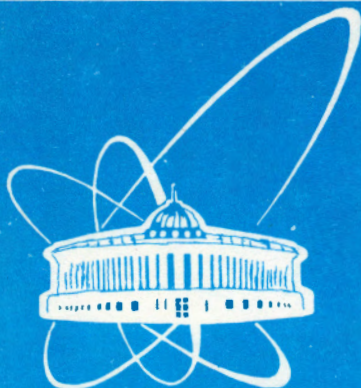


97-402



СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

P14-97-402

Г.Ф.Сырых*, И.Л.Сашин, М.Г.Землянов*, С.Н.Ишмаев*

КОНЦЕНТРАЦИОННАЯ ЗАВИСИМОСТЬ
СПЕКТРОВ АТОМНЫХ КОЛЕБАНИЙ
В АМОРФНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СПЛАВАХ Ni-Nb

*РНЦ «Курчатовский институт», 123182, Москва, Россия

1997

1. Введение

Ранее в работе [1] методом нейтронного изотопического контраста была исследована структура аморфных сплавов Ni-Nb на уровне парциальных корреляций. Были определены межатомные расстояния Ni-Ni, Nb-Nb и Ni-Nb, их дисперсия и координационные числа ближайшего окружения. Полученные данные свидетельствовали о существовании ярко выраженного химического ближнего порядка - преимущественной гетерокоординации. С уменьшением концентрации атомов Ni химический ближний порядок ослабевал.

Формирование атомной структуры и спектров колебаний в металлических стеклах на основе переходных металлов теоретически рассматривалось в работах [2,3]. В расчетах использовались потенциалы межатомного взаимодействия, полученные из первых принципов [4]. Наличие химического ближнего порядка и его зависимость от состава металлического стекла в рамках этого подхода связывается с различием структуры электронной d-зоны сплавляемых элементов. Для элементов с почти заполненной d-зоной (в данном случае Ni) взаимодействие слабое, в то же время взаимодействие атомов, имеющих существенное различие в заполнении d-оболочки - сильное. В системе парные потенциалы расположены в порядке ослабления взаимодействия следующим образом: Nb-Ni > Nb-Nb >> Ni-Ni.

В данной работе измерены парциальные спектры колебаний в металлическом стекле Ni₄₄Nb₅₆ и определено соотношение средних силовых констант

взаимодействия для атомов Ni и Nb. Проводится сравнение с аналогичными данными для стекла Ni₆₂Nb₃₈ [5].

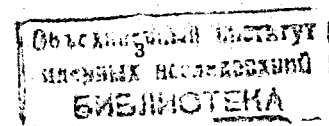
2. Эксперимент

Измерения проведены на образцах ⁵⁸Ni₄₄Nb₅₆ и ⁶⁰⁺⁶²Ni₄₄Nb₅₆, приготовленных ранее для исследования структуры [1]. Сечения рассеяния нейтронов на ядрах ⁵⁸Ni, смеси изотопов ⁶⁰⁺⁶²Ni и Nb равны 26, 3,1 и 6,3 барн соответственно. Спектры неупругого рассеяния нейтронов измерены на спектрометре КДСОГ-М [6] реактора ИБР-2. В некогерентном приближении [7] дважды дифференциальное сечение рассеяния нейтронов, $d^2\sigma/d\Omega d\omega$, на многокомпонентной системе связано с парциальными спектрами колебаний, $g_i(\omega)$, соотношением

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} = \frac{k}{k_0} k^2 \frac{\hbar^2}{2\omega} [n(\omega) + 1] \sum_i (c\sigma_i / m_i) \exp(-2W_i) g_i(\omega), \quad (1)$$

где $k = |\mathbf{k} - \mathbf{k}_0|$ - разность между рассеянным и падающим волновым вектором нейтрона; $n(\omega)$ - функция заселенности Бозе-Эйнштейна; c, σ и m - концентрация, полное сечение рассеяния нейтронов и масса атомов i соответственно и $2W$ - соответствующий фактор Дебая - Валлера.

Проведение измерений на двух химически идентичных образцах, но с различным изотопным составом позволяет восстановить парциальные спектры



колебаний отдельных атомов. Была сделана поправка на двухфононное рассеяние в гауссовом приближении [8]. Учет многократного рассеяния не проводился, так как пропускание образцов составило $\sim 0,92$.

3. Обсуждение

На рисунке показаны парциальные спектры колебаний атомов Ni и Nb.

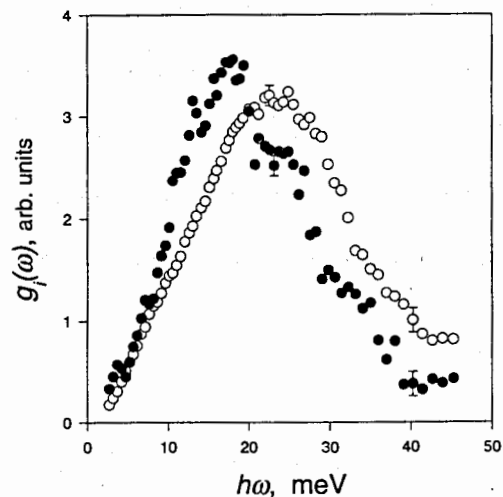


Рис. Парциальные плотности колебательных состояний атомов Ni и Nb в металлическом стекле $Ni_{44}Nb_{56}$: \circ - $g_{Ni}(\omega)$ и \bullet - $g_{Nb}(\omega)$

Видно, что спектр более легких атомов Ni смещен в сторону больших частот по сравнению со спектром атомов Nb. По парциальным спектрам были рассчитаны средние квадраты частот $\langle \omega^2 \rangle_i = \frac{\int_0^{\infty} \omega^2 g_i(\omega) d\omega}{\int_0^{\infty} g_i(\omega) d\omega}$, которые связаны с эффективными силовыми константами взаимодействия ($B_i = \langle \omega^2 \rangle / m_i$) отдельных атомов со всеми окружающими атомами [9]. Соотношение эффективных силовых

констант атомов Ni и Nb, B_{Ni}/B_{Nb} составило $0,73 \pm 0,1$. Из работы [5] следует, что в сплаве $Ni_{62}Nb_{38}$ это соотношение составляет $0,60 \pm 0,01$. Таким образом, в аморфной системе Ni-Nb эффективная силовая константа взаимодействия атомов Ni слабее по сравнению с аналогичной характеристикой атомов Nb. С уменьшением концентрации атомов Ni в сплаве различие эффективных силовых констант уменьшается. В работе [4] рассчитывалась концентрационная зависимость парциальных спектров колебаний в аморфной системе Ni-Zr. Было получено, что с уменьшением концентрации атомов Ni эффективные силовые константы отдельных атомов выравниваются. В соответствии с теоретическими представлениями [2] эти выводы применимы и к системе Ni-Nb. Полученные экспериментальные данные качественно согласуются с предсказаниями теории.

Работа выполнена в рамках программы РФФИ (проект 95-02-04690) и программы "Нейтронные исследования вещества".

Список литературы.

- [1]. E. Svab, Gy. Meszaros, J. Takacs, S.N. Ishmaev, S.L. Isakov, I.P. Sadikov, J. Non-Cryst. Solids, v.144 (1992), 99.
- [2]. Ch. Hausleitner, J. Hafner, Phys. Rev. B, v. 45, N 1 (1992), 128.
- [3]. J. Hafner and M. Krajci, J. Phys.: Condens. Matter 6 (1994) 4631.
- [4]. Ch. Hausleitner, J. Hafner, Phys. Rev. B, v. 45, N 1 (1992), 115.
- [5]. G.F. Syrykh, M.N. Khlopkin, S.N. Ishmaev, P.I. Soldatov, J. Non-Cryst. Solids (1995) v.192-193, p.282.
- [6]. Г. Балука, А.В. Белушкин, С.И. Брагин, Т. Залески, М.З. Ишмухаметов, И. Натканец, В. Олеярчик и Я. Павелчик, Препринт P13-84-242, ОИЯИ, Дубна (1984).
- [7]. И.И. Гуревич, Л.В. Тарасов, Физика нейтронов низких энергий (Москва: Наука) 1965.
- [8]. V.F. Turchun, Slow Neutrons (Jerusalem: Sivan) 1965.
- [9]. J.-B. Suck, H. Rudin, in "Glassy Metals II" ed. H. Beck, H.-J. Guntherodt, Topic in Applied Phys. 53 (Springer, Berlin, Heidelberg, New York) 1983.

Рукопись поступила в издательский отдел
29 декабря 1997 года.

Сырых Г.Ф. и др.

P14-97-402

Концентрационная зависимость спектров атомных колебаний
в аморфных металлических сплавах Ni-Nb

На спектрометре КДСОГ-М проведены измерения спектров неупругого рассеяния нейтронов на образцах металлического стекла $Ni_{44}Nb_{56}$ с различным изотопным составом. Восстановлены парциальные спектры колебаний атомов Ni и Nb. Сделана оценка соотношения эффективных силовых констант атомов Ni и Nb, которая оказалась равной $0,73 \pm 0,01$. Аналогичное соотношение для сплава $Ni_{62}Nb_{38}$ составляет $0,60 \pm 0,01$. Полученные результаты находятся в качественном согласии с теоретическими предсказаниями.

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики им.И.М.Франка ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 1997

Перевод авторов

Syrykh G.F. et al.

P14-97-402

Concentration Dependence of Partial Vibrational Spectra
in Ni-Nb Amorphous System

A neutron inelastic scattering study is presented of $Ni_{44}Nb_{56}$ metallic glass, with isotope substitution for Ni, and the results are compared to earlier data for $Ni_{62}Nb_{38}$ (Ni isotopic substitution). The ratio of the effective force constants, B_{Ni}/B_{Nb} , is estimated to be 0.73 ± 0.01 for $Ni_{44}Nb_{56}$ alloy, that is bigger than for $Ni_{62}Nb_{38}$ alloy (0.60 ± 0.01). The results are in consistency with theoretical predictions.

The investigation has been performed at the Frank Laboratory of Neutron Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 1997