Приложение.

Подставив функцию $j(t)$ (12) в выражение для проводимости (13), найдем ее вещественную часть:

$$\mathrm{Re}\,\sigma(\omega) = 4\omega\left(\frac{T}{\gamma(r_s)}\right)^3 L(\omega), \tag{16}$$

где

$$L(\omega) = \int_0^\infty dt\,\frac{\sin(\omega t)}{t}\ln^3(w_0 t).$$

Сделаем замену переменной $\omega t=\xi$, тогда

$$L(\omega) = \int_0^\infty d\xi\,\frac{\sin\xi}{\xi}\ln^3\left(\frac{w_0}{\omega}\xi\right).$$

Множитель $\sin\xi/\xi$ фактически обрезает подынтегральную функцию на значениях $\xi\sim 1$, поэтому для оценки можно положить

$$L(\omega) \approx \int_0^1 d\xi\,\ln^3\left(\frac{w_0}{\omega}\xi\right) = \ln^3\frac{w_0}{\omega} - 3\ln^2\frac{w_0}{\omega} + 6\ln\frac{w_0}{\omega} - 6.$$

Так как $w_0/\omega\gg 1$ (см. (14)), то, полагая $\ln(w_0/\omega)\gg 1$, получаем

$$L(\omega) \approx \ln^3\frac{w_0}{\omega}. \tag{17}$$

Подставляя (17) в (16), приходим к формуле (15).

ЛИТЕРАТУРА

[1] Звягин И. П. Кинетические явления в неупорядоченных полупроводниках. М., 1984. [2] Pistoulet B., Roche F. M., Abdalla S.// Phys. Rev. 1984. **B30**, N 10. P. 5987. [3] Long A. R.// Phil. Mag. 1989. **59**, N 3. P. 377. [4] Шкловский Б. И., Эфрос А. Л. Электронная теория легированных полупроводников. М., 1982. [5] Шкловский Б. И.// ФТП. 1973. № 7. С. 112. [6] Гуляев Ю. В., Плесский В. П.// ЖЭТФ. 1972. **62**. С. 1156.

Поступила в редакцию
20.09.91

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1992. Т. 33, № 2

УДК 539.1

ОБ ОПРЕДЕЛЕНИИ ПАРАМЕТРОВ МЕЖАТОМНЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ В СПЛАВАХ С ГПУ СТРУКТУРОЙ

В. М. Силонов, О. В. Крисько, П. А. Каширин, Н. П. Каширина

(*кафедра физики твердого тела*)

Получен дополнительный член в выражении для интенсивности диффузного рассеяния рентгеновских лучей для сплавов с близкими радиусами соседних координационных сфер. Предложена методика определения параметров межатомных корреляций, соответствующих этим сферам.

Изучению межатомных корреляций в твердых растворах с использованием метода диффузного рассеяния рентгеновских лучей (ДРРЛ) посвящено большое число исследований [1]. В основном эти исследования проводились на ГЦК и ОЦК сплавах. Значительно меньшее число работ посвящено изучению сплавов с ГПУ структурой [2—10]. Для ГПУ сплавов характерна близость значений радиусов некоторых координационных сфер, что обусловливает невозможность применения традиционного анализа [1]. В ряде работ координационные сферы с близкими радиусами объединялись, и для них определялись эффективные значения параметров межатомных корреляций. Когда знаки объединяемых параметров различны, их эффективные значения могут оказаться близкими к нулю, хотя сами параметры могут быть значительными по величине.

Настоящая работа посвящена развитию метода расчета параметров межатомных корреляций для сплавов с близкими радиусами соседних координационных сфер.

В соответствии с [11], пренебрегая статическими смещениями, интенсивность ДРРЛ монокристаллическим сплавом можно записать в виде

$$I=N\sum_{\gamma\gamma'=1,2}(\Delta f)^2\Big[C(1-C)\,\delta_{\gamma\gamma'}+\sum_{\rho_{\gamma\gamma'}}\varepsilon(\rho_{\gamma\gamma'})\exp\{i\mathbf{Q}\rho_{\gamma\gamma'}\}\Big], \tag{1}$$

где $(\Delta f)^2$ — квадрат разности атомных факторов компонент, $\gamma=1,\ 2$ — номер узла в ячейке, C — концентрация, $\varepsilon(\rho_{\gamma\gamma'})$ — параметр корреляции, $\mathbf{Q}$ — вектор рассеяния, $\delta_{\gamma\gamma'}$ — символ Кронекера.

При изучении поликристаллических сплавов необходимо усреднить выражение (1) по всем ориентировкам вектора рассеяния:

$$I_p=\frac{1}{4\pi q^2}\int\limits_S I(q)\,dS, \tag{2}$$

где $q=4\pi\sin\theta/\lambda$, λ — длина волны рентгеновского излучения. Интегрирование в (2) проводится по поверхности сферы S радиуса q в пространстве обратной решетки. Учитывая, что $\varepsilon(-\rho)=\varepsilon(\rho)$, в результате интегрирования имеем

$$I_p=2N(\Delta f)^2\left[C(1-C)+\sum_{\rho_{11}^i}C_{11}^i\varepsilon(\rho_{11}^i)\frac{\sin q\rho_{11}^i}{q\rho_{11}^i}+\sum_{\rho_{12}^i}C_{12}^i\varepsilon(\rho_{12}^i)\frac{\sin q\rho_{12}^i}{q\rho_{12}^i}\right], \tag{3}$$

где C_{11}^i и C_{12}^i — координационные числа; $\varepsilon(\rho_{11}^i)$ — параметр корреляции для i-й координационной сферы атомов, располагающихся на узлах первой подрешетки; $\varepsilon(\rho_{12}^i)$ — то же, но для атомов, один из которых находится в узле первой подрешетки, а другие — на узлах второй подрешетки; ρ_{11}^i — радиус i-й координационной сферы в первой подрешетке; ρ_{12}^i — радиус i-й координационной сферы, соединяющий узлы первой подрешетки с узлами второй подрешетки.

Пусть радиусы ρ_{11}^1 и ρ_{12}^0 близки между собой. Соответствующий им суммарный вклад в интенсивность можно записать в виде

$$\frac{\Delta I}{2N(\Delta f)^2}=C_{11}^1\varepsilon(\rho_{11}^1)\frac{\sin q\rho_{11}^1}{q\rho_{11}^1}+C_{12}^0\varepsilon(\rho_{12}^0)\frac{\sin q\rho_{12}^0}{q\rho_{12}^0}. \tag{4}$$

Переходя от значений $\varepsilon(\rho_{12}^0)$ и $\varepsilon(\rho_{11}^1)$, а также ρ_{11}^1 и ρ_{12}^0 к их средним значениям и разностям, перепишем (4) в виде

$$\frac{\Delta I}{2N(\Delta f)^2}=C_{11}^1\left(\bar{\varepsilon}+\frac{\Delta\varepsilon}{2}\right)\frac{\sin q(\bar{\rho}+\Delta\rho/2)}{q(\bar{\rho}+\Delta\rho/2)}+$$

$$+C_{12}^0\left(\bar{\varepsilon}-\frac{\Delta\varepsilon}{2}\right)\frac{\sin q(\bar{\rho}-\Delta\rho/2)}{q(\bar{\rho}-\Delta\rho/2)},\tag{5}$$

где

$$\bar{\varepsilon}=[C_{11}^1\varepsilon(\rho_{11}^1)+C_{12}^0\varepsilon(\rho_{12}^0)]/2,\tag{6}$$

$$\Delta\varepsilon=C_{11}^1\varepsilon(\rho_{11}^1)-C_{12}^0\varepsilon(\rho_{12}^0),\tag{7}$$

$$\bar{\rho}=(\rho_{11}^1+\rho_{12}^0)/2,\tag{8}$$

$$\Delta\rho=\rho_{11}^1-\rho_{12}^0.\tag{9}$$

Преобразуя выражение (5), можно записать

$$\frac{\Delta I}{2N(\Delta f)^2}=\bar{\varepsilon}_{\text{eff}}\cos q\frac{\Delta\rho}{2}\frac{\sin q\bar{\rho}}{q\bar{\rho}}+\Delta\varepsilon_{\text{eff}}\sin q\frac{\Delta\rho}{2}\frac{\cos q\bar{\rho}}{q\bar{\rho}},\tag{10}$$

где

$$\bar{\varepsilon}_{\text{eff}}=\frac{1}{\bar{\rho}}C_{11}^1\varepsilon(\rho_{11}^1)\rho_{12}^0+C_{12}^0\varepsilon(\rho_{12}^0)\rho_{11}^1,\tag{11}$$

$$\Delta\varepsilon_{\text{eff}}=\frac{1}{\bar{\rho}}C_{11}^1\varepsilon(\rho_{11}^1)\rho_{12}^0-C_{12}^0\varepsilon(\rho_{12}^0)\rho_{11}^1.\tag{12}$$

При получении (10) мы пренебрегли членом $(\Delta\rho/2)^2/\bar{\rho}^2$. Поэтому условием применимости выражения (10) является неравенство

$$\frac{(\Delta\rho/2)^2}{\bar{\rho}^2}\ll 1.\tag{13}$$

Очевидно, что условие (13) соблюдается по крайней мере для $\Delta\rho<$ $<0{,}5$ Å (для кадмия $\Delta\rho\sim 0{,}3$). С другой стороны, если $\Delta\rho\sim 0{,}01$ (магний), выражение (10) переходит в использовавшееся ранее, однако с иным способом усреднения радиусов сфер и параметров корреляций.

Представляется, что предлагаемый в данной работе способ усреднения этих величин является более последовательным.

Численные оценки показывают, что в случае разных знаков параметров $\varepsilon(\rho_{11}^1)$ и $\varepsilon(\rho_{12}^0)$ величина второго слагаемого (10) может существенно превышать вклад первого слагаемого. Поэтому при проведении исследований межатомных корреляций в сплавах с близкими соседними радиусами координационных сфер необходимо учитывать член, пропорциональный $\cos q\bar{\rho}/q\bar{\rho}$.

Из выражения (10) следует, что угловые зависимости обоих слагаемых качественно различаются между собой. Поэтому при определении параметров межатомных корреляций, например с помощью метода наименьших квадратов, предлагается определять не сами параметры $\varepsilon(\rho_{11}^1)$ и $\varepsilon(\rho_{12}^0)$, а значения $\bar{\varepsilon}_{\text{eff}}$ и $\Delta\varepsilon_{\text{eff}}$ и далее находить искомые параметры с помощью соотношений (11) и (12).

Ранее определялись лишь эффективные значения параметров, причем способы усреднения параметров и соответствующих им радиусов имели вид

$$\varepsilon_{ij}=\frac{C_i\varepsilon_i\sin(qr_i)/qr_i+C_j\varepsilon_j\sin(qr_j)/qr_j}{(C_i+C_j)\sin(q\bar{r}_{ij})/q\bar{r}_{ij}}, \tag{14}$$

$$\bar{r}_{ij}=(C_ir_i+C_jr_j)/(C_i+C_j). \tag{15}$$

Данные способы усреднения представляются недостаточно точными. Их использование может приводить к дополнительным ошибкам в определении параметров межатомных корреляций.

Таким образом, в работе в рамках метода ДРРЛ получено выражение дополнительного члена в формуле для интенсивности ДРРЛ неупорядоченных сплавов, характеризуемых существенной близостью радиусов некоторых координационных сфер, и предложен способ раздельного определения соответствующих параметров межатомных корреляций. Для случая близких координационных сфер введены определения, отличные от традиционно используемых, для эффективных параметров межатомных корреляций.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Иверонова В. И., Кацнельсон А. А. Ближний порядок в твердых растворах. М., 1977. [2] Германов Е. П., Шиврин О. Н.//ФММ. 1970. **30.** С. 892. [3] Frantz C., Cantois M.//J. Appl. Cryst. 1971. **4.** P. 387. [4] Frantz C., Cantois M., Caer L.//J. Appl. Cryst. 1970. **3.** P. 123. [5] Бернард В. Б., Веремчук С. А., Кацнельсон А. А., Куприна В. В.//ФММ. 1974. **37.** С. 216. [6] Веремчук С. А., Кацнельсон А. А., Авдюхина В. М., Свешников С. В.//ФММ. 1975. **39.** С. 1324. [7] Сафронова Л. А., Кацнельсон А. А., Свешников С. В., Львов Ю. М.//ФММ. 1977. **43.** С. 76. [8] Кацнельсон А. А., Мехрабов А. О. О., Силонов В. М.//ФММ. 1979. **47.** С. 993. [9] Генчева Д. С., Кацнельсон А. А., Рохлин Л. Л. и др.//ФММ. 1981. **51.** С. 788. [10] Бернард В. Б., Кацнельсон А. А., Силонов В. М., Хрущов М. М.//ФММ. 1981. **52.** С. 357. [11] Кривоглаз М. А., Тю Хао//Дефекты и свойства кристаллической решетки. Киев, 1968. С. 63.

Поступила в редакцию
05.12.91