

©1993

ИЗУЧЕНИЕ ПРИМЕСНЫХ КОЛЕБАНИЙ АТОМОВ АЗОТА  
В  $\alpha$ - И  $\beta$ -ФАЗАХ ВНЕДРЕНИЯ СИСТЕМЫ Та-N  
МЕТОДОМ НЕУПРУГОГО РАССЕЯНИЯ  
МЕДЛЕННЫХ НЕЙТРОНОВ

С.И.Морозов, В.В.Казарников

Приводятся экспериментальные результаты исследования сплава Ta<sub>0.45</sub> методом неупрого рассеяния медленных нейтронов. Определена частота колебаний атомов азота в  $\beta$ -фазе Та-N ( $\hbar\omega = 74 \pm 0.9$  мэВ) и построена зависимость  $\hbar\omega(R)$  частот колебаний атомов азота в фазах внедрения IV и V групп от радиуса октаэдрического междоузлия в решетке атомов матрицы. Получены константы силового взаимодействия тантал-азот в  $\alpha$ - и  $\beta$ -фазах с учетом влияния колебаний атомов матрицы.

К настоящему времени накоплена достаточно обширная экспериментальная информация об энергии колебаний  $p$ -элементов внедрения X (X=O,N,C) в переходных металлах III, IV, V и VIII групп (Me), полученная методом неупрого рассеяния нейтронов (НРН) [<sup>1-9</sup>].

Для построения эффективного потенциала взаимодействия Me-X для изученных методом НРН систем необходимо провести общий анализ зависимости энергии колебаний внедренных атомов от межатомного расстояния  $R_{Me-X}$ . Однако если для твердых растворов внедрения (ТРВ) с ГПУ структурой металлической решетки (Zr, Ti), где искажения, вносимые внедренными атомами, невелики и могут быть учтены, зависимость  $\hbar\omega(R)$  построена [<sup>2,10</sup>], то для ТРВ с ОЦК структурой (V, Nb, Ta) введение в решетку  $p$ -элемента внедрения приводит к сильной локальной деформации вокруг внедренных атомов и определение истинного расстояния металл-примесь затруднено. Кроме того, сильное деформационное взаимодействие может приводить к кластеризации внедренных атомов в этих сплавах, что в свою очередь существенным образом оказывается на энергетическом положении примесной зоны в спектре частот сплава.

С другой стороны, переходные металлы V группы образуют с  $p$ -элементами N и C упорядоченные фазы внедрения со стехиометрией  $Me_2X$ , в которых подрешетка атомов металла представляет собой ГПУ структуру и расстояние Me-X в этих системах может быть определено из параметров решетки. Характер упорядочения  $p$ -элементов в них таков, что внедренные атомы стремятся расположиться как можно дальше друг от друга. Поэтому в первом приближении можно пренебречь прямым взаимодействием между внедренными атомами.

Ранее сообщались данные о колебаниях азота и водорода, полученные для  $\beta$ -фазы  $V_3N$  и  $V_3NH_{0.1}$  [<sup>5</sup>]. В настоящей работе проведены измерения спектров НРН сплава TaN<sub>0.45</sub>, получен спектр колебаний азота в  $\alpha$ - и  $\beta$ -фазах и определены константы связи атомов N и Ta.

# 1. Постановка эксперимента и обработка результатов

Область гомогенности  $\beta$ -фазы  $TaN_x$ ,  $x = 0.41 \div 0.5$ . Исследуемый образец был приготовлен многократной переплавкой чистого тантала с мононитридом тантала в пропорциях, соответствующих составу  $Ta_2N$  в атмосфере очищенного аргона. Тем не менее рентгеновский фазовый анализ показал, что в полученном образце помимо  $\beta$ -фазы содержится значительное количество фазы  $\alpha$ - $TaN_x$ . Однако основная масса азота растворена в  $\beta$ -фазе (94%), поскольку его растворимость в  $\alpha$ -фазе при комнатной температуре  $\approx 3$  ат.%

Определенные из рентгеновских данных параметры решетки  $\beta$ -фазы составили  $a = 3.048 \text{ \AA}$  и  $c = 4.918 \text{ \AA}$ , что соответствует составу  $TaN_{0.45}$ .

Константы связи металл-примесь и энергия колебаний атомов азота в фазах внедрения  $MeN_x$

Фаза внедрения	Структура металлической решетки	Энергия колебаний атомов N, мэВ	Ширина уровня, мэВ	Константа связи $\gamma \cdot 10^4 \frac{\text{дин}}{\text{см}}$	Радиус ОМ, Å	Параметр решетки, Å	Литература
$\alpha$ - $TaN_{0.03}$	ОЦК	$60.1 \pm 0.9$ $95 \pm 4.5$	$5.9 \pm 1.6$ $\simeq 10$	$9.3 \pm 0.3$ $23.3 \pm 2.2$	2.345 1.658	$a = 3.317$	[6]
	ОЦК	$59 \pm 2.2$ $8.9 \pm 4.5$	$7 \pm 2$ $13 \pm 5$	$9.0 \pm 0.6$ $20.4 \pm 2.1$	2.345 1.658	$a = 3.317$	
$\beta$ - $TaN_{0.45}$	ГПУ	$74 \pm 0.9$	$8 \pm 1$	$14.1 \pm 0.3$	2.147	$a = 3.048$ $c = 4.918$	наст. раб.
$\alpha$ - $VN_{0.05}$	ОЦК	$70 \pm 1$ $97 \pm 2$	$9.4 \pm 0.5$ $12.0 \pm 1.5$	$11.4 \pm 0.3$ $22.0 \pm 0.9$	2.15 1.52	$a = 3.04$	
$VN$	ГЦК	$70 \pm 1$	-	$11.4 \pm 0.3$	2.07	$a = 4.14$	[4]
$\beta$ - $V_3N$	ГПУ	$80 \pm 1$	$8.0 \pm 1.5$	$15.0 \pm 0.4$	1.987	$a = 2.823$ $c = 4.545$	[5]
$\alpha$ - $ZrN_{0.3}$	ГПУ	$62 \pm 0.5$	-	$9.5 \pm 0.2$	2.287	$a = 3.26$ $c = 5.2$	[9]
$ZrN$	ГЦК	$60.7 \pm 0.5$	-	$9.2 \pm 0.2$	2.289	$a = 4.577$	
$\alpha$ - $TiN_{0.2}$	ГПУ	$71 \pm 0.5$	-	$11.6 \pm 0.2$	2.09	$a = 2.97$ $c = 4.78$	
$TiN$	ГЦК	$68 \pm 0.5$	-	$10.6 \pm 0.2$	2.122	$a = 4.244$	

Азот упорядочен по октаэдрическим междуузлиям ГПУ решетки металла. Содержание посторонних примесей кислорода и углерода в полученном образце составляло менее 0.3 ат.%, водорода — менее 0.03 ат.%

Измерения спектров НРН проводились на спектрометре ДИН-2ПИ, установленном на реакторе ИБР-2 [11]. Эксперимент проводился при комнатной температуре. Регистрировались процессы с уничтожением фонов. Энергия падающих на образец нейтронов составляла 10 мэВ.

Рассеянные нейтроны регистрировались детекторами, расположенным в диапазоне углов 70–135°. Разрешение спектрометра в области передач энергии  $\varepsilon = E - E_0$  составляло  $\Delta E_R = 3.5, 5$  и 7.7 мэВ соответственно ( $\varepsilon = E - E_0$ , где  $E_0$  и  $E$  — энергии нейтронов до и после рассеяния на образце). Пропускание образцов  $\geq 90\%$ , что позволило пренебречь влиянием процессов многократного рассеяния на результаты измерений.

Полученные экспериментальные спектры НРН обрабатывались до уровня обобщенного спектра частот (ОСЧ)  $\theta(\varepsilon)$  аналогично процедуре, описанной в [12]. Извлеченные в результате обработки спектры частот азота в области примесных колебаний  $\alpha$ - и  $\beta$ -фаз описывались гауссовскими кривыми методом наименьших квадратов. Результаты обработки приведены в таблице.

## 2. Экспериментальные результаты

Спектр НРН исследуемого образца, усредненный в области углов рассеяния нейтронов 70–135°, показан на рис. 1. При данных условиях эксперимента для  $\varepsilon \geq 10$  мэВ хорошо выполняется некогерентное приближение [13]. Небольшие особенности в интервале передач энергии  $\varepsilon < 10$  мэВ связаны с эффектами неупругого когерентного рассеяния нейтронов.

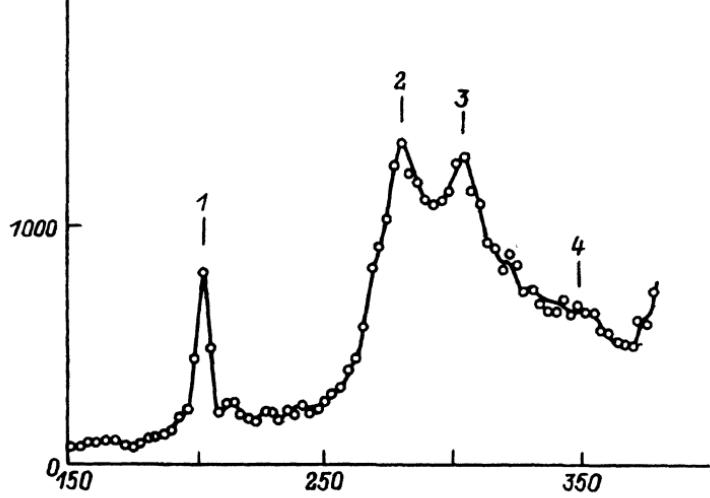


Рис. 1. Спектр неупругого рассеяния медленных нейтронов сплава  $Ta\text{N}_{0.45}$ , усредненный в диапазоне углов 70–135°.

Значения переданной нейtronам энергии  $\varepsilon = E - E_0$  для указанных стрелками особенностей (мэВ): 1 — 74, 2 — 18, 3 — 12, 4 — 5.  $E_0$  и  $E$  — энергии нейтронов до и после рассеяния. Ось абсцисс — номер канала, ось ординат — счет в канале.

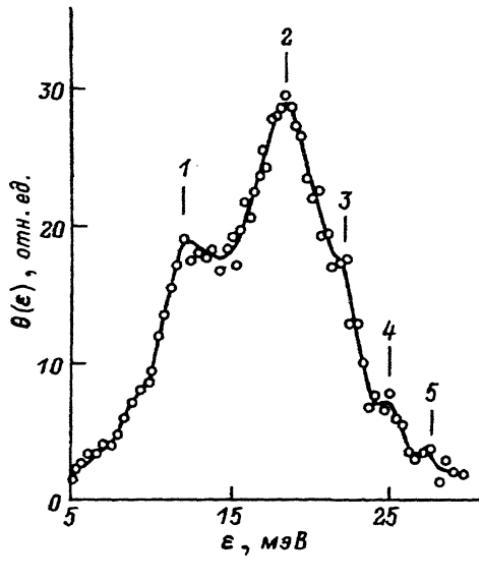


Рис. 2. Обобщенный спектр частот сплава  $Ta\text{N}_{0.45}$  в области колебаний атомов матрицы.

$\epsilon = h\nu, \omega$  — частота колебаний атомов сплава.  
1 — 12, 2 — 18, 3 — 22, 4 — 25, 5 — 27 мэВ.

Область передач энергии  $0 < \epsilon \leq 30$  мэВ отвечает спектру колебаний атомов металла в сплаве. Доля колебаний легких атомов внедрения в этой области невелика, и их вкладом можно пренебречь.

На рис. 2 показан ОСЧ исследуемого образца  $Ta\text{N}_{0.45}$  в области колебаний атомов матрицы. Спектр имеет вид, подобный спектру частот тантала в  $\alpha$ -фазе  $Ta\text{-N}$  с характерными максимумами в области энергий 12 и 18 мэВ [6]. Однако интенсивности основных пиков перераспределены в пользу высокочастотной особенности и в целом спектр жестче. Подобный вид спектров колебаний Та в  $\alpha\text{-TaN}_x$  и изучаемом сплаве объясняется, с одной стороны, тем, что в образце значительное количество  $\alpha$ -фазы. С другой стороны, это свидетельствует об относительно небольшом изменении силового взаимодействия Та—Та при переходе от  $\alpha$ - к  $\beta$ -фазе, поскольку значимое изменение взаимодействия Та—Та в  $\beta$ -фазе должно было бы существенным образом деформировать спектр НРН исследуемого двухфазного образца по отношению к  $\alpha$ -фазе. Действительно, в изученных ранее фазах внедрения V—O [3] уже 10%-ное содержание кислорода кардинальным образом изменяло основные характеристики спектра колебаний атомов матрицы (форма спектра, положение основных особенностей, среднеквадратичная частота спектра, положение дебаевской границы).

Основное отличие в спектрах Та  $\alpha\text{-TaN}_x$  [6] и исследуемого сплава  $Ta\text{N}_{0.45}$  связано с формой высокочастотного крыла. В последнем случае на крыле ОСЧ наблюдаются небольшие особенности при энергиях  $\epsilon = 22, 25$  и  $27$  мэВ. Возможные причины возникновения этих особенностей будут обсуждаться в следующем разделе.

В спектрах частот ТРВ на основе переходных металлов легкие атомы  $p$ -элементов O, N и C образуют полосы примесных колебаний выше границы спектра частот атомов матрицы, структура которых отвечает локальной симметрии междуузельной позиции, занимаемой атомами внедрения [1–9]. В исследуемом образце в области  $\epsilon > 30$  мэВ в спектре НРН наблюдается пик  $\epsilon = 74$  мэВ (рис. 1). Можно утверждать, что дан-

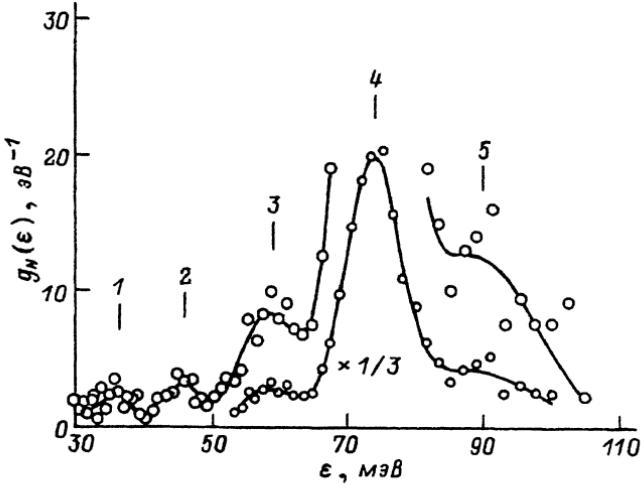


Рис. 3. Спектр колебаний атомов азота ( $\alpha + \beta$ -фазы) в сплаве  $Ta\text{N}_0.45$ .

Энергия колебаний  $\epsilon = \hbar\omega$  указана в мэВ. 1 — 36, 2 — 45, 3 — 59, 4 — 74, 5 — 89.

ная полоса отвечает спектру колебаний атомов азота в  $\beta$ -фазе  $Ta_2\text{N}$ , поскольку как указывалось выше, подавляющее количество азота в образце находится в  $\beta$ -фазе. Сделанный вывод подтверждается также тем, что структура полосы соответствует трехкратному вырождению колебательных уровней. Это согласуется с кубической симметрией октаэдрических междоузлий, занимаемой атомами азота в ГПУ решетке  $\beta\text{-Ta}_2\text{N}$ .

На рис. 3 показан спектр колебаний атомов в излучаемом сплаве в области энергий выше граничной частоты спектра колебаний атомов металла. Кроме основного пика  $\epsilon = 74 \pm 0.9$  мэВ, на его крыльях наблюдаются небольшие особенности  $\epsilon_2 = 59 \pm 2$  и  $\epsilon_3 = 89 \pm 5$  мэВ. Они отвечают спектру колебаний атомов азота в  $\alpha$ -фазе Ta-N, присутствующей в исследуемом образце. Расщепление на два уровня определяется тетрагональной точечной симметрией октаэдрических междоузлий, занимаемой N в ОЦК решетке  $\alpha\text{-Ta}$ . Положение низкочастотной моды  $\epsilon_2$  практически совпадает с данными [6] по динамике азота в  $\alpha\text{-TaN}_{0.03}$ . В то же время энергия высокочастотной моды  $\hbar\omega_3 = \epsilon_3$  заметно меньше, чем в [6]. Это связано, по-видимому, с большой чувствительностью высокочастотного уровня примесных колебаний в ОЦК фазах внедрения к режиму приготовления образца. Кластеризация атомов внедрения может приводить к сильному уширению пиков и смещению их в область более низких частот. Так, например, различие в способе приготовления и термообработки образца  $\alpha\text{-V-N}$  приводит к разнице в положении высокочастотной полосы колебаний азота в ванадии в 7 мэВ ( $\epsilon_3 = 90$  мэВ [14] и  $\epsilon_3 = 97$  мэВ [4]).

Ширины пиков на половине высоты после учета разрешения приведены в таблице. Они имеют значения, характерные для ТРВ с  $p$ -элементами внедрения.

### 3. Константы силового взаимодействия металл–примесь

Из спектра колебаний атомов примеси в сплаве можно извлечь информацию о межатомном силовом взаимодействии металл–внедренный атом и, таким образом, о потенциале их взаимодействия. Как правило, для этого используется приближение гармонического осциллятора в

«замороженной» решетке. Это подход оправдан, по-видимому, в случае систем внедрения Me–Н, поскольку перенормировка эйнштейновской частоты локального колебания примеси внедрения из-за колебаний атомов матрицы имеет порядок величины  $m/M$ , где  $m$  и  $M$  — массы внедренного атома и металлической матрицы соответственно [15]. В случае ТРВ с р-элементами внедрения такая поправка не является пренебрежимо малой и составляет  $\simeq 10 \div 15\%$ .

Перенормировку несложно получить, зная функцию Грина кристалла с дефектом в области примесного атома [15, 16]. Используя разложение функции Грина при больших частотах [16], можно установить простую связь между константой силового взаимодействия металл–примесь и экспериментально наблюдаемой частотой колебаний внедренных атомов. В случае атома в октаэдрическом междоузлии с продольной связью  $\gamma$  с ближайшими соседями в решетке, ограничиваясь первыми двумя членами разложения функции Грина, имеем [17]

$$\gamma = \frac{m\omega_l^2}{2} \left[ 1 + \frac{m}{2M} \left( 1 + \frac{\langle \omega^2 \rangle}{\omega_l^2} \right) \right]^{-1}. \quad (1)$$

Здесь  $\omega_l$  — частота локальных колебаний внедренного атома, а  $\langle \omega^2 \rangle$  — средний квадрат частоты колебаний атомов матрицы. Расчеты констант связи Me–Х по (1) для сплавов переходных металлов IV и V групп с азотом приведены в таблице.

Поправка, вносимая вторым членом в круглых скобках в значение  $\gamma$ , составляет  $\leqslant 2\%$ , поэтому для оценки  $\gamma$  можно ограничиться только первым членом в разложении функции Грина. Тогда связь  $\gamma$  с  $\omega_l$  становится предельно простой

$$\omega_l^2 = \frac{2\gamma}{m} \left( 1 + \frac{m}{2M} \right). \quad (2)$$

#### 4. Обсуждение результатов

1) Зависимость энергии колебаний азота от размеров междоузлия. Из данных таблицы видна корреляция между частотами колебаний атомов азота и расстоянием Me–Х, определенным из параметров решетки без учета искажений, вносимых атомами внедренными в решетку сплава.

Введение азота в ОЦК решетку Та приводит к сильным локальным смещениям ближайших к внедренным атомам атомов металла, поскольку ковалентный радиус азота  $R_N = 0.71 \text{ \AA}$  [18] много больше, чем расстояние от центра октаэдрического междоузлия до ближайшего узла решетки атомов металла ( $R_{M-X}$ ). Сложность учета локальных искажений затрудняет построение зависимости частоты колебаний внедренных атомов от реального расстояния металл–примесь. Интересно отметить, однако, что зависимость  $h\omega$  от  $R_{M-X}$ , т.е. расстояния металл–примесь без учета локальных искажений, для фаз внедрения Та–N в первом приближении описывается линейной функцией. Аналогичный результат был получен и для V–N фаз внедрения [5]. Более того, вся совокупность данных по частотам колебаний атомов азота в фазах внедрения (Ti, Zr, V, Ta)–N, а

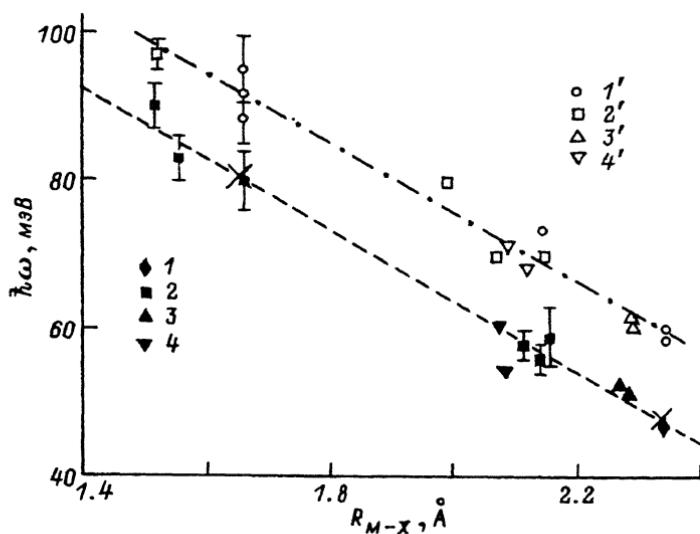


Рис. 4. Зависимость энергии колебаний атомов азота и кислорода в фазах внедрения от расстояния металл-примесь без учета локальных искажений.

Ошибки определяются размерами точек или указаны вертикальными штрихами. Штриховая и штрихпунктирная линии соответствуют линейной аппроксимации экспериментальных точек кислорода и азота. Значения энергий колебаний взяты из настоящей работы и работ [2-5, 9, 10, 14, 19]. Косыми крестами на «кислородной» линии показаны ожидаемые значения для энергии локальных колебаний атомов кислорода в  $\alpha$ -фазе сплава  $TaO_x$ . 1 — Nb-O, 2 — V-O, 3 — Zr-O, 4 — Ti-O, 1' — Ta-N, 2' — V-N, 3' — Zr-N, 4' — Ti-N.

также оптическим частотам соответствующих мононитридов (см. таблицу) удовлетворительно описывается той же зависимостью (рис. 4). Подобная связь была установлена в [10] и для сплавов переходных металлов IV и V групп с кислородом (см. также рис. 4).

В работах [2, 10] было показано, что данные по частотам колебаний атомов O и N в сплавах переходных металлов с кислородом и азотом, имеющих ГПУ структуру, могут быть описаны с помощью эффективного парного потенциала, отталкивательная часть которого определяется степенью размерного несоответствия атома внедрения и междуузельной позиции, в которую он помещается. Этот вывод применим, по-видимому, и к сплавам внедрения с O и N на основе переходных металлов V группы ванадия, ниobia и tantalа.

В этом случае константа силового взаимодействия Me-X должна зависеть от радиуса октаэдрической позиции, в которую помещается внедренный атом (т.е. расстояния  $R_{M-X}$ ) и радиуса примеси X  $R_X$ . Исходя из приведенных в [2-5, 9, 10, 14, 19] данных по частотам колебаний атомов внедрения и рассчитанных из них констант межатомного взаимодействия [10, 19], мы построим зависимость (рис. 5) частоты  $\Omega$  колебаний примеси, приведенной к единичной массе, от величины  $\Delta R = R_{M-X} - R_X$ , где  $R_{M-X}$  — расстояние металл-примесь без учета локальных искажений, определенное из параметров решетки; в качестве  $R_X$  взяты ковалентные радиусы кислорода и азота ( $R_O = 0.66$  и  $R_N = 0.71 \text{ \AA}$  [18]).

Величина  $\Omega$  связана с константой центрального взаимодействия металл-примесь  $\gamma$  соотношением  $\Omega = 0.511\gamma^{1/2}$ , где  $\Omega$  определено в мэВ, а  $\gamma$  — в дин/см. В таком представлении экспериментальные точки (рис. 5)

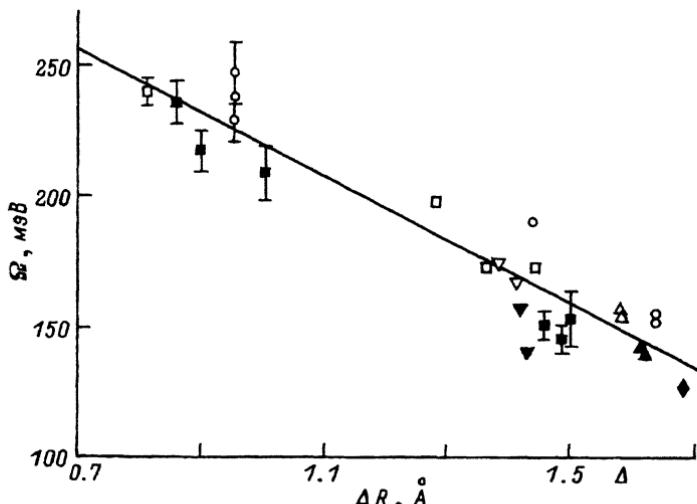


Рис. 5. Зависимость приведенной к единичной массе частоты  $\Omega$  локальных колебаний  $p$ -элементов внедрения в переходных металлах IV и V групп от параметра  $\Delta R$ .

Прямая линия — описание всей совокупности точек линейной функцией методом наименьших квадратов. Обозначения те же, что и на рис. 4.

могут быть удовлетворительно описаны общей линейной зависимостью. Другими словами, вся совокупность данных по константам силового взаимодействия Me-X в сплавах внедрения переходных металлов IV и V групп с кислородом и азотом может быть описана в рамках единого представления о степени размерного несоответствия  $p$ -элемента внедрения и междоузельной позиции, в которую он помещается [10].

2) Структура примесной полосы и квазимолекулярные колебания в фазах внедрения Ta-N. Кроме описанных выше примесных колебаний азота, в ОСЧ исследуемого сплава наблюдаются особенности выше границы спектра частот атомов матрицы с энергией  $\varepsilon = 36 \pm 2.4$  и  $45 \pm 3.2$  мэВ (рис. 3), природа которых, вообще говоря, не ясна.

В спектре частот колебаний азота в  $\alpha$ -ТРВ  $Ta\bar{N}_{0.03}$ , приведенном в [6], также можно наблюдать небольшую особенность в области  $\varepsilon \approx 36$  мэВ. Поэтому позволительно предположить, что в  $g_N(\varepsilon)$  (рис. 3) пик  $\varepsilon = 36$  мэВ относится к спектру колебаний атомов  $\alpha$ -фазы, присутствующей в образце, а пик  $\varepsilon = 45$  мэВ связан с ОСЧ  $\beta$ -фазы. Одной из возможных причин возникновения таких особенностей в спектре может быть проявление локализованных колебаний атомов матрицы, которые можно назвать квазимолекулярными колебаниями (КМК).

Действительно, при введении в кристалл точечного дефекта с  $m < M$  и константой связи с основной решеткой  $\gamma > \alpha$  ( $\alpha$  — константа связи между ближайшими соседями в решетке атомов матрицы) локальные моды образуются за счет не только колебаний собственно междоузельного атома, но и всего ближайшего к дефекту окружения [20].

Положение КМК в спектре сплава определяется соотношением масс и констант связей атомов примеси и матрицы. Поэтому, вообще говоря,

эти пики могут проявляться не только в щели спектра, но и в сплошном спектре колебаний атомов матрицы. Для оценки энергии  $\hbar\omega_{\text{km}}$  таких мод можно получить в приближении среднего поля следующее соотношение [17]:

$$\omega_{\text{km}}^2 = 1.5\langle\omega^2\rangle + \frac{m}{2M+m}\omega_{\text{L}}^2 = 1.5\langle\omega^2\rangle + \frac{\gamma}{M} \quad (3)$$

(последнее равенство следует из (2)).

В случае колебаний N в ГПУ решетке Ta с  $\hbar\omega_{\text{L}} = 74$  мэВ оценка дает  $\hbar\omega_{\text{km}} \approx 24$  мэВ, а для N в  $\alpha$ -фазе Ta можно ожидать проявления КМК при  $\hbar\omega_{\text{km}} \approx 22$  и 26 мэВ.

С одной стороны, приведенные оценки существенно расходятся со значениями энергий обсуждаемых особенностей  $\varepsilon = 36$  и 45 мэВ. С другой стороны, особенности, близкие по расположению к оценкам энергии КМК, действительно наблюдаются на высокочастотном крыле спектра частот Ta (рис. 2). По-видимому, именно они отвечают КМК атомов Ta в  $\alpha$ - и  $\beta$ -фазах системы Ta-N.

Таким образом, вопрос о природе мод с энергией  $\varepsilon = 36$  и 45 мэВ остается открытым. На наш взгляд, проявление этих особенностей связано с колебаниями собственно междуузельного атома (азота или другого  $p$ -элемента) или его комплексов (например, пар N-N, образовавшихся в результате деформационного взаимодействия), но не с локальными модами атомов металла.

Происхождение наблюдаемых пиков, кроме «КМК» природы, может быть связано с наличием примесей. Наиболее реальной примесью, при водящей к появлению особенности в области передач энергии 45–50 мэВ, является кислород. Частоты локальных колебаний атомов кислорода в  $\alpha$ -твердом растворе  $\text{TaO}_x$ , оцененные по зависимости  $\hbar\omega_0(R_{\text{M}-\text{x}})$ , построенной для переходных металлов IV и V групп [10], составляют  $\hbar\omega_1 \approx 48$  и  $\hbar\omega_2 \approx 81$  мэВ (на рис. 4 эти значения отмечены косыми крестами). Вместе с тем такое объяснение образования особенности  $\varepsilon = 45$  мэВ вызывает сомнения, поскольку концентрация кислорода в образце недостаточна для появления столь заметного пика.

Причинами проявления рассматриваемых пиков могут быть также захват азота на ловушках, взаимодействие N со следующими за ближайшими соседями, понижение точечной симметрии междуузельной позиции из-за сильных локальных искажений, занятие частью азота позиций отличных, от октаэдрических междуузлий, а также отражение упорядочения азота по подрешетке октаэдрических междуузлий. Ответ на этот вопрос могут дать, по-видимому, только последовательные модельные расчеты динамики различных фаз с потенциалом, описывающим основные особенности спектра колебаний атомов примеси в металле.

В результате измерений спектров НРН сплава  $\text{TaN}_{0.45}$  впервые была определена частота колебаний атомов азота в ГПУ решетке  $\beta$ -фазы внедрения. Определены константы силового взаимодействия Me-N для сплавов переходных металлов IV и V групп с азотом с учетом колебаний атомов матрицы. Показана корреляция между энергией колебаний азота и расстоянием Me-X без учета локальных искажений. Относительно небольшая собственная ширина пика, отвечающего колебаниям N в  $\text{Ta}_2\text{N}$ , свидетельствует об отсутствии или слабом взаимодействии N-N в данном сплаве.

На крыле спектра колебаний атомов Та наблюдены небольшие особенности, связанные, по-видимому, с локализованными колебаниями атомов матрицы в  $\alpha$ - и  $\beta$ -фазах, окружающих атомы азота ( $\varepsilon \approx 22.25$  и  $27$  мэВ). Эти значения хорошо описываются в приближении среднего поля.

Наблюденные в спектре особенности  $\varepsilon = 36$  и  $45$  мэВ связаны, по-видимому, с колебаниями  $p$ -элементов внедрения.

В заключение авторы выражают благодарность В.В.Сумину за помощь в подготовлении образцов и участие на отдельных этапах работы.

### Список литературы

- [1] Морозов С.И., Сумин В.В. // ФТТ. 1991. Т. 33. № 10. С. 3107–3108.
- [2] Морозов С.И., Сумин В.В., Белушкин А.В., Натканец И. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 6. С. 1653–1659.
- [3] Данилкин С.А., Закуркин В.В., Морозов С.И., Сумин В.В. // ФТТ. 1980. Т. 22. № 11. С. 3327–3331.
- [4] Данилкин С.А., Минаев В.П., Сумин В.В., Чокло А.И. // ФТТ. 1991. Т. 33. № 1. С. 3–8.
- [5] Морозов С.И., Сумин В.В. // Препринт ФЭИ-1922. Обнинск, 1988.
- [6] Данилкин С.А., Землянов М.Г., Минаев В.П., Паршин П.П., Сумин В.В. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 5. С. 8–12.
- [7] Сумин В.В., Морозов С.И., Натканец И., Петру Д. // Физика металлов и металловедение. 1988. Т. 65. № 1. С. 168–172.
- [8] Сумин В.В., Блинов В.М., Натканец И., Петру Д. Пойменов И.Л. // Изв. АН СССР. Металлы. 1988. № 2. С. 160–164.
- [9] Сумин В.В., Морозов С.И. // Физика металлов и металловедение. 1987. Т. 63. № 6. С. 1159–1164.
- [10] Морозов С.И. // Препринт ФЭИ-1931. Обнинск, 1988.
- [11] Парfenov B.A., Klemishhev P.S., Morozov I.G., Pavlov A.F. Двойной спектрометр медленных нейтронов // Neutr. Inelast. Scatt. 1977. IAEA, Vienna. 1978. V. 1. P. 81–123.
- [12] Кречун К.Н., Морозов С.И., Натканец И., Сумин В.В. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 9. С. 2585–2593.
- [13] Гуревич И.И., Тарасов Л.В. Физика нейтронов низких энергий. М.: Наука, 1965. 607 с.
- [14] Данилкин С.А., Землянов М.Г., Минаев В.П., Паршин П.П., Сумин В.В. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 7. С. 2112–2117.
- [15] Blaesser G., Peretti J., Toth G. // Phys. Rev. 1968. V. 171. N 3. P. 665–673.
- [16] Лейбфрид Г., Бройер Н. Точечные дефекты в металлах: Пер. с англ. М.: Мир, 1981. 440 с.
- [17] Морозов С.И. // Препринт ФЭИ-2190. Обнинск, 1991.
- [18] Гольдшмидт Х.Дж. Сплавы внедрения. М.: Мир, 1971. Т. 1. 425 с.
- [19] Морозов С.И., Казарников В.В., Сумин В.В. // Препринт ФЭИ-2273. Обнинск, 1992.
- [20] Lengeler B., Ludwig W. // Zeitshrift für Physik. 1963. V. 171. N 1. P. 273–290.

Физико-энергетический институт  
Обнинск

Поступило в Редакцию  
5 ноября 1992 г.  
В окончательной редакции  
20 июля 1993 г.