

УДК 539.1

## ОСОБЕННОСТИ СТАТИЧЕСКИХ СМЕЩЕНИЙ ВОКРУГ ОДИНОЧНЫХ ПРИМЕСНЫХ АТОМОВ В ГПУ РЕШЕТКЕ

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

(кафедра физики твердого тела)

E-mail: silonov\_v@mail.ru

**Расчет полей смещений вблизи одиночных примесных атомов замещения в ГПУ структуре, выполненный в микроскопическом приближении, выявил нехаотичный характер расположения векторов смещений атомов матрицы. Это обусловлено как различием размеров примесного атома и атомов матрицы, так и особенностями ГПУ структуры.**

Попытки расчета полей статических смещений вокруг точечных дефектов в ГЦК структуре предпринимались еще в 1957 г. [1] (рассматривались лишь дефекты в твердом аргоне). В работах [2–4] в рамках макроскопической теории проводились расчеты статических смещений вдали от дефектов. Использование микроскопического приближения для ОЦК структуры привело к выявлению нехаотичности в расположении векторов смещений атомов матрицы вокруг одиночных примесных атомов замещения [5]. В настоящей работе выполнен расчет полей статических смещений в ГПУ металле вблизи одиночной примеси замещения в рамках модели Борна–Бегби.

В рамках метода флуктуационных волн [6, 7] при наличии дефектов в кристалле обнаруживается смещение его атомов из узлов идеальной периодической решетки на величину

$$\delta \mathbf{R}_{s\gamma} = i \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{R}_{\mathbf{k}\gamma} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_{s\gamma}},$$

где  $\mathbf{k}$  — волновой вектор волны смещений,  $\mathbf{R}_{s\gamma}$  — вектор  $s$ -го узла идеальной решетки кристалла,  $\gamma$  — индекс подрешетки,  $i = \sqrt{-1}$ ,  $\mathbf{R}_{\mathbf{k}\gamma}$  — фурье-образ вектора статических смещений:

$$\mathbf{R}_{\mathbf{k}\gamma} = -\frac{i}{N} \sum_{s=1}^N \delta \mathbf{R}_{s\gamma} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{s\gamma}},$$

$N$  — число атомов кристалла. В линейном приближении величина  $\mathbf{R}_{\mathbf{k}\gamma}$  связана с фурье-образом отклонений чисел заполнения  $c_{s\gamma}$  от концентрации  $c_\gamma$  соотношением

$$\mathbf{R}_{\mathbf{k}\gamma} = -\frac{i}{N} \sum_s \sum_\gamma \mathbf{A}_{\mathbf{k}\gamma} c_{\mathbf{k}\gamma},$$

где

$$c_{\mathbf{k}\gamma} = \frac{1}{N} \sum_{s=1}^N (c_{s\gamma} - c_\gamma) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{s\gamma}}.$$

Коэффициенты пропорциональности  $\mathbf{A}_{\mathbf{k}\gamma}$  могут быть найдены из системы линейных уравнений

$$\hat{D}_{\mathbf{k}ij}^{11} \mathbf{A}_{\mathbf{k}j1\gamma} + \hat{D}_{\mathbf{k}ij}^{12} \mathbf{A}_{\mathbf{k}j2\gamma} = P_{\mathbf{k}i}^{1\gamma},$$

$$\hat{D}_{\mathbf{k}ij}^{21} \mathbf{A}_{\mathbf{k}j1\gamma} + \hat{D}_{\mathbf{k}ij}^{22} \mathbf{A}_{\mathbf{k}j2\gamma} = P_{\mathbf{k}i}^{2\gamma}.$$

Конкретные выражения для динамических матриц  $D_{\mathbf{k}ij}^{\gamma\gamma'}$  и квазиупругих сил были получены в модели Борна–Бегби [8]. Для ГПУ металлов динамическая матрица  $D_{\mathbf{k}ij}$  в приближении Борна–Бегби имеет вид [7]

$$D_{\mathbf{k}xx}^{11} = -3(\alpha_1 + \beta_1 + \alpha_2 + \beta_2) + (\alpha_1 + 3\alpha_2) C_x C_y + 2\alpha_1 C_{xx},$$

$$D_{\mathbf{k}yy}^{11} = -3(\alpha_1 + \beta_1 + \alpha_2 + \beta_2) + (\alpha_2 + 3\alpha_1) C_x C_y + 2\alpha_2 C_{xx},$$

$$D_{\mathbf{k}zz}^{11} = -6(\alpha_3 + \beta_3) + 2\alpha_3(2C_x C_y + C_{xx}),$$

$$D_{\mathbf{k}xy}^{11} = -\sqrt{3}(\alpha_1 - \alpha_2) S_x S_y - i\alpha_4 S_x (C_x - C_y),$$

$$D_{\mathbf{k}yx}^{11} = -\sqrt{3}(\alpha_1 - \alpha_2) S_x S_y + i\alpha_4 S_x (C_x - C_y),$$

$$D_{\mathbf{k}xz}^{11} = D_{\mathbf{k}zx}^{11} = D_{\mathbf{k}yz}^{11} = D_{\mathbf{k}zy}^{11} = 0,$$

$$D_{\mathbf{k}xx}^{21} = 2\beta_1 C_z e^{i2y_1} + (\beta_1 + 3\beta_2) C_x C_z e^{-iy_1},$$

$$D_{\mathbf{k}yy}^{21} = 2\beta_2 C_z e^{i2y_1} + (\beta_2 + 3\beta_1) C_x C_z e^{-iy_1},$$

$$D_{\mathbf{k}zz}^{21} = 2\beta_3 C_z (e^{i2y_1} + C_x e^{-iy_1}),$$

$$D_{\mathbf{k}xy}^{21} = Q_{\mathbf{k}yx}^{21} = i\sqrt{3}(\beta_1 - \beta_2) C_z S_x e^{-iy_1},$$

$$D_{\mathbf{k}xz}^{21} = Q_{\mathbf{k}zx}^{21} = -2\sqrt{3}\beta_4 S_z S_x e^{-iy_1},$$

$$D_{\mathbf{k}zy}^{21} = Q_{\mathbf{k}yz}^{21} = -i \cdot 2\beta_4 S_z (C_x e^{-iy_1} - e^{i2y_1}).$$

Здесь  $\mathbf{k}$  — волновой вектор, приведенный к первой ячейке обратной решетки,

$$C_x = \cos x; \quad C_y = \cos y; \quad C_z = z; \quad C_{xx} = \cos 2x;$$

$$S_x = \sin x; \quad S_y = \sin y; \quad S_z = \sin z,$$

$$x = \frac{k_x a}{2}; \quad y = \frac{k_y a \sqrt{3}}{2}; \quad z = \frac{k_z c}{2}; \quad xx = 2x; \quad y_1 = \frac{y}{3},$$

$a, c$  — параметры решетки твердого раствора,  $c_{ij}$  — упругие постоянные ГПУ твердого раствора,  $\alpha_i$  и  $\beta_i$  — силовые постоянные.

Коэффициенты  $P_{ki}^{\gamma\gamma'}$  определяются силовыми постоянными  $W$  и  $W'$ :

$$P_{kx}^{11} = 2W (S_{xx} + S_x C_y), \quad P_{ky}^{11} = 2\sqrt{3}W S_y C_x,$$

$$P_{kz}^{11} = 0, \quad P_{kx}^{12} = K \cdot 4\sqrt{3}aW' S_x C_z e^{iy_1},$$

$$P_{ky}^{12} = iK \cdot 4aW' C_z (e^{i2y_1} - C_x e^{-iy_1}),$$

$$P_{kz}^{12} = K \cdot 2\sqrt{3}cW' S_z (e^{-i2y_1} + 2C_x e^{iy_1}),$$

где  $K = 1/\sqrt{4a^2 + 3c^2}$ . Силовые постоянные  $W$  и  $W'$  можно выразить через величины, характеризующие зависимость параметров решеток  $a, c$  от концентрации раствора  $C$ :

$$W = \frac{1}{4\sqrt{3}}ca \left[ (c_{11} + c_{12}) \frac{1}{a} \frac{\partial a}{\partial C} + c_{13} \frac{1}{c} \frac{\partial c}{\partial C} \right] -$$

$$- \frac{1}{3\sqrt{3}}a^2 \left[ 2c_{13} \frac{1}{a} \frac{\partial a}{\partial C} + c_{33} \frac{1}{c} \frac{\partial c}{\partial C} \right];$$

$$W' = \frac{a^2 \sqrt{4a^2 + 3c^2}}{12c} \left[ 2c_{13} \frac{1}{a} \frac{\partial a}{\partial C} + c_{33} \frac{1}{c} \frac{\partial c}{\partial C} \right].$$

Силовые постоянные  $\alpha_i$  и  $\beta_i$  связаны друг с другом соотношением

$$3\alpha_3 + \beta_3 = \frac{3c^2}{4a^2} (\beta_1 + \beta_2),$$

вытекающим из требования отсутствия внутренних напряжений. Их связь с модулями упругости кристаллов с ГПУ решеткой имеет вид

$$c_{11} = \frac{\sqrt{3}}{2c} \left( 3\alpha_1 + \alpha_2 + \frac{2\beta_2 (\beta_1 + \beta_2)}{(\beta_1 - \beta_2)} \right),$$

$$c_{66} = \frac{1}{2} (c_{11} - c_{12}) = \frac{1}{2\sqrt{3}c} \times$$

$$\times \left( 3(\alpha_1 + 3\alpha_2) + (3\beta_1 + \beta_2) + \frac{(\beta_1 + \beta_2)^2}{(\beta_1 - \beta_2)} \right),$$

$$c_{33} = \frac{\sqrt{3}c}{a^2} \beta_3,$$

$$c_{44} = \frac{2\sqrt{3}}{c} \alpha_3,$$

$$c_{13} - c_{44} = -\frac{2}{3} \beta_4.$$

В случае ГПУ структуры векторы смещений атомов матрицы для каждой из подрешеток связаны с существенно различными коэффициентами  $\mathbf{A}_{\mathbf{k}11}$  и  $\mathbf{A}_{\mathbf{k}21}$ :

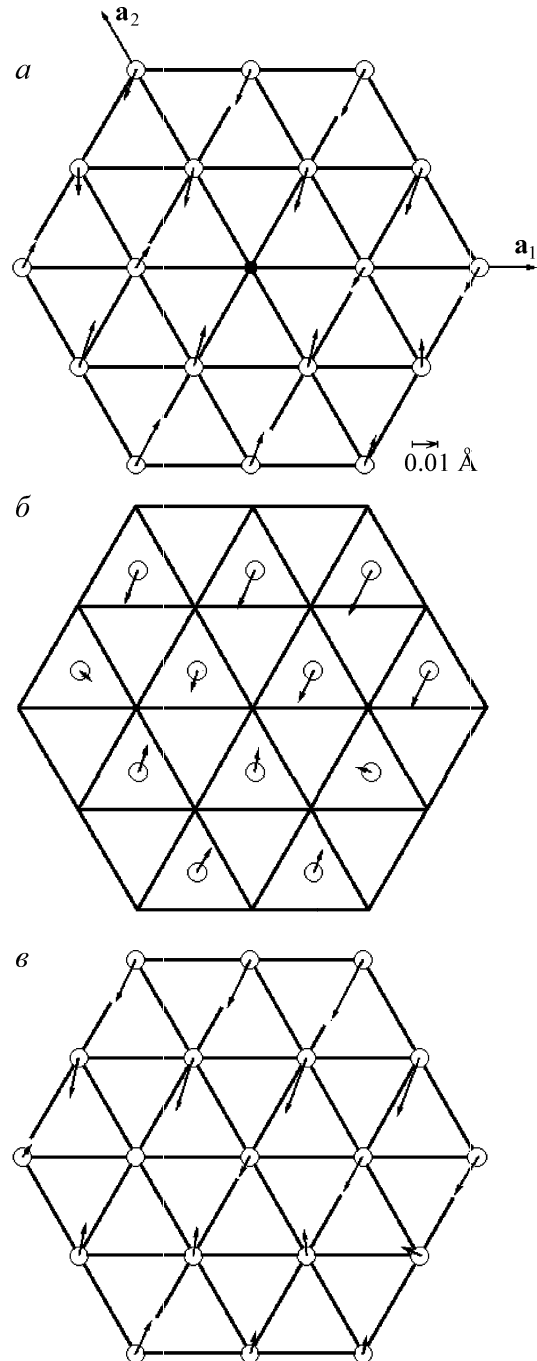
$$\delta \mathbf{R}_{s1} = \frac{i}{N} \int \mathbf{A}_{\mathbf{k}11} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_{s1}} d\mathbf{k}, \quad (1)$$

$$\delta \mathbf{R}_{s2} = \frac{i}{N} \int \mathbf{A}_{\mathbf{k}21} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_{s2}} d\mathbf{k}. \quad (2)$$

Расчеты полей статических смещений были проведены на примере одиночных примесей индия в решетке магния. Были выбраны следующие

параметры:  $a_{\text{Mg}} = 3.21 \text{ \AA}$ ,  $c_{\text{Mg}} = 5.21 \text{ \AA}$ ,  $c_{11} = 0.594 \cdot 10^{12}$ ,  $c_{12} = 0.256 \cdot 10^{12}$ ,  $c_{13} = 0.214 \cdot 10^{12}$ ,  $c_{33} = 0.616 \cdot 10^{12}$ ,  $c_{44} = 0.164 \cdot 10^{12}$  (дин/см<sup>2</sup>),  $\frac{1}{a} \frac{\partial a}{\partial c} = -0.04$ ,  $\frac{1}{c} \frac{\partial c}{\partial c} = 0.005$ .

Проверка правильности использованных в работе выражений для динамических матриц проводилась путем расчета фононных спектров  $\nu(\mathbf{k})$ . Оказалось, что рассчитанные и экспериментальные [9] кривые фононных спектров удовлетворительно согласуются. Расчеты  $\partial \mathbf{R}_s$  проводились численным интегрированием (1), (2) по неприводимой части зоны Бриллюэна, при этом число точек суммирования



Проекция векторов статических смещений атомов магния вблизи атома индия, лежащих в плоскостях:  $z = 0$  (а),  $z = 0.5c$  (б),  $z = c$  (в)

увеличивалось до тех пор, пока не достигалась сходимости результатов. В ГПУ структуре кристаллическая решетка разбивается на две подрешетки. В соответствии с этим узлы, принадлежащие к первой и второй координационным сферам, имеют весьма близкие радиусы (3.20 и 3.21 Å в случае магния) и относятся к разным подрешеткам. К первой подрешетке относятся узлы  $[[10\bar{1}0]]$ ,  $[[11\bar{2}0]]$ ,  $[[01\bar{1}0]]$ ,  $[[\bar{1}010]]$ ,  $[[\bar{1}\bar{1}20]]$ ,  $[[0\bar{1}10]]$  (вторая координационная сфера), а ко второй — узлы  $[[\frac{2}{3}\frac{1}{3}\bar{1}\frac{1}{2}]]$ ,  $[[\frac{1}{3}\frac{1}{3}0\frac{1}{2}]]$ ,  $[[\frac{1}{3}\frac{2}{3}1\frac{1}{2}]]$  и  $[[\frac{2}{3}\frac{1}{3}\bar{1}\frac{1}{2}]]$ ,  $[[\frac{1}{3}\frac{1}{3}0\frac{1}{2}]]$ ,  $[[\frac{1}{3}\frac{2}{3}1\frac{1}{2}]]$  (первая координационная сфера). Из результатов расчетов смещений, возникающих из-за присутствия одиночных примесей индия в матрице магния (рисунок), следует, что характер смещений атомов, находящихся в узлах второй подрешетки, различен. Так, смещения атомов в узлах  $[[\frac{1}{3}\frac{1}{3}0\frac{1}{2}]]$ ,  $[[\frac{1}{3}\frac{1}{3}0\frac{1}{2}]]$  и  $[[\frac{1}{3}\frac{2}{3}1\frac{1}{2}]]$ ,  $[[\frac{1}{3}\frac{2}{3}1\frac{1}{2}]]$  практически тангенциальные, а смещения атомов в узлах  $[[\frac{2}{3}\frac{1}{3}\bar{1}\frac{1}{2}]]$  и  $[[\frac{2}{3}\frac{1}{3}\bar{1}\frac{1}{2}]]$  имеют значительные радиальные составляющие.

В отличие от атомов первой координационной сферы, во второй координационной сфере смещения двух атомов:  $[[11\bar{2}0]]$  и  $[[\bar{1}\bar{1}20]]$  практически радиальные, в то время как смещения других атомов носят главным образом тангенциальный характер.

Смещения атомов, находящихся в узлах  $[[0001]]$  и  $[[000\bar{1}]]$ , принадлежащих к четвертой координационной сфере и второй подрешетке, практически тангенциальные.

Смещения атомов в третьей координационной сфере, находящихся в узлах  $[[\frac{2}{3}\frac{4}{3}2\frac{1}{2}]]$  и  $[[\frac{2}{3}\frac{4}{3}2\frac{1}{2}]]$ , носят в основном радиальный характер, а в других узлах — смешанный (и радиальный и тангенциальный).

Приведенные данные говорят о том, что в ГПУ структуре замещение одного атома магния атомом

индия приводит к коррелированным смещениям ближайших атомов магния. Большинство векторов статических смещений, как видно из рисунка, лежат в плоскостях, практически параллельных плоскости  $(1\bar{1}00)$ . По-видимому, это связано с особенностями взаимодействия примесного атома индия с соседними атомами магния, расположенными в обеих подрешетках ГПУ матрицы. Обнаруженный в работе [5] скоррелированный характер смещений для ОЦК структуры вместе с полученными в настоящей работе результатами свидетельствуют об общем характере корреляции смещений в разбавленных твердых растворах с различной кристаллической структурой. Описанные результаты были получены в рамках микроскопической теории в длинноволновом приближении. Представляет интерес проведение подобных расчетов методом модельного потенциала.

#### 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. Силонов В.М., Харламова И.В., Гениев А.Ю. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2001. № 3. С. 79.
6. Кривоглаз М.А. Теория рассеяния рентгеновских лучей и тепловых нейтронов реальными кристаллами. М.: Наука, 1967.
7. Кривоглаз М.А., Тю Хао // Металлофизика. 1968. № 24. P. 63.
8. Begbie G.H., Born M. // Proc. Roy. Soc. 1947. **A188**. P. 179.
9. Shaw R.W., Pynn R. // J. Phys. C. 1969. **2**. P. 2071.

Поступила в редакцию  
26.10.01