

С 342Г2

Н-335

ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

Phys. Lett., 1967, v. 24A/IV-67  
N10, с. 517-519



РЗ - 3216

ЛАБОРАТОРИЯ НЕЙТРОННОЙ ФИЗИКИ

И. Натканец, К. Парлиньски, А. Байорек,  
М. Судник-Хрынкевич

ЛОКАЛЬНЫЕ КОЛЕБАНИЯ В СПЛАВАХ  
Li - Mg И Be - Cu

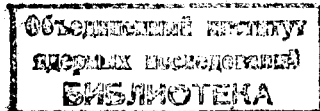
1967.

P3 - 3216

И. Натканец, К. Парлиньски, А. Байорек,  
М. Судник-Хрынкевич

ЛОКАЛЬНЫЕ КОЛЕБАНИЯ В СПЛАВАХ  
Li - Mg И Be - Cu

Направлено в Physics Letters



В кристалле, содержащем примесные атомы с массой  $m'$ , меньшей массы атомов матрицы  $m$ , могут возникать дополнительные колебания с частотой выше максимальной частоты колебаний чистого кристалла. Частота этих локальных колебаний определяется разницей масс, величиной силовых постоянных вблизи примесного атома и некоторыми свойствами матрицы. Вопрос об изменении силовых постоянных кристаллической решетки вблизи примесных атомов не решен окончательно<sup>1/</sup>.

Частоты локальных колебаний являются решением уравнения

$$|\bar{G}(\omega^2) \delta \bar{L} - \bar{1}| = 0, \quad (1)$$

где  $\bar{G}(\omega^2)$  - функция Грина для кристалла матрицы,

$\delta \bar{L}$  - матрица, определяющая возмущение, вызванное присутствием примесного атома.

Исходя из предположений, что силовые постоянные вблизи примесного атома не изменяются и примесные атомы находятся в узлах решетки, частоты локальных колебаний можно рассчитать из следующего соотношения:

$$\epsilon \omega^2 \int_0^m \frac{g_a(\omega_0) d\omega_0}{\omega^2 - \omega_0^2} = 1, \quad (2)$$

где  $\epsilon = 1 - \frac{m'}{m}$ ;  $g_a(\omega_0)$  - спектр колебаний чистого кристалла (матрицы) в направлении главной оси  $a$ ;  $a = a, b, c$ ;  $\omega_m$  - максимальная частота колебаний матрицы.

Сравнение частоты, найденной экспериментально, с частотой, вычисленной с помощью соотношения (2), позволяет сделать заключение о поведении силовых постоянных при замещении атома матрицы атомом примеси.

Метод неупругого рассеяния нейтронов дает возможность непосредственно наблюдать локальные колебания в металлических сплавах. В таких системах возможно создать все условия, необходимые для возникновения локальных колебаний. Однако для наблюдения этих колебаний компоненты сплава должны иметь подходящие нейтронные сечения<sup>/2,3/</sup>.

Сплавы  $\text{Li}_{0,05} - \text{Mg}_{0,95}$  и  $\text{Li}_{0,10} - \text{Mg}_{0,90}$  в исследуемом диапазоне температур представляют собой однородный сплав с гексагональной структурой магния<sup>/4/</sup>. Сплав медь-бериллий однороден только при малой концентрации бериллия<sup>/5/</sup>. Поэтому образцы  $\text{Be}_{0,02} - \text{Cu}_{0,98}$  и  $\text{Be}_{0,05} - \text{Cu}_{0,95}$  отжигались при температуре  $900^\circ\text{K}$ , а затем закаливались. Таким образом были получены пересыщенные сплавы с однородной гранецентрированной структурой меди. Нейтронные дифракционные исследования образца сплава  $\text{Be}_{0,05} - \text{Cu}_{0,95}$  не выявили присутствия другой фазы.

Измерения спектров неупругого рассеяния нейтронов были проведены под углом  $90^\circ$  при температуре образцов  $113^\circ\text{K}$  на спектрометре по времени пролета с бериллиевым фильтром перед детектором<sup>/6/</sup>. На рис. 1 и 2 сравнены энергетические спектры неупруго рассеянных нейтронов. Данные для магниевых сплавов исправлены на поглощение в литии. Пики при  $E = (35 \pm 2)$  мэв (рис. 1) и  $E = (42 \pm 2)$  мэв (рис. 2) представляют собой пики локальных колебаний атомов лития в матрице магния и атомов бериллия в матрице меди соответственно. Частота локальных колебаний, найденная из соотношения (2), существенно больше измеренной экспериментально (см. таблицу). Эта разница энергий приписывается изменению силовых постоянных вблизи примесного атома. В пределах точности эксперимента не наблюдается влияния концентрации примесей на положение частот локальных колебаний.

Оценка изменения силовых постоянных проведена в приближении очень легкой примеси (частота локальных колебаний велика по сравнению со средней частотой колебаний матрицы). Предполагается также, что присутствие примесного атома изменяет силовые постоянные взаимодействия между примесью и всеми атомами матрицы, но не изменяет силовых постоянных взаимодействия между атомами матрицы. При этих предположениях недиагональные элементы матрицы  $\bar{G}(\omega) \delta \bar{L}$  стремятся к нулю, и из уравнения (1) получается интегральное уравнение, определяющее частоты локальных колебаний.

$$\left[ \epsilon \omega^2 - p_a \int_0^{\omega_m} \omega^2 g_a(\omega_0) d\omega_0 \right] \int_0^{\omega_m} \frac{g_a(\omega_0) d\omega_0}{\omega^2 - \omega_0^2} = 1, \quad (3)$$

где  $\phi_a = 1 - \frac{\phi_{aa}^{(00)}}{\phi_{aa}^{(0)}(00)}$ ,  $\phi_{aa}^{(0)}(00) = M \int_0^{\omega_m} \omega_0^2 g_a(\omega_0) d\omega_0$ .

Из условия инвариантности силовых постоянных относительно сдвигов всего кристалла вытекает, что изменение силовых постоянных нулевой координационной сферы равно взятой с обратным знаком сумме изменений всех остальных силовых постоянных примесного атома.

$$\phi_{aa}^{(0)}(00) - \phi_{aa}(00) = - \sum_{\ell=1}^{\infty} [\phi_{aa}^{(0)}(0\ell) - \phi_{aa}(0\ell)], \quad (4)$$

где  $\phi_{aa}^{(0)}(0\ell)$ ,  $\phi_{aa}(0\ell)$  - силовые постоянные атомов матрицы и примесного атома соответственно. Примесный атом находится в узле  $\ell = 0$ .

Параметр  $p_a$  определяет величину изменения силовых постоянных примесного атома в направлении главной оси  $a$ . Для магниевых сплавов ( $a = b \neq c$ ) спектры частот  $g_a(\omega_0)$  и  $g_c(\omega_0)$  различны. Им соответствуют найденные из уравнения (2) энергии локальных колебаний 43,1 мэв и 41,6 мэв для направления  $a$  и  $c$  соответственно. Разрешающая способность спектрометра не позволяет разделить эти частоты, поэтому значение параметра  $p_a$  определено на основе полного спектра частот магния<sup>/7/</sup>. В случае сплавов меди  $p_a = p_b = p_c$ .

Значение параметра  $p_a$ , найденное из уравнения (3) при использовании спектров частот, приведенных в литературе<sup>/7-10/</sup>, и измеренные нами частоты локальных колебаний приводятся в таблице. Наиболее вероятные значения параметра  $p_a$  равны 45% для примесей лития в магнии и 58% для бериллия и меди. В обоих случаях использованные в расчетах спектры частот получены по измеренным дисперсионным кривым соответствующих кристаллов.

Авторы благодарят Ф.Л. Шапиро, Е.А. Яника, и Б. Бураса за ценные замечания, П.К. Иенгара за предоставление нам графиков спектров частот магния, А. Галантого и С. Беднарского за изготовление сплавов и В. Олейричка за помощь в измерениях.

Т а б л и ц а

С п л а в	Энергии локальных колебаний		$P_a = 1 - \frac{\phi_{aa}^{(00)}}{\phi_{aa}^{(0)}(00)}$	$g(\omega_0)$
	эксперим. значение	рассчитанное из уравнен.(2)		
Li - Mg $\epsilon = 0,715$	$(35 \pm 2)$ мэВ	43,1 мэВ	0,45	Р.К. Iyengar /7/
Be - Cu $\epsilon = 0,858$	$(42 \pm 2)$ мэВ	54,0 мэВ	0,43	Е.Н. Jacobsen /8/
		56,1 мэВ	0,52	R.B. Leighton /9/
		57,9 мэВ	0,56	S.K. Sinha /10/
		61,5 мэВ	0,60	Дебаевский спектр

## Л и т е р а т у р а

1. A.A.Maradudin. Solid State Physics, Academic Press, New York and London, 1966.
2. Ю. Карац, Я. Иосилевский. ЖЭТФ, 44 (4), 1375 (1963).
3. K.Parlinski. Postepy Fizyki, 16 (6), 667(1965) - in Polish.
4. F.H.Herbstein and B.L.Avarbach. Acta Met., 4, 407 (1956).
5. M.Hansen, K.Anderko. Constitution of Binary Alloys, Vol. II. McGraw-Hill Book Company, New York-Toronto-London, 1958.
6. A.Bajorek, T.A.Machekhina, K.Parlinski, F.L.Shapiro. Inelastic Scattering of Neutrons, vol. II, p. 519, International Atomic Energy Agency, Vienna, 1965.
7. P.K.Iyengar, G.Venkataraman, P.R.Vijayaraghavan and A.P.Roy. Inelastic Scattering of Neutrons, Vol. I, p. 153, International Atomic Energy Agency, Vienna, 1965.
8. E.H.Jacobsen. Phys.Rev., 97, 654 (1955).
9. R.B.Leighton. Rev.Mod. Phys., 20, 165 (1948).
10. S.K.Sinha. Phys.Rev., 143, 422 (1966).

Рукопись поступила в издательский отдел  
13 марта 1967 г.

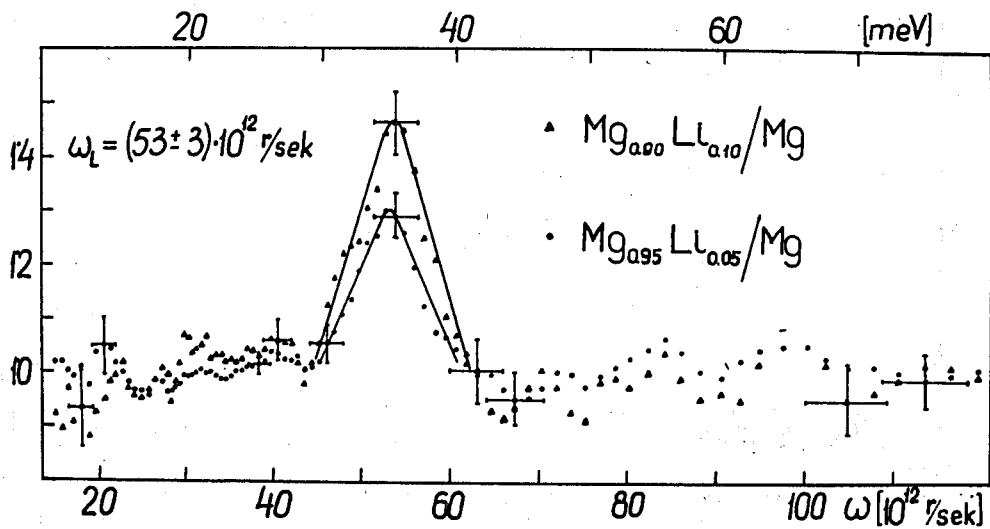


Рис. 1. Энергетические спектры неупруго рассеянных нейтронов на сплавах  $\text{Li}_{0.05} - \text{Mg}_{0.95}$  и  $\text{Li}_{0.10} - \text{Mg}_{0.90}$ , исправленные на поглощение литием и разделенные на спектр неупруго рассеянных нейтронов чистым магнием.

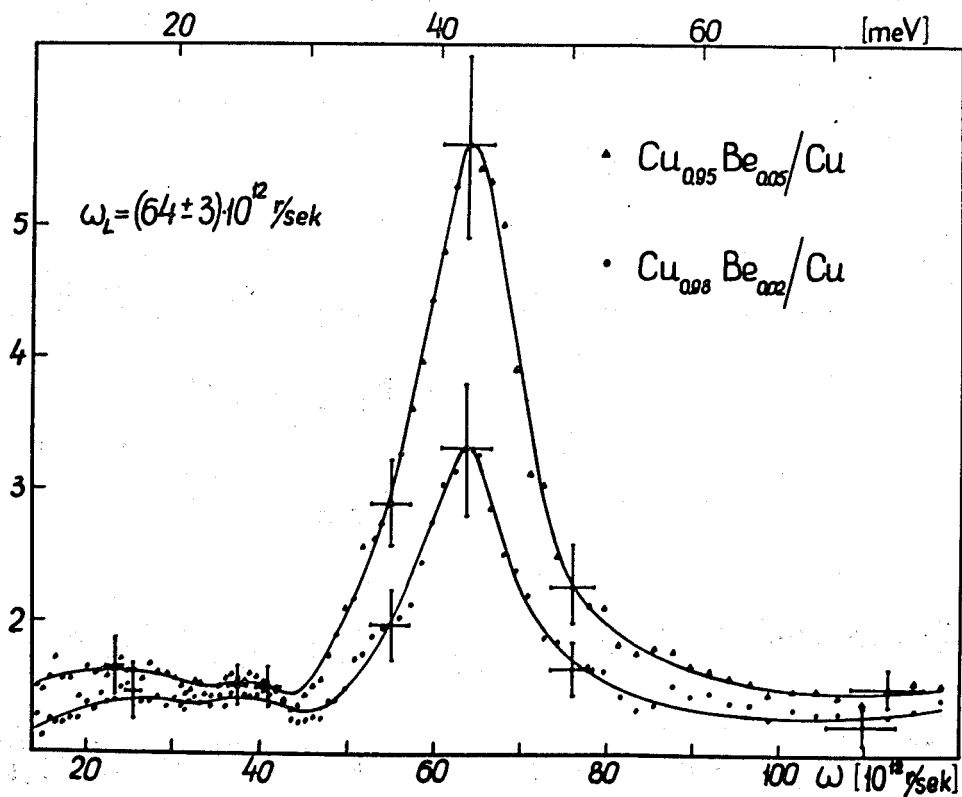


Рис. 2. Энергетические спектры неупруго рассеянных нейтронов на сплавах  $\text{Be}_{0.02}\text{-Cu}_{0.98}$  и  $\text{Be}_{0.05}\text{-Cu}_{0.95}$ , разделенные на спектр нейтронов, рассеянных на чистой меди.