

## ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

УДК 539.1

## РАСЧЕТ УПРУГИХ ПОСТОЯННЫХ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ

В. М. Силонов, С. Ю. Родин, Л. Энхтор

(кафедра физики твердого тела)

Рассчитаны упругие постоянные переходных двух-, трех- и четырехкомпонентных сплавов. Расчет основан на вычислении методом модельного потенциала двадцати радиальных и тангенциальных силовых постоянных. Рассчитанные значения постоянных удовлетворительно согласуются с экспериментальными. Результаты свидетельствуют о возможности применения метода модельного потенциала для определения концентрационных зависимостей упругих постоянных. Отмечается важная роль точности определения значений радиусов координационных сфер.

В работе [1] предложена модель, позволяющая рассчитывать фоновые спектры, плотность фоновых состояний, упругие постоянные кристаллов, дебаевскую температуру и другие характеристики. В этой модели основополагающее значение играют силовые постоянные (СП), которые зависят от эффективных сил межатомного взаимодействия. В работах [2–4] СП для металлов определялись из экспериментальных значений упругих постоянных и из фоновых спектров металлов. При этом предпринимались попытки определять СП сплавов посредством усреднения по концентрации СП чистых металлов и использовать полученные значения для расчета характеристик сплавов. В этих и других ранних работах предполагался короткодействующий характер сил межатомного взаимодействия. С развитием квантовомеханических методов, в частности метода модельного потенциала, появилась возможность расчета СП металлов с учетом дальнего действия этих сил. В работах [5, 6] были предприняты попытки расчета силовых и упругих постоянных переходных металлов Ni, Pd и сплавов Ni<sub>0,55</sub>Pd<sub>0,45</sub> и Co<sub>0,92</sub>Fe<sub>0,08</sub> методом модельного потенциала [7], параметры которого определялись путем подгонки рассчитанных и экспериментально определенных фоновых спектров. В этих работах с использованием определенных теоретически упругих постоянных и учетом взаимодействия до десятой координационной сферы рассчитывались фоновые спектры, плотность фоновых состояний и температурная зависимость характеристической дебаевской температуры.

В работе [8] применение модельных потенциалов [7] позволило описать почти всю совокупность знаков параметров ближнего порядка для первой координационной сферы бинарных сплавов переходных металлов. Все это говорит о возможности использования метода модельного потенциала для расчета характеристик металлов и сплавов, связанных с дальнедействующим межатомным взаимодействием. Расчет упругих постоянных важен также и для описания фурье-компонент полей статических смещений, без адекватного учета которых невозможно коррект-

ное определение параметров межатомных корреляций в сплавах [9, 10].

Целью настоящей работы было распространение методики [5, 6] на многокомпонентные сплавы.

## Методика расчета

В рамках теории псевдопотенциала энергию межатомного взаимодействия атомов кристалла можно представить в виде [11]

$$F(r) = \frac{Z^2 e^2}{r} - \frac{2Z^2 e^2}{\pi} \int_0^\infty G(q) \frac{\sin qr}{qr} dq.$$

Здесь  $Z$  — валентность,  $e$  — заряд электрона,  $q$  — модуль волнового вектора,  $r$  — межатомное расстояние,  $G(q)$  — нормированная характеристическая функция:

$$G(q) = \left[ \frac{4\pi Z e^2}{\Omega q^2} \right]^{-2} \frac{W(q)^2}{1 - f(q)} \left( 1 - \frac{1}{\epsilon(q)} \right),$$

где  $W(q)$  — незранированный ионный потенциал,  $\epsilon(q)$  — диэлектрическая проницаемость,  $\Omega$  — атомный объем,  $f(q)$  — обменно-корреляционная поправка,

$$\epsilon(q) = 1 + [1 + f(q)] \frac{4\pi Z e^2}{\Omega q^2} \left( \frac{2}{3} E_F \right)^{-1} \times \\ \times \left[ \frac{1}{2} + \frac{4k_F^2 - q^2}{8k_F q} \ln \left| \frac{2k_F + q}{2k_F - q} \right| \right],$$

$E_F = \hbar k_F^2 / (2m^*)$ ,  $m^*$  — эффективная масса электрона, поправка на обмен и корреляцию выбиралась согласно Хаббарду и Шему:  $f(q) = q^2 / [2(q^2 + k_F^2 + k_s^2)]$ ,  $k_s^2 = 2k_F / \pi$ ,  $k_F$  — импульс Ферми.

В настоящей работе используется формфактор модельного потенциала переходных металлов [7]:

$$W(q, \mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{B(q) + F(q, \mathbf{k}, \mathbf{k}')}{\epsilon(q)}.$$

Здесь  $B(q)$  — локальная часть,  $F(q, \mathbf{k}, \mathbf{k}')$  — нелокальная часть фактора (эти выражения не приводятся полностью ввиду их громоздкости).

В случае центральных взаимодействий, исходя из межатомного потенциала  $F(r)$ , можно определить два типа независимых СП [12]:

$$\frac{1}{r} \frac{dF}{dr} = -\frac{Z^2 e^2}{\pi r^2} - \frac{2Z^2 e^2}{\pi r^2} \int_0^\infty G(q) \left( \cos qr - \frac{\sin qr}{qr} \right) dq, \quad (1)$$

$$\frac{d^2 F}{dr^2} = \frac{2Z^2 e^2}{r^3} - \frac{2Z^2 e^2}{\pi r} \times \int_0^\infty G(q) \left( \frac{2 \sin qr}{qr^2} - \frac{2 \cos qr}{r} - q \sin qr \right) dq. \quad (2)$$

Эти СП обычно обозначаются следующим образом:  $\alpha_i = [d^2 F/dr^2]_{r_i}$  — радиальные СП,  $\beta_i = [(1/r)dF/dr]_{r_i}$  — тангенциальные СП, индекс  $i$  здесь обозначает номер координационной сферы.

Используя вычисленные значения СП сплава, можно составить динамическую матрицу  $D(q)$  и определить значения фоновых частот в результате решения уравнения

$$|D(q) - 4\pi M \nu^2 I| = 0, \quad (3)$$

где  $\nu$  — фоновая частота,  $I$  — единичная матрица,  $M$  — масса иона. Для расчета упругих постоянных с использованием элементов динамической матрицы  $D(q)$  применяется длинноволновое приближение [6]. В результате перехода к пределу при  $q \rightarrow 0$  получаются следующие соотношения:

$$\begin{aligned} C_{11} &= \frac{1}{a} \left( 2\alpha_1 + 2\beta_1 + 4\alpha_2 + 12\alpha_3 + 12\beta_3 + 8\alpha_4 + \right. \\ &+ 8\beta_4 + \frac{164}{5}\alpha_5 - \frac{328}{5}\beta_5 + \frac{16}{3}\alpha_6 + \frac{32}{3}\beta_6 + \\ &+ 56\alpha_7 + 56\beta_7 + 32\alpha_8 - 16\beta_8 + \frac{226}{3}\alpha_9 - \\ &\left. - \frac{136}{3}\beta_9 + \frac{256}{5}\alpha_{10} + \frac{144}{5}\beta_{10} \right), \\ C_{12} &= \frac{1}{a} \left( \alpha_1 - 5\beta_1 - 4\beta_2 + 6\alpha_3 - 30\beta_3 + 4\alpha_4 - \right. \\ &- 20\beta_4 + \frac{54}{5}\alpha_5 + 22\beta_5 + \frac{16}{3}\alpha_6 - \frac{64}{3}\beta_6 - \\ &- \frac{268}{7}\alpha_7 + \frac{124}{7}\beta_7 - 16\beta_8 + \frac{49}{3}\alpha_9 - \\ &\left. - \frac{139}{3}\beta_9 + 80\beta_{10} \right), \\ C_{44} &= \frac{1}{a} \left( \alpha_1 + 3\beta_1 + 4\beta_2 + 6\alpha_3 + 18\beta_3 + 4\alpha_4 + \right. \\ &+ 12\beta_4 + \frac{18}{5}\alpha_5 - \frac{182}{5}\beta_5 + \frac{16}{3}\alpha_6 + \frac{32}{3}\beta_6 + \\ &+ 28\alpha_7 + 84\beta_7 + 16\beta_8 + \frac{49}{3}\alpha_9 + \frac{41}{3}\beta_9 + \\ &\left. + \frac{64}{5}\alpha_{10} + \frac{336}{5}\beta_{10} \right). \end{aligned} \quad (4)$$

Эти выражения позволяют по двадцати значениям радиальных и тангенциальных СП проводить расчет упругих постоянных металлов и сплавов с гранцентрированной кубической решеткой.

В случае многокомпонентных сплавов тангенциальные  $\alpha_i^{\text{alloy}}$  и радиальные  $\beta_i^{\text{alloy}}$  СП определялись с помощью усреднения по концентрации:

$$\alpha_i^{\text{alloy}} = \sum_{j=1}^n \alpha_{ij} C_j, \quad \beta_i^{\text{alloy}} = \sum_{j=1}^n \beta_{ij} C_j, \quad (5)$$

где  $n$  — число компонент сплава,  $C_j$  — атомная концентрация  $j$ -й компоненты,  $i$  — номер координационной сферы. Упругие постоянные многокомпонентного сплава находились путем использования СП (5) и выражений (4). Отметим, что в многокомпонентных сплавах, как правило, компоненты имеют различную кристаллическую структуру и для некоторых структур данные об упругих постоянных либо отсутствуют, либо в принципе не могут быть найдены экспериментально. В то же время в рамках метода модельного потенциала СП компонент могут быть рассчитаны как для любых значений радиусов координационных сфер, так и для любой кристаллической структуры, в частности и для тех структур, которые не характерны для компонент, входящих в состав сплава.

По предложенной схеме проводился расчет упругих постоянных бинарных, трехкомпонентных и четырехкомпонентных сплавов, для которых известны экспериментальные значения упругих постоянных. В качестве бинарных сплавов были выбраны  $\text{Cu}_{0,75}\text{Zn}_{0,25}$ ,  $\text{Ni}_{0,804}\text{Cr}_{0,196}$ ,  $\text{Ni}_{0,502}\text{Fe}_{0,498}$ ,  $\text{Ni}_{0,738}\text{Fe}_{0,262}$  и  $\text{Ni}_{0,892}\text{Fe}_{0,108}$ . Таким же образом проводились расчеты трехкомпонентных сплавов  $\text{Fe}_{0,76}\text{Cr}_{0,12}\text{Ni}_{0,12}$ ,  $\text{Fe}_{0,705}\text{Cr}_{0,175}\text{Ni}_{0,120}$  и четырехкомпонентного  $\text{Fe}_{0,685}\text{Cr}_{0,145}\text{Ni}_{0,145}\text{Mo}_{0,025}$ .

### Результаты расчета

С целью проверки выражений (1)–(5) предварительно проводился расчет СП и упругих постоянных никеля. Рассчитанные значения радиальных и тангенциальных СП никеля (табл. 1) практически совпадают с данными [6]. Обращает на себя внимание то, что вклад первой координационной сферы на два порядка превышает вклады большинства других координационных сфер. Однако из соотношений (4) видно, что это превышение компенсируется величиной коэффициентов, стоящих перед СП. Результаты расчета упругих постоянных для никеля в настоящей работе и в работе [6], а также значения параметра решетки, использованные при вычислении радиусов координационных сфер  $r_i = a\sqrt{2i}/2$ , приведены в табл. 2. Следует отметить, что рассчитанные СП сильно зависят от точности определения радиусов координационных сфер, т. е. от точности измерения параметров кристаллической решетки. Приведенные в табл. 2 рассчитанные упругие постоянные для никеля близки к экспериментальным данным [13].

Таблица 1  
Тангенциальные  $\alpha_i$  и радиальные  $\beta_i$   
силовые постоянные никеля  
(в дин/см)

$i$	$\alpha_i$	$\beta_i$
1	41100,0	-3453,0
2	299,7	-36,1
3	56,8	92,9
4	-645,8	9,0
5	186,9	-15,1
6	161,3	8,2
7	-168,1	5,6
8	-89,8	-5,1
9	100,9	-4,0
10	85,6	2,0

В табл. 2 приведены также результаты расчета упругих постоянных бинарных сплавов  $\text{Cu}_{0,75}\text{Zn}_{0,25}$ ,  $\text{Ni}_{0,804}\text{Cr}_{0,196}$ ,  $\text{Ni}_{0,502}\text{Fe}_{0,498}$ ,  $\text{Ni}_{0,738}\text{Fe}_{0,262}$ ,  $\text{Ni}_{0,892}\text{Fe}_{0,108}$  и экспериментальные данные [13, 14].

Таблица 2  
Упругие постоянные никеля и различных сплавов  
(в  $10^{11}$  дин/см<sup>2</sup>)

Сплав	$a$ , Å	Расчет			Эксперимент [13, 14]		
		$C_{11}$	$C_{12}$	$C_{44}$	$C_{11}$	$C_{12}$	$C_{44}$
Ni	3,5165	23,2	18,3	8,9	24,6	15,0	12,2
Ni [6]	3,5165	22,8	17,8	8,7			
$\text{Cu}_{0,75}\text{Zn}_{0,25}$	3,670	14,7	13,0	5,0	14,5	10,7	7,1
$\text{Ni}_{0,804}\text{Cr}_{0,196}$	3,540	24,5	19,1	8,8	24,7	15,4	12,2
$\text{Ni}_{0,502}\text{Fe}_{0,498}$	3,578	20,7	14,1	7,4	20,5	14,6	10,8
$\text{Ni}_{0,738}\text{Fe}_{0,262}$	3,549	22,4	16,3	7,8	23,0	14,4	11,9
$\text{Ni}_{0,892}\text{Fe}_{0,108}$	3,528	23,0	18,1	8,6	25,5	15,3	13,0
$\text{Fe}_{0,76}\text{Cr}_{0,12}\text{Ni}_{0,12}$	3,570	22,9	15,0	8,2	23,3	16,3	12,3
$\text{Fe}_{0,705}\text{Cr}_{0,175}\text{Ni}_{0,120}$	3,585	22,2	15,2	8,2	21,6	14,4	12,9
$\text{Fe}_{0,685}\text{Cr}_{0,145}\text{Ni}_{0,145}\text{Mo}_{0,025}$	3,560	22,6	12,9	7,3	20,4	13,4	12,9

Можно отметить, что в случае сплавов Ni-Fe по мере роста содержания никеля экспериментальные и рассчитанные значения упругих постоянных  $C_{11}$  и  $C_{44}$  растут. При переходе от сплава  $\text{Ni}_{0,502}\text{Fe}_{0,498}$  к  $\text{Ni}_{0,738}\text{Fe}_{0,262}$  экспериментальное значение  $C_{12}$  практически не меняется, а рассчитанное значение  $C_{12}$

растет. Это расхождение может быть связано и с неточностями экспериментального определения упругих постоянных. В целом для всех сплавов наблюдается удовлетворительное согласие вычисленных и экспериментальных значений.

Результаты настоящей работы свидетельствуют о том, что методом модельного потенциала можно рассчитывать концентрационные зависимости упругих постоянных сплавов.

Рассчитанные и экспериментальные упругие постоянные для трехкомпонентных сплавов  $\text{Fe}_{0,76}\text{Cr}_{0,12}\text{Ni}_{0,12}$ ,  $\text{Fe}_{0,705}\text{Cr}_{0,175}\text{Ni}_{0,120}$ , четырехкомпонентного сплава  $\text{Fe}_{0,685}\text{Cr}_{0,145}\text{Ni}_{0,145}\text{Mo}_{0,025}$  (см. табл. 2) также удовлетворительно согласуются друг с другом.

#### Литература

1. *Launey J. de* // Solid State Phys. 1956. **2**. P. 219.
2. *Garg S., Gupta H.G., Tripathi B.B.* // Solid State Commun. 1985. **56**. P. 519.
3. *Garg S., Gupta H.G.* // Phys. Stat. Solidi (b). 1986. **136**. P. 453.
4. *Garg S., Gupta H.G., Bansal T.K., Tripathi B.B.* // J. Phys. F. 1985. **15**. P. 1895.
5. *Shyam R., Upadhyaya S.C., Upadhyaya J.C.* // Phys. Stat. Solidi (b). 1990. **161**. P. 565.
6. *Upadhyaya S.C., Upadhyaya J.C., Shyam R.* // Phys. Rev. 1991. **B44**. P. 122.
7. *Animalu A.O.E.* // Phys. Rev. 1973. **B8**. P. 3542.
8. *Силонов В.М.* Физика сплавов. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1994.
9. *Кривоглаз М.А.* Теория рассеяния рентгеновских лучей и тепловых нейтронов реальными кристаллами. М.: Наука, 1967.
10. *Кацнельсон А.А., Крисько О.В., Силонов В.М., Скоробогатова Т.В.* Деп. ВИНТИ. М., 1984. № 4751.
11. *Харрисон У.А.* Псевдопотенциальная теория металлов. М.: Мир, 1968.
12. *Shyu W.M., Gaspari G.D.* // Phys. Rev. 1968. **170**. P. 687.
13. *Францевич И.Н., Воронов Ф.Ф., Бакута С.А.* Упругие постоянные и модули упругости металлов и неметаллов. Киев: Наукова думка, 1982.
14. *Landolt-Börnstein.* Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology. Berlin. V. 11. 1979; V. 18. 1984.

Поступила в редакцию  
09.06.99