

излучения приводит к возникновению особого типа лазерных спеклов.

В случае лезвия падающий пучок излучения возбуждает ПЭВ вблизи края. Она распространяется вдоль края и в свою очередь через скин-слой металла на микрорёбре режущей площадки возбуждает краевые плазмоны и поляритоны [3]. Они распространяются вдоль режущей площадки (как по открытому волноводу) до тех пор, пока (на длине свободного пробега) не столкнутся с микровыступами или микровпадинами площадки. Срыв краевых ПЭВ — нерезонансный, широкополосный по направлениям волнового вектора процесс. Он приводит к возникновению вторичного — краевого — объемного электромагнитного излучения той же самой частоты. Фазовый хаос этих волн порождает систему кольцевидных КЛС, обнаруженных в эксперименте [1]. Так как поверхностная ПЭВ возбуждается резонансно на дифракционной решетке вблизи края лезвия, то это и объясняет физическую сущность обнаруженного нами нового в оптике спеклов явления — местного резонансного усиления интенсивности кольцевидных

КЛС. Встреча неподвижного пучка лазерного излучения с резонансной дифракционной решеткой при смещении лезвия вдоль его края — событие случайное и, в принципе, достаточно редкое, оно и приводит к всплескам интенсивности кольцевидных КЛС в эксперименте.

#### Литература

1. Васильев Ю.В., Козарь А.В., Курицына Е.Ф., Лукьянов А.Е. // ЖТФ. 1998. 68, № 7. С. 139.
2. Франсон М. Оптика спеклов. М., 1980.
3. Поверхностные поляритоны / Под ред. В. М. Аграновича, Д. Л. Миллса. М., 1985.
4. Васильев Ю.В., Курицына Е.Ф., Лукьянов А.Е. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1997. №1. С. 73 (Moscow University Phys. Bull. 1997. No. 1. P. 102).
5. Герчиков А.Б. // Химия и жизнь. 1982. № 11. С. 87.
6. Либенсон М.Н. // Соросовский образовательный журнал. 1996. № 10. С. 92.

Поступила в редакцию  
18.12.98

## ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

УДК 538.951

### КОРРЕЛЯЦИЯ МЕЖДУ ЭНЕРГИЯМИ СВЯЗИ И МЕЖАТОМНЫМИ РАССТОЯНИЯМИ В КРИСТАЛЛАХ И АТОМНЫХ КЛАСТЕРАХ

Д. В. Цивлин, В. С. Степанюк, Н. А. Леванов, В. Хергергт, А. А. Кацнельсон

(кафедра физики твердого тела)

Теоретически исследованы зависимости от атомного номера основных характеристик октаэдрических кластеров 10 простых и переходных ГЦК металлов. Обнаружено их сходство с аналогичными зависимостями для кристаллов. Это сходство дает основания считать октокластер элементарной структурной единицей кристалла, несущей важнейшую информацию о характере межатомных взаимодействий в нем.

Проблема миниатюризации элементной базы приборов — одна из важнейших в настоящее время. В этой связи принципиальное значение имеет вопрос о том, каким может быть минимальный кластер, воспроизводящий если не собственно физические характеристики кристаллов, то хотя бы тенденции в изменении этих характеристик. Для его анализа попытаемся найти и обсудить корреляции между такими важнейшими характеристиками кристаллов и кластеров, как равновесные межатомные расстояния и равновесные значения энергии связи.

Структурные характеристики кристаллов определяются их межатомными взаимодействиями. Поэтому атомные радиусы, энергия связи и другие обусловленные ими характеристики вполне закономерно меняются с изменением атомного номера элемента при условии, что сравниваются характеристики элементов с одинаковым типом связи [1, 2]. В то же время хорошо известно, что энергия связи металла определяется вкладами межионных взаимодействий, обменной и корреляционной энергией, кинетической энергией свободных электронов, зонной энергией [1, 3].

Анализ показывает, что среди вкладов межионных взаимодействий в энергию системы преобладающим является вклад ближайших соседей. Сравнительно небольшим оказывается вклад зонной энергии. Поэтому можно допустить, что хорошо известные закономерности изменения атомных радиусов  $r_a$  и энергии связи  $E_b$  кристаллов при изменении атомного номера будут наблюдаться и для атомных кластеров. Однако поскольку суммарная величина энергии связи определяется конкуренцией указанных выше составляющих, то справедливость этого допущения заранее не очевидна. Данная работа посвящена выяснению справедливости указанной гипотезы, иными словами, установлению корреляции между изменениями  $r_a$  и  $E_b$  в кристаллах и кластерах.

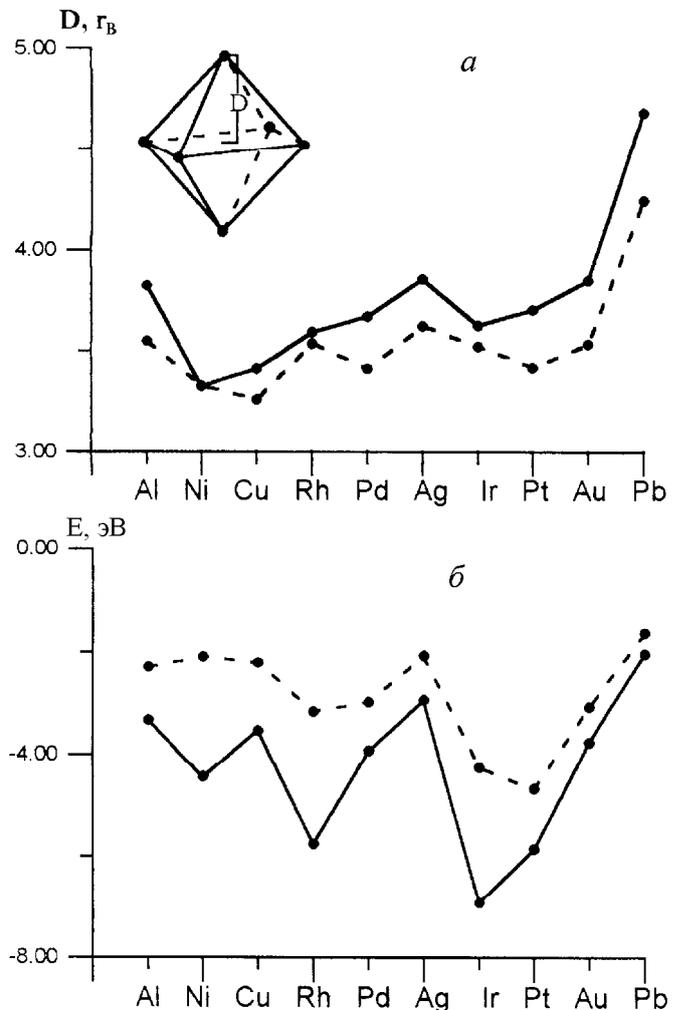
В качестве кластера нам представляется разумным выбрать наименьшую группу атомов, точечная группа симметрии которой будет совпадать с точечной группой симметрии кристалла. Только в этом случае взаимное расположение атомов в кластере (ближний порядок в их расположении) будет близким к взаимному расположению соседних атомов в кристал-

ле. Поскольку все сравниваемые металлы (Al, Ni, Cu, Rh, Pd, Ag, Ir, Pt, Au, Pb) обладают ГЦК решеткой, в качестве исследуемого кластера оказалось целесообразным выбрать 6-атомный октаэдрический кластер, точечная группа симметрии которого  $O_h$  совпадает с точечной группой симметрии ГЦК кристалла [2]. Отметим, что ранее сходный расчет, но только для переходных 3d-металлов (от Sc до Cu), был проведен в работе [4], причем были получены данные, свидетельствующие о существовании корреляции между  $r_a$  и  $E_b$  для кристаллов и октаэдрических кластеров 3d-металлов. В нашей работе рассматриваются металлы из разных групп и рядов таблицы Менделеева.

Расчеты энергии связи и атомных радиусов кластеров проводились в рамках молекулярной динамики с использованием многочастичных межатомных потенциалов, развитых в приближении сильной связи [5]. Уравнения движения решались численно с временным шагом  $2 \cdot 10^{-15}$  с. Поиск глобального минимума энергии системы выполнялся по алгоритму наискорейшего спуска. Система многократно нагревалась до температуры выше точки плавления и затем быстро охлаждалась. При этом скорости частиц, движущихся против направления действующей силы, обращались в нуль. При каждом охлаждении потенциальная энергия системы достигала какого-либо из локальных минимумов, и самый глубокий из них рассматривался как глобальный.

Результаты расчета (рисунок) показывают, что зависимости как межатомного расстояния, так и энергии связи 6-атомного кластера от атомного номера практически совпадают с аналогичными зависимостями для кристалла. Весьма примечательно, что аналогичный характер зависимостей  $r_a$  и  $E_b$  для кристалла и октаэдрического кластера наблюдается для разных групп металлов: простых (Al и Pb), переходных — сравнительно легких (Ni, Cu), средних (Rh, Pd, Ag) и достаточно тяжелых (Ir, Pt, Au). Это означает, что обнаруженные корреляции имеют достаточно общий характер. Интересно, что весьма низкими оказались и флуктуации отношений  $r_{a,cl}/r_{a,cr}$  и  $E_{b,cl}/E_{b,cr}$ , средние значения которых достигают соответственно 3% и 15%. Столь низкий разброс значений этих отношений является безусловным доказательством существования корреляции между рассмотренными выше структурными характеристиками.

Полученные результаты являются отнюдь не тривиальными. Выше указывалось, что различные составляющие полной энергии имеют разные знаки, а величины этих составляющих могут превышать результирующие значения. Поэтому практическая независимость отношений  $r_{a,cl}/r_{a,cr}$  и  $E_{b,cl}/E_{b,cr}$  от атомного номера может быть лишь следствием глубинных свойств твердого тела [6]. Известно, что разрушение дальнего порядка в кристаллах при появлении беспорядка происходит путем нарушения дальних межатомных корреляций при сохранении ближних. Полученный в данной работе результат является следствием этого же принципа, поскольку при переходе от кристалла к октаэдрическому кластеру раз-



Зависимости от атомного номера высоты в кластере  $D$  (а, вид кластера показан вверху слева) и энергии связи  $E$  для кристалла и кластера (б); сплошная линия относится к кристаллу, пунктирная — к кластеру

рушается дальний порядок, но сохраняется ближний. Обратный переход — от кластера к кристаллу — может рассматриваться как своеобразная самосборка макросистемы из микрокластеров. При этом если в макросистеме удается установиться равновесие, то возникают кристаллы, а если не удается, то возникают аморфные тела. Таким образом, октаэдрический 6-атомный кластер, одинаковый с ГЦК кристаллом по точечной группе симметрии, может рассматриваться как своеобразный «ген» кристалла.

Работа поддержана грантом INTAS 96-0606.

#### Литература

1. Ашкрофт Н.В., Мермин Н.Д. Физика твердого тела. М., 1981.
2. Кацнельсон А.А. Введение в физику твердого тела. М., 1984.
3. Кацнельсон А.А., Степанов В.С., Фарберович О.В., Сас А. Электронная теория конденсированных сред. М., 1991.
4. Painter G.S. // Phys. Rev. Lett. 1989. 70. P. 3959.
5. Rossato V., Guillope V., Legrand B. // Phil. Mag. 1989. 59. P. 321.
6. Карери Дж. Порядок и беспорядок. М., 1985.

Поступила в редакцию  
06.08.98