

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 выборки  $\Omega_s$ .

#### 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. Популярныe 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

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

Конкретные выражения для динамических матриц  $D_{\mathbf{k}ij}$  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:

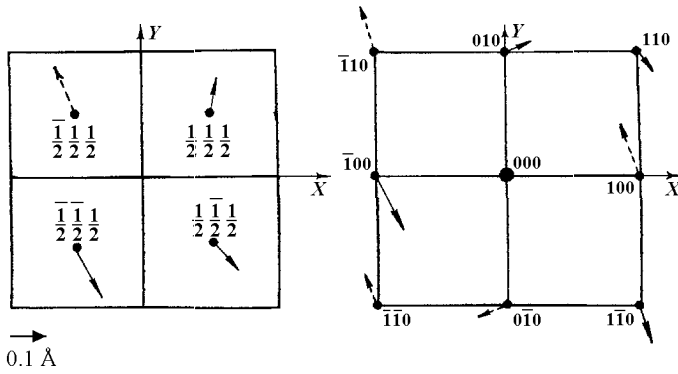
$$a_{\text{Fe}} = 2.866 \text{ \AA}, \quad c_{11} = 2.43 \cdot 10^{12}, \quad c_{12} = 1.38 \cdot 10^{12},$$

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

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.



0.1 Å  
 Проекции векторов статических смещений атомов Fe вблизи одиночной примеси Al (в начале координат), лежащих в плоскостях  $z = a/2$  (а) 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, а следует, что характер смещений ближайших соседних атомов оказался различным. Видно, что смещения атомов в узлах  $\left[\left[\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right]\right]$  и  $\left[\left[\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right]\right]$  носят существенно радиальный, а в узлах  $\left[\left[\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right]\right]$  и  $\left[\left[\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right]\right]$  — 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  $\omega$ -фазы. Структура  $\omega$ -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  $\omega$ -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  $\omega$ -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