

Хуурмаг потенциалын аргаар Ni—Fe хатуу уусмалын уян харимхайн ТОГТМОЛУУДЫГ ТООЦООЛОХ.

*Силонов В.М., Энхтөр Л.

*Москвагийн Улсын Их сургуулийн хатуу биеийн
физикийн тэнхим.

Уян харимхайн тогтмолууд нь хатуу биеийн чухал хэмжигдэхүүнүүд билээ. Уг тогтмолуудын утгыг туршилтаар иж бүрэн тодорхойлоход бэрхшээл ихтэй, цаг хугацаа нэн их шаардагддаг учраас квант механикийн аргуудыг ашиглан тэдгээрийг тооцоолох нь ач холбогдолтой юм. Хуурмаг потенциалын онолын хүрээнд /1/ Анималугийн шилжилтийн металлуудын загварчилсан потенциалыг (ШМЗП) /2/ ашиглан /3,4/ бүтээлүүдэд ТТШ бүтэцтэй Ni, Pd металлууд болон $Ni_{0.55}Pd_{0.45}$, $Co_{0.92}Fe_{0.08}$ хайлшуудын уян харимхайн тогтмолууд, фононы спектр, фононы төлөвүүдийн нягт, дебайн температурыг тооцоолсон билээ. Эдгээр хэмжигдэхүүнүүдийн тооцооны үр дүнгүүд туршилтын үзүүлэлтүүдтэй шаардлага хангахуйц давхцаж гарсан байна. Бид уг аргачлалын дагуу Ni-Fe хайлшийн уян харимхайн тогтмолуудын концентрацын хамаарал ба фононы спектрийг тооцоолж туршилтын үр дүнгүүдтэй нь харьцуулсан юм. Мөн ШМЗП—ыг ашиглан ЭТШ бүтэцтэй Fe—ийн уян харимхайн тогтмолуудыг тооцоолсон болно.

Тооцооны аргачлал.

Хуурмаг потенциалын онолын хүрээнд /1/ кристаллын атомуудын хоорондын хосолсон харилцан үйлчлэлийн энергийг тодорхойлохдоо:

$$V(r) = \frac{Z^2 e^2}{r} + \frac{2Z^2 e^2}{\pi} \int_0^{\infty} G(q) \frac{\sin(qr)}{qr} dq \quad (1)$$

Үүнд Z-валент тоо, e—электроны цэнэг, G(q)—нормчлогдсон тодорхойлогч функци бөгөөд томъёо нь:

$$G(q) = - \left[\frac{4\pi Z e^2}{\Omega q^2} \right]^{-2/w^0(q)/2} \left(1 - \frac{1}{\epsilon(q)} \right) \quad (2)$$

Уг томъёонд $w^0(q)$ -экрэнчлагдаагүй ионы потенциал, $\Omega(q)$ -диэлектрикийн функц, Ω — атомын эзлэхүүн, $f(q)$ — корреляци — солилцооны засвар. Төвийн харилцан үйлчлэлийн тохиолдолд атом хоорондын потенциалгаас хоёр төрлийн өөр хоорондоо хамааралгүй хүчний тогтмолуудыг тодорхойлдог/5/:

$$\frac{1}{r} \frac{dV}{dr} = - \frac{Z^2 e^2}{r^3} - \frac{2Z^2 e^2}{\pi r^2} \int_0^{\infty} G(q) \left[\cos(qr) - \frac{\sin(qr)}{qr} \right] dq; \quad (3)$$

$$\frac{d^2V}{dr^2} = \frac{2Z^2 e^2}{r^3} - \frac{2Z^2 e^2}{\pi r} \int_0^{\infty} G(q) \left[\frac{2\sin(qr)}{qr^2} - \frac{2\cos(qr)}{r} - q\sin(qr) \right] dq. \quad (4)$$

Уг тогтмолуудыг

$$\alpha_i = \left(\frac{d^2V}{dr^2} \right)_{r_i}; \quad \beta_i = \left(\frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \right)_{r_i}$$

гэж тэмдэглэх бөгөөд радиаль ба тангенциаль хүчний тогтмолууд хэмээн тус тус нэрлэдэг. Үүнд i — индекс нь хөрш атом байрласан r_i радиустай координацын бөмбөлгийн дугаар болно. Координацын бөмбөлгийн r_i радиусын утга торын бүтэц болон торын a тогтмолоос хамаарна. Иймээс дээр тодорхойлогдсон хүчний тогтмолууд нь кристалл торын бүтэц, торын тогтмол a болон атом хоорондын харилцан үйлчлэлийн $V(r)$ хамаарлаас шалтгаална. Хайлшийн

хүчний тогтмолуудыг тодорхойлохдоо компонент бүрийн тогтмолуудыг тухайн кристалл бүтцийн хувьд тооцоолоод концен-трациар дундажлах аргыг хэрэглэж болох талтай. Дундажлалтын томъёо:

$$\alpha_i^{alloy} = \sum_{j=1}^n \alpha_{ij} c_j; \quad \beta_i^{alloy} = \sum_{j=1}^n \beta_{ij} c_j. \quad (5)$$

Үүнд n — хайлшийн компонентуудын тоо, c_j — хайлшийн i -дэх компонентын атомын концентраци, α_{ij} ба β_{ij} бол j -дэх компонентын i -дүгээр координацын бөмбөлгийн хүчний тогтмолууд.

ТТШ бүтэцтэй кристалл торын уян харимхайн тогтмолуудыг эхний арван координацын бөмбөлөг дээрх хүчний тогтмолуудаар илэрхийлбэл:

$$\begin{aligned} C_{11} = & \frac{1}{a} [2\alpha_1 + 2\beta_1 + 4\alpha_2 + 12\alpha_3 + 12\beta_3 + 8\alpha_4 + 8\beta_4 + \frac{164}{5}\alpha_5 - \frac{328}{5}\beta_5 + \frac{16}{3}\alpha_6 \\ & + \frac{32}{3}\beta_6 + 56\alpha_7 + 32\alpha_8 - 16\alpha_8 + \frac{226}{3}\alpha_9 - \frac{136}{3}\beta_9 + \frac{256}{5}\alpha_{10} + \frac{144}{5}\beta_{10}]; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} C_{12} = & \frac{1}{a} [\alpha_1 - 5\beta_1 - 4\beta_2 + 6\alpha_3 - 30\beta_3 + 4\alpha_4 - 20\beta_4 + \frac{54}{5}\alpha_5 + \frac{16}{3}\alpha_6 + \\ & + 22\beta_5 - \frac{64}{3}\beta_6 - \frac{268}{7}\alpha_7 + \frac{124}{7}\beta_7 - 16\beta_8 + \frac{49}{3}\alpha_9 + \frac{139}{3}\beta_9 + 80\beta_{10}]; \end{aligned}$$

$$C_{44} = \frac{1}{a} [\alpha_1 + 3\beta_1 + 4\beta_2 + 6\alpha_3 + 18\beta_3 + 4\alpha_4 + 12\beta_4 + \frac{18}{5}\alpha_5 - \frac{182}{5}\beta_5 + \frac{16}{3}\alpha_6 + \frac{32}{3}\beta_6 + 28\alpha_7 + 84\beta_7 + 16\beta_8 + \frac{49}{3}\alpha_9 + \frac{41}{3}\beta_9 + \frac{64}{5}\alpha_{10} + \frac{336}{5}\beta_{10}]$$

ЭТШ бүтэцтэй кристаллын уян харимхайн тогтмолуудыг тооцоолоход доорхи томъёонуудыг ашиглаж болно /6/:

$$C_{11} = \frac{1}{6\Omega_0} \sum_{i,\alpha} X_\alpha^4(i) \left[\frac{dV}{dr^2} - \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \right]_{r=r_i}$$

(6)

$$C_{12} = \frac{1}{6\Omega_0} \sum_{i,\alpha \neq \beta} X_\alpha^2(i) X_\beta^2(i) \left[\frac{dV}{dr^2} - \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \right]_{r=r_i}$$

Үүнд Ω_0 — атомын эзлэхүүн, r_i — i дүгээр координацын бөмбөлгийн радиус, α ба β хувьсагчид 1,2,3 утгуудыг авч болох бөгөөд 1 утгад X-тэнхлэг, 2-утгад Y-тэнхлэг, 3 утгад Z тэнхлэг тус тус харгалзана. $X_\alpha(i)$ тэмдэглэгээ нь i -дэх координацын бөмбөлөг дээрх атомын α тэнхлэгт буулгасан проекцийг илэрхийлнэ. Хосолсон харилцан үйлчлэлийн хялбарчлалд $C_{12} = C_{44}$ гэж авдаг болсвч C_{44} тогтмолыг тооцоолоход дараах томъёог хэрэглэх нь илүү оновчтой байж болно [7]:

$$\omega^2 = 2 \frac{a}{M} C_{44} + \frac{a}{M} C_{11} \quad (7)$$

Үүнд ω^2 — фононы давтамжийн 2 дугаар момент, a — торын тогтмол, M — атомын масс юм. Фононы давтамжийн хоёрдугаар моментыг дээр тодорхойлсон хүчний тогтмолуудаар доорхи хэлбэрээр илэрхийлж болно:

$$\omega^2 = \frac{1}{3M} \sum_i N_i (2\beta_i + \alpha_i). \quad (8)$$

Уг томьёонд N_i — i дүгээр координацын бөмбөлөг дээрх атомын тоо болно.

Тооцооны үр дүн

Дээрх аргачлалын дагуу тооцоолсон ТТШ бүтэцтэй Ni — ийн уян харимхайн тогтмолуудын утгуудыг туршилтын үр дүн /8/ ба /4/ бүтээлийн тооцоотой харьцуулан Хүснэгт 1 — т үзүүлэв.

Хүснэгт 1. Никелийн уян харимхайн тогтмолуудын утга (10^{10} н/м²).

Me — тал	Тооцоо			Туршилт /8/		
	C_{11}	C_{12}	C_{44}	C_{11}	C_{12}	C_{44}
Ni	23.2	18.3	8.9	24.6	15.0	12.2
Ni /4/	22.8	17.8	8.7			

Бидний тооцооны үр дүн /4/ бүтээлийнхтэй маш ойрхон байна. Тооцооны үр дүнг туршилтын хэмжигдэхүүнүүдтэй харьцуулбал C_{11} тогтмолын тооцооны утга 6%, C_{12} тогтмолын утга 18%, C_{44} тогтмолын утга 27%-иар тус тус туршилтын утгуудаас ялгаатай байна. C_{44} тогтмолын утга туршилтынхаас хэтэрхий их зөрүүтэй байгаа нь ажиглагдаж байна. Уг зөрүүг багасгахын тулд гурван бөөмийн харилцан үйлчлэлийг тооцох арга зам байдаг /9/ боловч нүсэр тооцоо хийх болдог. Өөр нэг арга зам бол уян харимхайн тогтмолуудын хоорондын туршилт болон онолын харьцаануудыг ашиглах юм. ТТШ бүтэцтэй кристаллын хувь доорхи харьцааг ашиглаж болно /10/:

$$C_{44} = \frac{1}{3} (2C_{11} - C_{12}). \quad (9)$$

Уг харьцааг шалгах зорилгоор туршилтын C_{11} , C_{12} утгуудыг ашиглан C_{44} тогтмолыг олбол $C_{44} = 11.4 \cdot 10^{10}$ н/м² бөгөөд туршилтын $C_{44} = 12.2 \cdot 10^{10}$ н/м² утгатай маш ойрхон байна. Тооцооны C_{11} , C_{12} утгуудыг ашиглан (9) харьцаагаар C_{44} утгыг олбол $C_{44} = 9.4 \cdot 10^{10}$ н/м² гарч байгаа нь туршилтын утгаас мөн л их зөрүүтэй байна. Энэ нь тооцооны C_{11} , C_{12} утгууд туршилтын утгуудаас ялгаатай байгаатай холбоотой. Иймээс тооцооны C_{11} ба C_{12} утгууд бодит утгуудтай ойрхон тохиолдолд (9) харьцааг ашиглах бололцоотой юм.

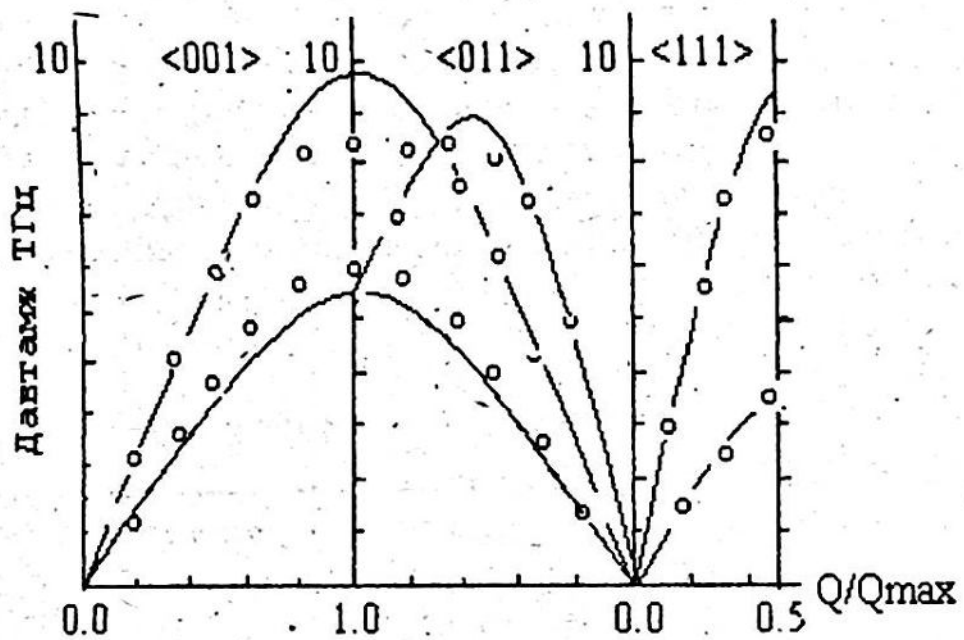
ТТШ бүтэцтэй Ni—Fe хайлшуудын уян харимхайн тогтмолуудын тооцооны үр дүнг туршилтын утгуудтай /8/ харьцуулан хүснэгт 2—т үзүүлэв.

Хүснэгт 2. Ni—Fe хайлшуудын уян харимхайн тогтмолуудын утга (10^{10} н/м²).

Хайлш	Тооцооны үр дүн				Туршилт /8/		
	C_{11}	C_{12}	C_{44}	C_{44} (9)	C_{11}	C_{12}	C_{44}
$Ni_{0.90}Fe_{0.10}$	20.7	14.1	7.4	9.1	20.5	14.6	10.8
$Ni_{0.74}Fe_{0.26}$	22.4	16.3	7.8	9.5	23.0	14.4	11.9
$Ni_{0.50}Fe_{0.50}$	23.0	18.1	8.6	10.0	25.5	15.3	13.0

Хүснэгтээс үзэхэд Ni—Fe хайлшийн төмрийн концентраци өсөхөд уян харимхайн тогтмолуудын туршилтын утгууд өсч байна. Тооцоолсон C_{11} , C_{12} , C_{44} утгууд мөн өсч байна. C_{11} тогтмолын утгууд туршилтын үр дүнгүүдтэй ойрхон байгаа бөгөөд тэдгээрийн зөрүүнүүд 10%-иас хэтрэхгүй байна. C_{12} утгуудын зөрүү нь туршилтын утгын 17%—иас илүүгүй байна. $Ni_{0.90}Fe_{0.10}$ хайлшийн C_{11} , C_{12} тогтмолуудын тооцооны утгууд туршилтын үр дүнгүүдтэй сайн давхцаж байгааг тэмдэглүүштэй. /4/ аргачлалаар бодсон C_{44} тогтмолын утгууд туршилтынхаас их зөрүүтэй байгаа учраас тооцооны C_{11} , C_{12} утгуудыг оролцуулан (9) харьцаагаар уг тогтмолыг бодож хүснэгт- 2—т толилуулав. Үүнд тооцоо ба туршилтын утгуудын зөрүү багассан бөгөөд зөрүүний утга 15%—аас 23 % байна. Онол ба туршилтын утгуудын хамгтын их зөрүү $Ni_{0.50}Fe_{0.50}$ хайлшийн хувьд ажиглагдаж байгаа учир уг хайлшийн уян харимхайн тогтмолуудыг бодоход хэрэглэсэн хүчний тогтмолуудыг ашиглан фононы спектрийг тооцоолон зураг 1—т үзүүлэв. Уг зураг дээр $Ni_{0.50}Fe_{0.50}$ хайлшийн фононы спектрийн туршилтын үр дүнг /11/ мөн тэмдэглэв. Зургаас үзэхэд тооцоо ба туршилтын үр дүнгүүд хангалттай давхцаж байгаа нь уян харимхайн тогтмолуудыг

тооцоолоход ашигласан хүчний тогтмолууд бодитойг харуулж байна.



Зураг 1. Никель-төмрийн хайлшийн фононы спектр. Тооцооны үр дүнг муруй шугамаар, туршилтын /11/ үр дүнг \circ гэж тэмдэглэв.

ЭТШ бүтэцтэй төмөрийн уян харимхайн тогтмолуудыг (6)–(8) томъёонуудыг ашиглан тооцоолсныг хүнэгт 3–т толилуулав. Мөн уг тогтмолуудын туршилтын утгуудыг /8/ харьцуулах журмаар үзүүлэв.

Хүснэгтээс харахад онол ба туршилтын үр дүнгүүд ойрхон байгаа бөгөөд тооцоолсон C_{11} тогтмол 8%, C_{12} -15%, C_{44} -10% тус тус туршилтын утгуудаас зөрж байна. Иймээс ЭТШ бүтэцтэй төмөрийн хайлшуудын уян харимхайн тогтмолуудыг тооцоолоход дээрх аргачлалыг ашиглаж болох талтай юм.

Хүснэгт 3. Fe-ийн уян харимхайн тогтмолуудын утга (10^{10} н/м²).

Me – талл	Тооцоо			Туршилт /8/		
	C_{11}	C_{12}	C_{44}	C_{11}	C_{12}	C_{44}
Fe	26.3	15.9	13.4	24.3	13.8	12.2

Хуурмаг потенциалын онолын хүрээнд Анималугийн ШМЗП-ыг ашиглан ТТШ бүтэцтэй Ni-Fe хайлшууд, ЭТШ бүтэцтэй Fe болон төмөр суурьтай хайлшуудын уян харимхайн тогтмолуудыг тооцоолж рентген цацрагийн диффузи сарнилын судалгаанд ашиглаж болох талтай юм.

В. рамках теории псевдопотенциала с применением модельного потенциала переходных металлов Анималу рассчитаны упругие постоянные и фононный спектр ГЦК сплавов Ni-Fe. Также рассчитаны упругие постоянные α -Fe. Сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными показало удовлетворительное согласие.

Ашигласан ном

1. Харрисон У. Псевдопотенциалы в теории металлов. М:Мир, 1968, 366с.
2. Animalu A.O.E. Electronic structure of transition metals. 1. Quantum defects and model potential. Phys.Rev.B., v.8, n.8, 1973, p.3542-3554.
3. R.Shyam, S.C.Upadhyaya J.C.Upadhyaya, First -principles calculation of the lattice dynamics. Phys.Stat.Sol.B161, 565(1990).
4. S.C.Upadhyaya J.C.Upadhyaya, R.Shyam, Model potential study of the lattice dynamics., Phys.Rev., B44, 122-129(1991).
5. Wei-Mei Shyi, G.D.Gaspary, Screened interionic potential of the simple metals, Phys.Rev.170, 687(1968).
6. Портной К.И., Богданов В.И., Фукс Д.Л., Расчет взаимодействия и стабильности фаз. М.Металлургия. 1981, 248с.
7. Лейбфрид Г. Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов. — М.:Физматгиз, 1963, 321с.
8. Landolt-Bernstein. vol.18. Numerical data and Function Relationships in Science and Technology. Group III.
9. J.C.Upadhyaya, D.Prakash Three-body forces in the lattice dynamics of the fcc nickel, Phys.Rev., B33, 1416, (1986).
10. Akgun I., Ugur G., Three body effects on the lattice dynamics of the Pd-10%Fe alloys. Phys.Rev..v.51, n.6, p.3459, (1995)
11. E.D.Halman, B.N.Brockhouse, Crystal dynamics of nickel-iron and copper-zinc alloys, Can.J.Phys., 47, 1117(1969).