

**Хэт шингэлсэн Ni-W хатуу уусмал дахь ойрын
эрэмбийн тухай.**

В.М.Силонов*, Л.Энхтөр

*Москвагийн Улсын Их Сургууль

Хатуу уусмалын физик шинж чанар нь атомуудын байрлалын ойрын эрэмбээс хамаардаг билээ. Ni-W системийн хайлшууд дахь ойрын эрэмбийг рентген аргаар өргөн судалсан байдаг [1-4]. Гэвч хэт шингэлсэн хайлшууд судлагдаагүй байна. Энэхүү бүтээл хэт шингэлсэн Ni-W хатуу уусмалын ойрын эрэмбийг рентген цацрагийн диффуз сарнилын (РЦДС) туршилтын аргаар мөн хуурмаг потенциалын онолын аргаар судлах зорилготой болно.

**Хуурмаг потенциалын аргаар эрэмблэлтийн
энергийг тооцоолох**

Хайлшийн эрэмблэлтийн энергийг доорхи томъёогоор тооцоолно [5]:

$$V(\rho_i) = \frac{\bar{\Omega}_0}{\pi^2} \int_0^{\infty} F(q) \frac{\sin q\rho_i}{q\rho_i} dq \quad (1)$$

Үүнд ρ_i – i дүгээр координацын сферийн радиус, $\bar{\Omega}_0$ -атомын дундаж эзлэхүүн, q -долгионы вектор, $F(q)$ -эрэмблэлтийн тодорхойлогч функц:

$$F(q) = \frac{2\pi(\Delta Z^*)^2}{\bar{\Omega}_0 q^2} e^{-q^2/4\eta} + \frac{\bar{\Omega}_0}{8\pi} |\Delta W(q)|^2 \varepsilon(q) \chi(q) \quad (2)$$

Дээрх илэрхийлэлд η -Эвальдын параметр, $\Delta Z^* = Z_A^* - Z_B^*$ бөгөөд Z_A^* , Z_B^* –компонентуудийн эффектив валент тоонууд, $\varepsilon(q)$ -Хартрийн диэлектрик функц:

$$\varepsilon(q) = 1 - [1 - f(q)] \frac{4\pi Z e^{*2}}{\Omega q^2} \chi(q) \quad (3)$$

$$f(q) = q^2 / [2(q^2 + k_F^2 + k_s^2)]^2; \quad (4)$$

$$k_s^2 = 2k_F / \pi; \quad (5)$$

$$\chi(q) = \left(\frac{2}{3} E_F \right)^{-1} \left(\frac{1}{2} + \frac{4k_F^2 - q^2}{8qk_F} \right) \ln \left| \frac{q + 2k_F}{q - 2k_F} \right|; \quad (6)$$

$$E_F = \frac{\hbar k_F^2}{2m^*}; \quad (7)$$

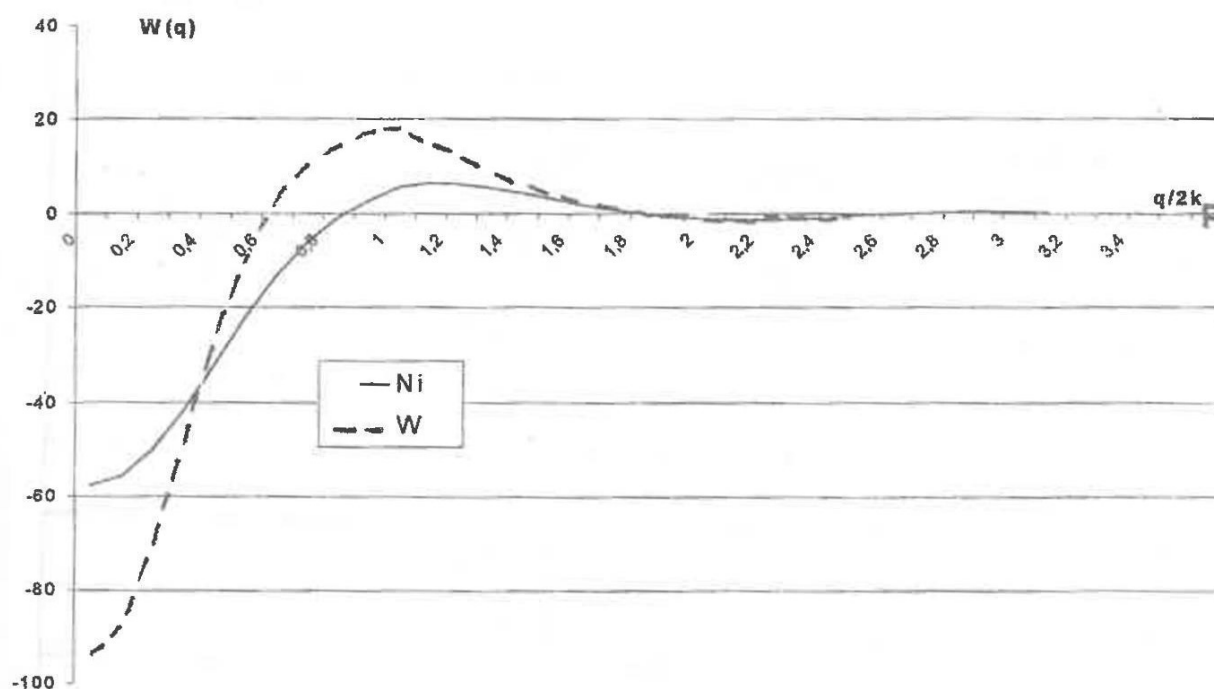
$$e^{*2} = (1 + \alpha_{eff}) e^2. \quad (8)$$

Эдгээр илэрхийллүүдэд орсон k_F – Фермийн долгионы вектор, e - электроны цэнэг. $|\Delta W|$ нь хайлшийн компонентуудын W_A, W_B формфакторуудын ялгавар $\Delta W = W_A - W_B$ бөгөөд тэдгээрийг тооцоолоход Анималугийн шилжилтийн металлуудын загвар

потенциалыг (ШМЗП) [6] ашигласан болно. Үүний дагуу Ni ба W элементүүдийн формфакторууд Хүснэгт 1-т үзүүлсэн параметруудээс хамаарна [6]. Эдгээр элементүүдийн формфакторуудын тооцооны үр дүнг Зураг 1-т харуулав.

Хүснэгт 1.

	A_0	A_1	A_2	R_m	Ω	Z	m	R_c	α_{eff}	E_c
Ni	0.99	1.05	0.96	2.2	73.6	2	1	1.034	0.063	0.093
W	2.30	2.85	2.50	2.0	106.5	6	1	1.172	0.032	0.101



Зураг1. Ni ба W элементүүдийн формфакторууд

Хэт шингэлсэн Ni-W системийн хатуу уусмал дахь ойрын эрэмбийг хуурмаг потенциалын арга ашиглан онолоор урьдчилан таамаглах зорилгоор Ni-1ат.%W ба Ni-3ат.%W хайлшуудын хувьд эрэмблэлтийн энергийн утгуудыг (1) томъёоны дагуу эхний дөрвөн координацын сфер дээр тооцоолсон үр дүнг Хүснэгт 2–т үзүүлэв. Нэгдүгээр координацын сферд харгалзах эрэмблэлтийн энерги эерэг бөгөөд бусад координацын сферүүдийнхээс харьцангуй их утгатай байгаа учир хэт шингэлсэн Ni-W хайлшуудад ойрын эрэмбэ байх ёстой гэсэн дүгнэлт хийж болно.

Хүснэгт 2

Агуулга	Координацын сферийн дугаар	Координацын сферийн Радиус r_i (а.н.)	Эрэмблэлтийн энерги $V_i \cdot 10^3$ (а.н.)
Ni-1ат.%W	1	4.711	56.2
	2	6.662	0.1
	3	8.160	-3.1
	4	9.422	1.6
Ni-3ат.%W	1	4.725	54.4
	2	6.682	-0.3
	3	8.184	-2.7
	4	9.450	1.7

РЦДС-ын аргачлалаар Ni-1.6ат.%W хайлшийн ойрын эрэмбийг тодорхойлох

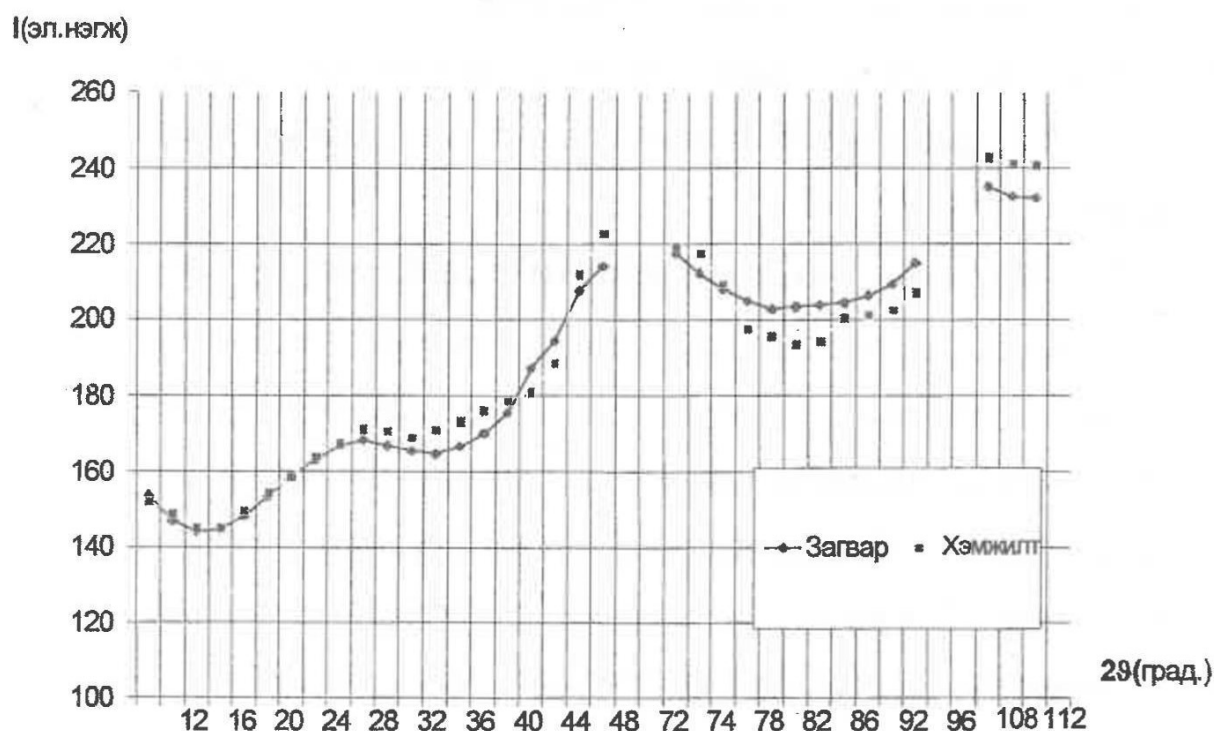
Дээжийн найрлагад маш өндөр цэвэршилттэй (99.99%) материалууд (Ni ба W) орсон. Дээжийг үл уурших вольфрам электродтой нуман пийшин дотор аргоны хийн орчинд усан хөргөлттэй зэс тавиур дээр хайлуулан бэлтгэсэн болно. Ийнхүү бэлтгэсэн дээжийг зүлгүүрээр толигор гадаргатай болтол нь өнгөлсөн. Үүнд зүлгүүрийн ширхэгийг нарийсган хэд хэдэн зүлгүүр хэрэглэсэн. Эцэст нь дээжийг алмаз нунтаг хэрэглэн өнгөлөв.

Дээжийг нэгэн төрөл болгох зорилгоор цэвэр аргоны хийн орчинд 800°C температурт 10 цагийн турш халаасан.

РЦДС-ын эрчимийг хэмжилтийг автоматжуулсан ДРОН дифрактометр дээр Fe_{α} цацрагийг ашиглан гүйцэтгэв. Рентген цацрагийг монохроматжуулахад цахиурын монокристалл хэрэглэв. Дээжнээс сарнисан цацрагийг БДС-6-05 сцинтилляцын тоолуураар Брэгг-Брентаногийн фокуслалтын нөхцөлд бүртгэсэн. Агаар дахь сарнилыг багасгах зорилгоор хос коллиматор хэрэглэсэн. Бүртгэгчийн өмнө байрлуулсан коллиматор агаар дахь сарнилыг бараг 80%-иар бууруулдаг. Агаар дахь сарнилын үлдсэн хувийг дээжийг суурилуулалгүй

хэмжсэн. Эрчмийн утгыг 2θ өнцгийн 10-120 градусын завсарт 33 цэг дээр хэмжсэн билээ. Сансрын цацраг ба багажны шуугианыг дифрактометрийг унтраан хэмжсэн болно. Эдгээр паразит нөлөөнүүдийг диффуз сарнилын эрчмээс хассан.

Дээжнээс сарнисан цацрагийн эрчмийг хайлмал кварцын сарнилын эрчмээр нормчлон электрон нэгжинд шилжүүлсэн. 1.6ат.%W хайлшийн электрон нэгжээр илэрхийлсэн РЦДС-ын эрчмийг Зураг 2-т үзүүлэв.



Зураг 2. 1.6ат.%W хайлшийн РЦДС-ын эрчим.

Энэхүү бүтээлд РЦДС-ын эрчмээс ойрын эрэмбийн параметрийн утга ба дебайн температурыг тодорхойлох аргачлалыг [4] хэрэглэсэн болно. Уг аргачлалын дагуу туршилтын РЦДС-ын эрчмээс комптоны, давхар брэггийн болон дулааны сарнилуудын эрчмийг хасдаг. Үүнд үлдэгдэл эрчим нь ойрын эрэмбийн параметр ба статик шилжилтийн параметрийн утгаас хамаардаг. Үлдэгдэл эрчмийн утгуудыг ашиглан хамгийн бага квадратын аргаар дебайн температур, статик шилжилтийн параметрийн тодорхой утгуудад эхний дөрвөн координацын сфер дээрх ойрын эрэмбийн параметрын утгуудыг тооцоолдог. Ийнхүү олсон ойрын эрэмбийн параметрийн утгуудыг хэрэглэн РЦДС-ын эрчмийн утгуудыг онолоор загварчлан тооцоолоод туршилтын утгуудтай харьцуулдаг. Үүнд туршилтын ба загварчилсан утгуудын ялгавруудын квадратуудын нийлбэрийг тооцоолдог. Уг нийлбэрийн утга болон туршилтын ба онолоор загварчилсан эрчмүүдийн жишилтээр ойрын эрэмбийн параметрийн утгууд бодитой эсэхийг дүгнэдэг. Иймээс туршилтын ба загварчилсан эрчмүүдийн зөрүү болон тэдгээрийн ялгавруудын квадратуудын нийлбэрийг багасгах зорилгоор хайлшийн концентраци, Дебайн температур, статик шилжилтийн параметруудийн утгуудыг

тус тус тодорхой алхамтайгаар хувьсган шаталсан тооцоо буюу минимизаци хэмээх арга үйлдлийг гүйцэтгэдэг. Үүнд ялгавруудын квадратуудын нийлбэрийн хамгийн бага утгад харгалзах ойрын эрэмбийн параметр,дебайн температур,хайлшийн найрлага болон статик шилжилтийн утгуудыг тодорхойлдог.Тэдгээрийг ашиглан загварчилсан эрчим нь туршилтын эрчимтэй хангалттай давхцах тохиолдолд тодорхойлогдсон утгууд бодит хэмээн дүгнэдэг. Энэхүү тооцоог бид “Эльбрус” тооцоолон бодох цогцолбор дээр гүйцэтгэсэн. Ni-1.6ат.%W хайлшийн эхний дөрвөн координацын сферийн ойрын эрэмбийн параметрууд α_1 , Дебайн температур T_D , статик шилжилтийн β параметрийн утгуудыг Хүснэгт 3-т үзүүлэв. Эдгээр утгуудыг ашиглан загварчилсан муруйг Зураг 2-т үзүүлэв. Уг муруй нь туршилтын муруйтай хангалттай сайн давхцаж буй нь ойрын эрэмбийн α_1 параметрууд, Дебайн температур T_D болон статик шилжилтийн параметрийн дээрх утгууд бодитой болохыг харуулж байна.

Хүснэгт 3.

α_1	α_2	α_2	α_3	$T_D(K)$	β
-0.004	-0.003	-0.006	0.05	410	0.06

Хүснэгтээс харахад эхний гурван координацын сферийн ойрын эрэмбийн параметрууд сөрөг тэмдэгтэй бөгөөд харьцангуй бага абсолют утгатай байна. Энэ нь Ni-1.6ат.%W хайлш дахь атомуудын байрлал “ганцаарчилсан хольцын” төрлийн ойрын эрэмбэтэй байгааг илэрхийлж байна. Туршилтын энэхүү үр дүн нь Ni-W системийн хэт шингэлсэн хайлшуудад ойрын эрэмбэ байх ёстой гэсэн хуурмаг потенциалын аргаар гүйцэтгэсэн онолын тооцооны үр дүнг батлаж байна.

Туршилт ба онолын аргуудыг ашиглан гарган авсан дээрх үр дүнг Ni-W системийн хайлшуудын судалгааны [1-4] үр дүнгүүдтэй жишье. Ni-W системд ойрын эрэмбийг анх Ni-15ат.%W хайлшинд тодорхойлсон [1]. 13.1 ба 10 ат.%W агуулсан хайлшуудын судалгаагаар ойрын эрэмбийн онцлогийг илрүүлсэн [2,3]. Ni-13.1ат.%W хайлшийн РЦДС-ийн эрчим гулсалтын өнцгөөс монотон бус хамааралтай бөгөөд нэгдүгээр максимум нь L_{12} нарийн бүтцийн (100) шугамын байрлалын ойролцоо ажиглагдсан байна. РЦДС-ийн эрчимийн хэмжилтийн утгуудыг боловсруулснаар 10 хүртэлх координацын сфер дээрх ойрын эрэмбийн параметруудийг тооцоолсон. Үүнд уяраасан дээжүүдэд нэгдүгээр сфер дээрх α_1 параметрийн утга 13 ат.%W найрлагатай хайлшинд байж бо-

лох максимум утгаас давж гарсан байна. Үүнийг холь - цын атомуудын түгэлт нэгэн төрөл бус хэмээн тайлбарласан билээ. Мөн ойрын эрэмбийн параметруудийн спектрийг шинжлэн вольфрамаар баяжсан мужуудад ойрын эрэмблэлт нь байж болох Ni_3W ба Ni_4W төрлүүдээр нэгэн зэрэг явагддаг гэсэн дүгнэлтийг гарагасан. $Ni-10\text{ат.}\%W$ хайлшинд ч мөн адил ойрын эрэмбийн α_1 параметрийн утга хэт өндөр утгатай гарсан байна. $Ni-6\text{ат.}\%W$ хайлшийн РЦДС эрчмийн судалгаагаар уг хайлшийн ойрын эрэмбийн параметрууд болон Дебайн температурын утгыг тодорхойлсон [4]. Үүнд вольфрамын бага найрлагатай дээжүүдэд ойрын эрэмбийг судлахын тулд хэвшмэл аргачлал тохирохгүй учраас статик шилжилтийг нарийн тооцдог аргачлалыг хэрэглэсэн. Хуурмаг потенциалын онолын аргаар Анималугийн ШМЗП-ыг ашиглан $Ni-6\text{ат.}\%W$ хайлшийн эрэмблэлтийн энергийг эхний дөрвөн координацын сфер тус бүрт тооцоолоход уг хайлшинд ойрын эрэмблэлт байх ёстой гэсэн дүгнэлт гарсан нь РЦДС-ийн туршилтаар нотлогдсон болно. Мөн эрэмблэлтийн энергийн утгуудыг ашиглан Каулийн томъёогоор эхний дөрвөн координацын сферийн ойрын эрэмбийн параметруудийг тооцоолоход туршилтын утгуудтай сайн дүйцэж байсан.

Ni-1.6ат.%W хайлшинд ойрын эрэмбэ илэрсэн нь Ni-W системийн хайлшуудын [1-4] судалгааны үр дүнгүүдтэй нийцэж байна. Уг хайлшийн атомуудын байрлал “ганцаарчилсан хольцын” төрлийн ойрын эрэмбэтэй байгааг вольфрамын бага агуулгаар тайлбарлаж болно. Уг хайлш ойрын эрэмбэлэлтэй байх боломжийг хуурмаг потенциалын онолын аргаар судалсан үр дүн нь туршилтын үр дүнтэй тохирч буй нь Ni-6ат.%W хайлшийн судалгааны [4] үр дүнгүүдтэй нийцэж байна.

Ni-W системийн хайлшууд дахь ойрын эрэмбийг хуурмаг потенциалын аргаар Анималугийн ШМЗП-ыг ашиглан амжилттай урьдчилан таамагласан нь уг потенциалыг шилжилтийн металлуудын хатуу уусмалын ойрын эрэмбийн онолын судалгаанд амжилттай хэрэглэх боломжтойг харуулж байна.

Резюме.

Методом диффузного рассеяния рентгеновских лучей определены параметры ближнего порядка разбавленного сплава Ni-1.6ат.%W, которые свидетельствуют о существовании ближнего порядка типа “одиночной примеси”. Этот результат согласуется с выводом предварительных расчетов энергии упорядо-

чения разбавленных сплавов системы Ni-W, проведенных в рамках метода псевдопотенциала.

Ашигласан ном зүй:

- [1].Mc.Manus G.M. J.Appl.Phys.,1965,v.6,n.11,p.3631-3633.
- [2].Кацнельсон А.А.,Алимов Ш.А.,Дажаев П.Ш.,Силонов В.М.,Ступина Н.Н. ФММ,1968,т.26,с.987.
- [3].Ammons A.M.,Spuelly J.E. J.Appl.Phys.,1968,v.39, n.8, p.3681-3688.
- [4].Силонов В.М.,Л.Энхтор ФММ,1995,т.38,в.№5,с.79-85.
- [5].Силонов В.М. Введение в статистическую и электронную теорию металлических твердых растворов,1983,Изд-во МГУ.
- [6].Animalu O.A.E. Phys.Rev.**B**,1973,**8**,n.8,p.3452-3554.