

Таким образом, нами были впервые впервые синтезированы методом ЖФЭ твердые растворы $Al_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}/InAs$ ($0.00 < x < 0.06$) при температурах синтеза 973 и 923 К, причем максимальное значение энергии в максимуме полосы фотолюминесценции (при $T = 4.2$ К) достигало $h\nu_{max} = 0.50$ эВ для состава $x = 0.058$.

Из анализа диаграммы плавкости системы $Al-In-As-Sb$ следует, что для получения твердых растворов, более богатых Al ($0.06 < x < 0.015$), необходимо уменьшить температуру эпитаксиального синтеза до 873 К ($x < 0.11$) либо до 843 К ($x < 0.15$).

Выражаем благодарность М.С. Бреслеру и О.Б. Гусеву за проведение фотолюминисцентных исследований.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Гусейнов А.А., Литвак А.М., Попов А.В., Чарыков Н.А., Шерстнев В.В., Яковлев Ю.П. // Письма в ЖТФ. 1990. В печати.
- [2] Bhan J., Joulie A., Mani N., Joulie A.-M., Albert C. // SPIE, Mater. Techn. for Optic Commun. 1987. V. 866. P. 126-134.
- [3] Гусейнов А.А., Джурганов Б.Е., Литвак А.М., Мирсагатов М.А., Чарыков Н.А., Шерстнев В.В., Яковлев Ю.П. // Письма в ЖТФ. 1989. Т. 15. Вып. 12. С. 67-73.

Физико-технический
институт им. А.Ф. Иоффе
АН СССР, Ленинград

Поступило в Редакцию
28 апреля 1990 г.

Письма в ЖТФ, том 16, вып. 13

12 июля 1990 г.

05.1

© 1990

О КОНФИГУРАЦИИ СОБСТВЕННОГО МЕЖУЗЕЛЬНОГО АТОМА В α -ЖЕЛЕЗЕ

А.А. Васильев, Д.Б. Мизандронцев

Собственные межузельные атомы являются одними из основных элементарных точечных дефектов, возникающих в кристаллических материалах при интенсивных внешних воздействиях. Так, при облучении кристаллов частицами высоких энергий межузельные атомы образуются в равном числе с вакансиями и специфика их дальнейшего поведения определяет ряд важных радиационных эффектов

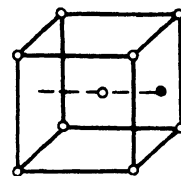
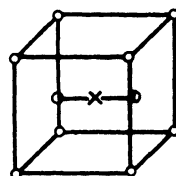
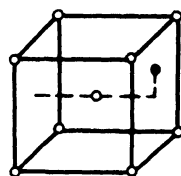
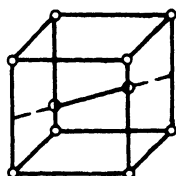
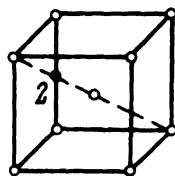
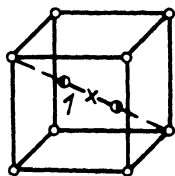
(например, радиационное распухание). С точки зрения описания их поведения в реальных кристаллах, межузельные атомы являются гораздо более сложным объектом, чем вакансии. Это обусловлено тем, что этот дефект имеет несколько упруго анизотропных микроскопических конфигураций разной симметрии [1], которые различаются механизмом и энергией миграции, реакцией на поля напряжений и другими свойствами. При этом существенно, что энергии образования этих конфигураций могут отличаться незначительно [1-4].

Подробная информация об энергиях образования и миграции межузельных атомов в различных конфигурациях, а также параметрах, определяющих их взаимодействие с другими дефектами кристаллов, является весьма важной для количественных оценок многих радиационных эффектов, а также для выяснения их микроскопических механизмов. В то же время для ряда практически важных металлов объем и достоверность данных по межузельным атомам не достаточны [4, 5]. Например, считается [1-4], что в α -железе наиболее выгодной является расщепленная (гантельная) конфигурация, ориентированная вдоль направлений $\langle 110 \rangle$ (см. рисунок, в). Такая точка зрения основана на результатах, полученных методом моделирования на ЭВМ с использованием парного [2] и многочастичного [3, 4] короткодействующих эмпирических потенциалов межатомного взаимодействия. При этом ее справедливость в случае дальнедействующих потенциалов, учитывающих природу металлической связи, не проверялась. Однако известно [6, 7], что результаты, полученные при исследовании точечных дефектов в металлах с короткодействующими потенциалами и потенциалами, следующими из теории псевдопотенциала, могут существенно отличаться.

В данной работе различные конфигурации межузельного атома в α -железе исследованы методом молекулярной динамики с парным потенциалом межатомного взаимодействия, полученным на основе теории псевдопотенциала. При расчете потенциала использовались формфакторы типа Хейне-Абаренкова [8] с параметрами Анималу [9]. Обменно-корреляционные поправки в диэлектрической функции выбраны в виде, предложенном в работе [10]. В потенциале был учтен вклад в прямое взаимодействие, обусловленный отталкиванием перекрывающихся электронных оболочек, что существенно при исследовании межузельных атомов. Параметры соответствующего потенциала Борна-Майера были взяты из работы [11].

Расчетные кристаллиты имели сферическую форму и содержали либо 1471 (малый кристаллит), либо 4111 (большой кристаллит) атомов. Использовали жесткие граничные условия, закрепляя атомы внешних слоев кристаллита в позициях идеальной структуры. Толщина жесткой границы превышала радиус обрезания потенциала, который составлял 1.97 параметров решетки (a), что незначительно меньше радиуса шестой координационной сферы ($2.0a$). Равновесные конфигурации межузельного атома получали с помощью стандартной процедуры квазидинамического метода, при которой в процессе релаксации кристаллита скорости атомов его подвижной

Основные конфигурации собственного межузельного атома в о.ц.к.-решетке. Светлые кружки - атомы в узлах решетки; зачерненные - межузельные атомы; зачерненные наполовину - атомы гантельных конфигураций. а - гантель $\langle 111 \rangle$, б - краудион, в - гантель $\langle 110 \rangle$, г - тетраэдрическая конфигурация, д - гантель $\langle 100 \rangle$, е - октаэдрическая конфигурация.



области зануляли в момент достижения полной кинетической энергии очередного максимального значения.

На рисунке схематически представлены шесть основных конфигураций межузельного атома. Разности между энергиями образования этих конфигураций и конфигурации гантели $\langle 110 \rangle$ (см. рисунок, в) ΔE , полученные нами и авторами [2-4], приведены в таблице. Согласно нашим результатам, наиболее энергетически выгодными оказались краудионные конфигурации в плотноупакованном направлении $\langle 111 \rangle$ (см. рисунок, а, б), а не гантель $\langle 110 \rangle$. Первая из них симметрична относительно центра элементарного куба о.ц.к. структуры (см. рисунок, а), а вторая получена при внедрении межузельного атома в центральное положение между ближайшими соседями (см. рисунок, б). Обе конфигурации краудиона в пределах ошибки расчетов имеют одинаковую энергию образования и на 0.11 эВ выгоднее гантели $\langle 110 \rangle$. По данным работ [2-4] эти конфигурации также имеют близкие энергии.

Как следует из таблицы, энергии образования межузельного атома в октаэдрической конфигурации и в конфигурации гантели $\langle 100 \rangle$ (см. рисунок, д), как и в [3, 4], различаются на 0.02 эВ. По данным Джонсона [2] эта разница составляет 0.17 эВ.

Источник	E, эВ					
	$\langle 111 \rangle$	Краудион	$\langle 110 \rangle$	Тетра	$\langle 100 \rangle$	Окта
Наши расчеты	0.11	0.11	-	0.05	0.33	0.35
[2]	0.32	0.36	-	0.85	1.29	1.12
[3, 4]	0.05	0.06	-	0.50	0.82	0.84

Для исключения возможного влияния жестких граничных условий на приведенные результаты, расчеты равновесных конфигураций краудиона и гантели $\langle 110 \rangle$ были повторены для большого кристаллита с радиусом подвижного ядра, увеличенным в 1.54 раза. При этом соотношение энергий образования этих конфигураций практически не изменилось.

Кроме расчетов энергий образования межузельного атома, были также вычислены энергии миграции краудиона и гантели $\langle 110 \rangle$. При имитации миграции краудиона атом 1 (см. рисунок, а) постепенно перемещался в положение атома 2 (см. рисунок, б) с фиксацией в промежуточных положениях и релаксацией кристаллита. Полученный таким образом „мягкий” энергетический барьер миграции равен 0.01 ± 0.005 эВ и отвечает нижней оценке энергии миграции краудиона. Энергия миграции гантели по траектории, исследованной в [1, 2], составила 0.36 эВ, что близко к значению, которое приводит Джонсон [2] (0.33 эВ). Отметим, что небольшое возмущение гантели $\langle 110 \rangle$ (например, малое смещение одного из ее атомов по направлению к диагонали элементарного куба) приводило к конверсии гантельной конфигурации в краудионную.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Кирсанов В.В., Орлов А.Н. // УФН. 1984. Т. 142. С. 219-264.
- [2] Johnson R.A. // Phys. Rev. A. 1964. V. 134. P. 1329-1326.
- [3] Harder J.M., Vason D.J. // Phil. Mag. A. 1986. V. 54. P. 651-661.
- [4] Harder J.M., Vason D.J. // Phil. Mag. A. 1988. V. 58. P. 165-178.
- [5] Evans J.H. // J. Nucl. Mater. 1985. V. 132. P. 147-155.
- [6] Vasilyev A.A., Sirotkin V.V., Melker A.I. // Phys. stat. sol. (b). 1985. V. 131. P. 537-544.
- [7] Вакс В.Г., Капинос В.Г., Осецкий Ю.Н., Самолук Г.Д., Трефилов А.В. // ФТТ. 1989. Т. 31. С. 139-149.
- [8] Хейне В., Коэн М., Уэйр Д. Теория псевдопотенциала, М.: Мир, 1987. 236 с.
- [9] Heine V., Abarinkov I.G. // Phil. Mag. 1964. V. 9. P. 451-465.
- [10] Animalu A.O.E. // Phys. Rev. B. 1973. V. 8. P. 3542-3554.
- [11] Vashista P., Singwi K.S. // Phys. Rev. B. 1971. V. 6. P. 875-887.
- [12] Gaydaenko V.I., Nikulin V.K. Chem. Phys. Lett. 1970. V. 7. P. 360-362.