹. Отсюда можно заключить, что расщепление второго пика ФРР наступает уже на стадии переохлажденной жидкости, что также наблюдается при экспериментальных исследованиях [3].

В дальнейшем по мере уменьшения температуры расщепление второго пика проявляется отчетливее и диффузия убывает. В районе $T=90$ К коэффициент самодиффузии скачком уменьшился в 1000 раз. Это указывает на аморфизацию в модельной системе. Полученные результаты в целом согласуются с данными работы [6].

Таким образом, для относительно небольшого ансамбля частиц, взаимодействующих по закону (1), удалось проследить основные особенности структурных изменений в жидком алюминии при быстром охлаждении.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Ватолин Н. А., Пастухов Э. А. Дифракционные исследования строения высокотемпературных расплавов. М., 1980. [2] Татарнинова Л. И. Структура твердых аморфных и жидких веществ. М., 1983. [3] Полухин В. А., Ватолин Н. А. Моделирование аморфных металлов. М., 1985. [4] Хокни Р., Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц. М., 1987. [5] Zhen S., Davies G. J. // Phys. Stat. Sol. (a). 1983. 78. P. 595. [6] Полухин В. А., Дзугутов М. М. // Металлофизика. 1981. 3, № 3. С. 82.

Поступила в редакцию
15.02.89

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1989. Т. 30. № 5

УДК 537.531:535.3

ВЛИЯНИЕ ШУМА НА ОЦЕНКУ ПАРАМЕТРОВ БЛИЖНЕГО ПОРЯДКА В EXAFS-СПЕКТРОСКОПИИ

Ю. В. Пономарев, А. Б. Савельев

(кафедра общей физики и волновых процессов)

Для шума с пуассоновской статистикой получено выражение для среднего значения амплитуды шумовой гармоник в фурье-спектрах тонкой структуры $\langle |u| \rangle \sim 1/T$, где T — суммарное число зарегистрированных фотонов; проведено сравнение с экспериментальными спектрами.

1. EXAFS (ReflEXAFS)-спектроскопия является новым методом исследования ближнего порядка в веществе. Количество и качество структурной информации, извлекаемой из спектров поглощения или отражения, зависит от методов проведения эксперимента и обработки экспериментальных данных, которые в настоящее время достаточно хорошо разработаны [1, 2]. Достоверность же информации зависит от шума, который всегда присутствует в спектрах. Основными источниками шума после подавления технических флуктуаций являются детекторы рентгеновского излучения. Влияние шума становится определяющим при использовании лабораторных EXAFS-спектрометров с рентгеновскими трубками мощностью несколько киловатт [3], так как здесь, как правило, не удается достичь интенсивности рентгеновского излучения, сравнимой с интенсивностью синхротронного излучения, и задание минимально допу-