

Взаимная корреляция синхронных последовательностей при $\Delta\varphi_1(t_1) = \Delta\varphi_2(t_1)$ составляла 95%. На рис. 3 показан фрагмент формируемых потоков (а) и соответствующая ему функция автокорреляции (б). Фрактальная случайность потоков, типичная для динамического хаоса, инвариантна к частоте выборок Ω_s .

Литература

1. Месси Д.Л. // ТИИЭР. 1988. **76**, № 5. С. 24.
2. Евдокимов Н.В., Комолов В.П. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2000. № 5. С. 57 (Moscow University Phys. Bull. 2000. No. 5. P. 68).

3. Мартынов Е.М. Синхронизация в системах передачи дискретных сообщений. М.: Связь, 1972.
4. Шустер Г. Детерминированный хаос. М.: Мир, 1988.
5. Каплан А.Е., Кравцов Ю.А., Рылов В.А. Параметрические генераторы и делители частоты. М.: Сов. радио, 1966.
6. Евдокимов Н.В., Клышко Д.Н., Комолов В.П., Ярочкин В.А. // УФН. 1996. **166**, № 1. С. 91.
7. Евдокимов Н.В., Клышко Д.Н., Комолов В.П., Ярочкин В.А. Описание к патенту RU 2117402 С1. 1998.
8. Шило В.Л. Популярные цифровые микросхемы. М.: Радио и связь, 1989.

Поступила в редакцию
20.11.00

ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

УДК 539.1

ОСОБЕННОСТИ СТАТИЧЕСКИХ СМЕЩЕНИЙ ВОКРУГ ОДИНОЧНЫХ ПРИМЕСНЫХ АТОМОВ В ОЦК РЕШЕТКЕ

В. М. Силонов, И. В. Харламова, А. Ю. Гениев

(кафедра физики твердого тела)

E-mail: silonov_v@mail.ru

Для ОЦК структуры в микроскопическом приближении выявлена нехаотичность в расположении векторов смещений атомов матрицы вокруг одиночных примесных атомов замещения.

В работе [1] были предприняты попытки расчета полей статических смещений вокруг точечных дефектов в ГЦК структуре. При этом рассматривались лишь дефекты в твердом аргоне. В работах [2–4] в рамках макроскопической теории проводились расчеты статических смещений вдали от дефектов. В настоящей работе рассчитаны поля статических смещений в ОЦК металлах вблизи одиночной примеси замещения в рамках модели Борна–Бегби с целью выявления их возможных особенностей в ОЦК структуре.

В рамках метода флуктуационных волн [5] при внесении одного дефекта в кристалл его атомы смещаются из узлов идеальной периодической решетки на величину

$$\delta\mathbf{R}_s(\mathbf{r}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{A}_{\mathbf{k}} \sin \mathbf{k}\mathbf{r}, \quad (1)$$

где \mathbf{k} — волновой вектор волны смещений, \mathbf{R}_s — вектор s -го узла идеальной решетки кристалла, N — число точек суммирования в зоне Бриллюэна. Амплитуды волн статических смещений $\mathbf{A}_{\mathbf{k}}$ могут быть найдены в результате решения системы линейных уравнений

$$D_{\mathbf{k}i\mathbf{j}} \mathbf{A}_{\mathbf{k}j} = \mathbf{P}_{\mathbf{k}i} \quad (i = 1, 2, 3). \quad (2)$$

Конкретные выражения для динамических матриц $D_{\mathbf{k}i\mathbf{j}'}$ и квазиупругих сил были получены в модели Борна–Бегби [6, 7].

Расчеты полей статических смещений проводились для одиночных примесей атома алюминия в решетке железа. Были выбраны следующие параметры:

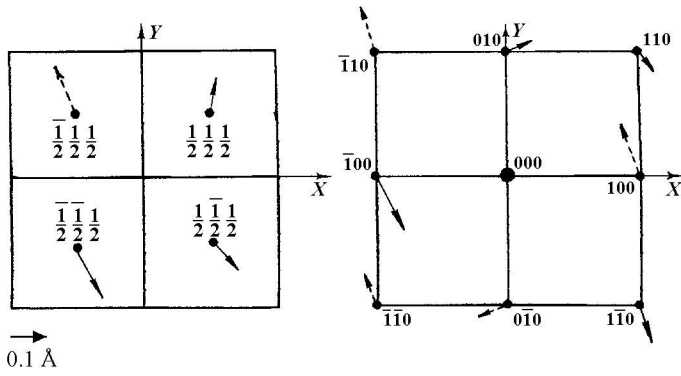
$$a_{\text{Fe}} = 2.866 \text{ \AA}, \quad c_{11} = 2.43 \cdot 10^{12}, \quad c_{12} = 1.38 \cdot 10^{12},$$

$$c_{44} = 1.22 \cdot 10^{12} \text{ дин/см}^2, \quad \frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial c} = 0.3,$$

где a — параметр решетки, V — объем элементарной ячейки, c — концентрация второго компонента, c_{ij} — упругие постоянные.

Правильность использованного в работе выражения для динамической матрицы проверялась с помощью расчетов фононных спектров $\nu(\mathbf{k})$. Рассчитанные и экспериментальные значения [8] удовлетворительно соответствовали друг другу. При вычислении величины $\delta\mathbf{R}_s$ суммирование проводилось по неприводимой части зоны Бриллюэна с увеличением числа точек суммирования до достижения сходимости результатов.

Результаты расчета статических смещений при замещении какого-либо атома железа атомом примеси большего радиуса (Al) приведены на рисунке.



Проекция векторов статических смещений атомов Fe вблизи одиночной примеси Al (в начале координат), лежащих в плоскости $z = a/2$ (*a*) и $z = 0$ (*б*). Сплошной линией обозначены проекции векторов с $z > 0$, пунктиром — с $z < 0$

Стрелками показаны проекции смещений соседних атомов на горизонтальную плоскость в соответствии с выбранным для них масштабом (указан на рисунке). В целях наглядности ячейка изображена в другом масштабе, не соответствующем масштабам смещений. Из рисунка, *a* следует, что характер смещений ближайших соседних атомов оказался различным. Видно, что смещения атомов в узлах $\left[\left[\frac{\bar{1}}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right]\right]$ и $\left[\left[\frac{1}{2} \frac{\bar{1}}{2} \frac{1}{2}\right]\right]$ носят существенно радиальный, а в узлах $\left[\left[\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right]\right]$ и $\left[\left[\frac{\bar{1}}{2} \frac{\bar{1}}{2} \frac{1}{2}\right]\right]$ — скорее тангенциальный характер. Смещения атомов второй координационной сферы в узлах $[[100]]$, $[[010]]$, $[[\bar{1}00]]$ и $[[0\bar{1}0]]$ имеют тангенциальный характер. Характер смещений на третьей координационной сфере оказался практически таким же, как на первой сфере. Смещения всех этих атомов имеют различные составляющие по оси z . Так, атомы в узлах $[[110]]$, $[[1\bar{1}0]]$, $[[\bar{1}00]]$ и $[[010]]$ смещаются вверх, а атомы в узлах $[[\bar{1}10]]$, $[[100]]$, $[[0\bar{1}0]]$ и $[[\bar{1}\bar{1}0]]$ — вниз. Следует отметить, что сумма смещений атомов какой-либо координационной сферы равна нулю. В соответствии с выражением (1) смещения $\delta R_s(\mathbf{r})$ centrosимметричны, что подтверждалось результатами расчетов: например, смещения атомов в узлах $[[110]]$ и $[[\bar{1}\bar{1}0]]$ равны по модулю и противоположны по направлению. Среди других соседних атомов можно выделить аналогичные пары. Все это относится и к плоскостям $z = \pm a/2$, $\pm a$. Таким образом, в ОЦК структуре замещение одного атома железа атомом алюминия приводит к смещениям атомов матрицы, причем расположение векторов смещений носит не хаотический, а скоррелированный характер. Большинство из них расположено почти параллельно плоскости $(\bar{1}10)$.

Диффузные эффекты, связанные со статическими смещениями, наблюдались на рентгенограммах концентрированных ОЦК твердых растворов многократно [9, 10]. Наиболее ярко они проявляются при образовании в сплавах ω -фазы. Структура ω -фазы получается из ОЦК решетки, искаженной волной смещений атомов $2(\mathbf{u}_0/\sqrt{3}) \sin(\mathbf{k}_\omega \mathbf{r} + \varphi)$, где $\mathbf{u}_0 \parallel [111]$, $|\mathbf{u}_0|$ — величина смещений атомов из узлов ОЦК решетки, $\mathbf{k}_\omega = (2\pi/3)\mathbf{S}_{222}$, \mathbf{S}_{222} — вектор узла $[[222]]$ ОЦК решетки, $\varphi = 0$ и $\pm 2\pi/3$. Анализ этих смещений показывает, что и в случае ω -фазы лишь некоторые векторы смещений оказываются чисто радиальными, остальные либо тангенциальны, либо имеют обе составляющие — и тангенциальные и радиальные. Поэтому наблюдавшиеся в данной работе статические смещения имеют сходные черты со смещениями, характерными для ω -фазы.

Проводились расчеты и для следующих координационных сфер. Оказалось, что смещения значительны и носят скоррелированный характер на расстояниях $\sim 10a$, где a — параметр решетки. Этот факт отвечает дальнедействующему типу деформационных межатомных взаимодействий в металлах и, в частности, говорит о том, что их формирование определяется как прямым кулоновским, так и косвенным взаимодействием — через электроны проводимости.

Литература

1. Kanzaki H. // J. Phys. Chem. Solids. 1957. **2**. P. 24.
2. Flocken J.W., Hardy J.R. // Phys. Rev. B. 1970. **1**, No. 6. P. 2472.
3. Dederichs P.H., Pollman J. // Z. f. Phys. 1972. **255**, No. 4. P. 315.
4. Soma T. // Physica B. 1977. **92**. P. 17.
5. Кривоглаз М. А. Теория рассеяния рентгеновских лучей и тепловых нейтронов реальными кристаллами. М.: Наука, 1967.
6. Begbie G. H., Born M. // Proc. Roy. Soc. 1947. **A188**. P. 179.
7. Кривоглаз М. А., Тихонова Е.А. // Укр. физ. журн. 1958. **3**. С. 297.
8. Finnis M. W., Kear K. L. // Phys. Rev. Lett. 1984. **52**, No. 4. P. 291.
9. Власова Е.Н., Дьяконова Н.Б. // ФММ. 1986. **61**. С. 569.
10. Тяпкин Ю.Д., Лясоцкий И.В., Малиенко Е.И. // ФММ. 1974. **37**. С. 107.

Поступила в редакцию
05.02.01