

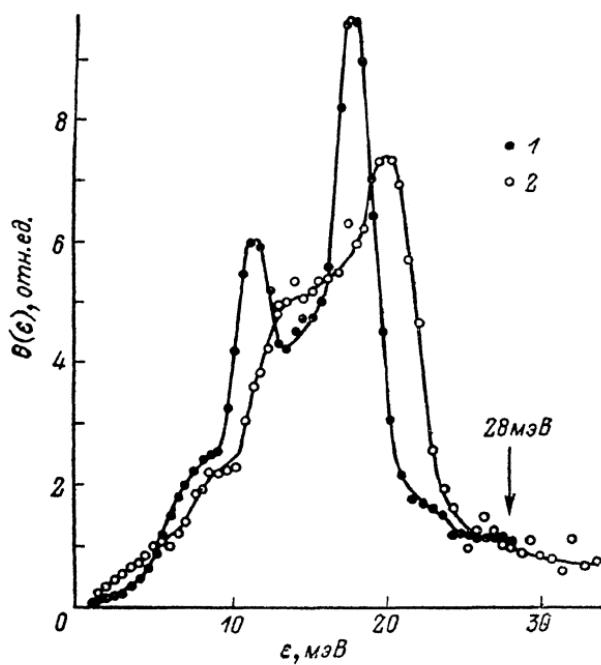
# К ВОПРОСУ О СИЛОВОМ ВЗАЙМОДЕЙСТВИИ АТОМОВ Re В СПЛАВЕ Ta<sub>0.91</sub>Re<sub>0.09</sub>

М. Г. Землянов, Ю. Л. Шитиков

1. Один из основных вопросов физики разбавленных сплавов — это вопрос о силовом взаимодействии примесного атома и его влиянии на физические свойства сплавов.

Подробно динамические свойства примесных систем рассматривались в работах [1-3].

Как было показано экспериментально [3, 4], предположение об изотопическом замещении, строго говоря, не выполняется ни для одной из исследованных к настоящему времени систем.



Функция обобщенных частотных распределений колебательных состояний решетки Ta (1) и Ta<sub>0.91</sub>Re<sub>0.09</sub> (2).

В работе [5] для учета отклонения от модели изотопического замещения был введен параметр  $\tau = 1 - \gamma_1/\gamma_0$ , где  $\gamma_1, \gamma_0$  — силовые константы, описывающие соответственно взаимодействие между примесным атомом и атомом матрицы и взаимодействие между атомами матрицы. При этом  $\tau$  может как усиливать, так и ослаблять влияние параметра  $\delta = 1 - M_1/M_0$  ( $M_1, M_0$  — массы примесного атома и атома исходной решетки), характеризующего относительное изменение массы.

Для всех металлических систем, как правило, введение тяжелых примесных атомов приводит к образованию колебательных мод, локализованных в области низких частот исходного спектрального распределения.

Однако для разбавленного сплава Ta<sub>0.975</sub>Re<sub>0.025</sub> на основании анализа данных по низкотемпературной теплоемкости [6] был сделан вывод [7] о том, что введение атомов Re в матрицу Ta ( $M_{\text{Re}} > M_{\text{Ta}}$ ) приводит к образованию примесной моды, расположенной за верхней границей спектра исходной решетки ( $\gamma_1/\gamma_0 = 3.48$ ). Это был единственный случай такого аномального динамического поведения тяжелых примесных атомов.

В связи с этим представляло несомненный интерес получить дополнительные данные о спектральном распределении тепловых колебаний

Ta—Re, используя метод неупругого рассеяния нейтронов, который является наиболее прямым для получения такой информации.

2. Используемые образцы — это пластины из сплава Ta<sub>0.91</sub>Re<sub>0.09</sub> толщиной ~3 мм. По данным рентгеноструктурных и нейтроноструктурных измерений, сплав после неоднократной переплавки в атмосфере аргона представлял собой однофазный  $\alpha$  раствор на основе Та. Введение атомов Re приводит к уменьшению объема элементарной ячейки Та ( $a_{\text{Ta}} = 3.303 \text{ \AA}$ ,  $a_{\text{спл}} = 3.282 \text{ \AA}$ ).

Измерения неупругого рассеяния нейтронов проводились на спектрометре по времени пролета с криогенным источником холодных нейтронов на реакторе ИР-8 ИАЭ им. И. В. Курчатова [8]. Энергия падающих нейтронов ~4.4 мэВ. Регистрация нейтронов, рассеянных образцом, осуществлялась одновременно под пятью углами рассеяния: 30, 45, 60, 75, 90°. После введения методических поправок полученные данные обрабатывались в некогерентном приближении. Функции обобщенных частотных распределений колебательных состояний  $\Theta(E)$  для исходного Та и сплава Ta<sub>0.91</sub>Re<sub>0.09</sub> приведены на рисунке

$$\Theta(E) = g(E) \sum_i c_i \frac{\sigma_i}{M_i} e^{-2W_i} |\varphi_i(E)|^2,$$

где  $c_i$ ,  $\sigma_i$ ,  $M_i$ ,  $W_i$ ,  $|\varphi_i(E)|^2$  — соответственно концентрация, сечение рассеяния нейтронов, масса, фактор Дебая—Валлера, квадрат модуля вектора поляризации колебаний с энергией  $E$  атомов сорта  $i$ .

Введение атомов Re приводит к размытию основных особенностей спектрального распределения Та и к смещению всего спектра как целого в сторону больших энергий.

Относительное смещение частоты  $\Delta\omega/\omega$ , обусловленное изменением объема  $\Delta V/V$ , можно оценить из соотношения  $\Delta\omega/\omega = -\Gamma(\Delta V/V)$ , где  $\Gamma$  — константа Грюнайзена. Принимая для Та  $\Gamma \approx 2$  и предполагая ее независимость от примеси Re, получаем, что смещение частот около 2 %. Для граничной частоты значение на полувысоте спада спектрального распределения — это смещение ~0.7 мэВ, что значительно меньше по сравнению с измеренным экспериментально значением (~2.5 мэВ).

В работе [9] теоретически было установлено, что среднеквадратичная частота  $\langle\omega^2\rangle$  фононного спектра чистого металла может быть выражена через плазменную частоту  $\Omega_0^2$  и вклад, обусловленный электрон-фононным взаимодействием

$$\langle\omega^2\rangle \approx \langle\Omega_0^2\rangle - 4/5 \varepsilon_F N^2 (\varepsilon_F) M^{-1} \langle I^2 \rangle,$$

где  $\Omega_0$  — плазменная ионная частота;  $N(\varepsilon_F)$  — плотность состояний на уровне Ферми;  $\langle I^2 \rangle$  — матричный элемент электрон-фононного взаимодействия, усредненный по поверхности Ферми. Распространяя это соотношение на сплавы [4, 10, 11], удалось качественно объяснить смещение фононных частот при введении примеси изменением межионного взаимодействия за счет плотности электронных состояний на уровне Ферми. Было показано, что увеличение  $N(\varepsilon_F)$  в сплавах приводит к смягчению исходного спектра, и наоборот. Введение 9 % ат. Re в Та сопровождается понижением  $N(\varepsilon_F)$  на 25 % [6], что в свою очередь приводит к ослаблению экранирования межионного взаимодействия и как следствие к ужесточению всего спектра. Таким образом, в случае Та—Re имеет место такая же корреляция между изменениями фононной и электронной подсистем, как и для сплавов других переходных металлов [4].

Для оценки положения примесной моды, установленной в [7], воспользуемся подходом, изложенным в [12]. Колебательный спектр в [12] представляется в виде двух эйнштейновских мод, одна из которых описывает колебания атомов исходной решетки, а другая — колебания примесных атомов. В этом случае

$$(\omega_1)^2 / (\omega_0)^2 = (M_0/M_1) (f_1/f_0),$$

где  $\omega_1$ ,  $\omega_0$ ,  $f_1$ ,  $f_0$  — характеристические частоты и эффективные константы, приближенно равные эйнштейновским силовым постоянным примесного атома и атома матрицы. Полагая  $f_1/f_0 \approx \gamma_1/\gamma_0 = 3.48$  [7], а  $\omega_0 = \langle \omega \rangle$  (см. рисунок), получаем, что примесная мода должна быть расположена при энергии  $\sim 28$  мэВ. Как следует из этого рисунка, в интервале энергий выше граничного значения для спектра сплава ( $E > 22$  мэВ) никакой примесной моды не наблюдается.

Изменение решеточной теплоемкости сплава по сравнению с исходным металлом может быть обусловлено двумя факторами: образованием примесной моды и деформацией всего спектрального распределения колебательных состояний атомов исходной решетки. Неучет изменений в спектре колебаний атомов матрицы и привел авторов работы [7] к ошибочному выводу о значительном усилении силового взаимодействия атомов Re в сплавах Ta—Re. Фактически же в сплаве устанавливается некоторое эффективное взаимодействие, одинаковое для всех атомов и несколько большее по сравнению с решеткой исходного металла.

В заключение выражаем благодарность Н. А. Тулиной и Е. В. Мельникову за предоставление и подготовку образца сплава, П. П. Паршину — за участие в обсуждении, В. Г. Федорову и В. Я. Васюте — за помощь в проведении измерений.

#### Л и т е р а т у р а

- [1] Каган Ю. М. // Физика кристаллов с дефектами. Тбилиси. 1968. Т. 2. С. 93—180.
- [2] Taylor D. // Dynamical properties of solids / Ed. G. K. Horton and A. A. Maradudin. Amsterdam, 1975. V. 2. P. 286—384.
- [3] Dederichs P., Zeller P. Dynamical properties of point defect in metals. Berlin, Heidelberg, 1981. P. 1—170.
- [4] Землянов М. Г. // Автореф. докт. дис. М., 1986. 40 с.
- [5] Жернов А. П., Аугст Г. Р. // ФТТ. 1967. Т. 9, № 8. С. 2196—2205.
- [6] Mamiya T., Namura K., Masuday J. J. // Phys. Soc. Jap. 1970. V. 28. N 2. P. 380—389.
- [7] Жернов А. П., Малов Ю. А., Панова Г. Х. // ЖЭТФ. 1975. Т. 69. № 1. С. 256—264.
- [8] Землянов М. Г., Головин А. Е., Миронов С. П. и др. // ПТЭ. 1973. № 5. С. 34—38.
- [9] Gommersal J. R., Gyorffy B. L. // Phys. Rev. Lett. 1974. V. 33. N 20. P. 1286—1290.
- [10] Сырых Г. Ф., Землянов М. Г., Черноплеков Н. А., Колтыгин В. М. // ЖЭТФ. 1977. Т. 73. № 1. С. 313—317.
- [11] Сырых Г. Ф., Землянов М. Г., Черноплеков Н. А., Савельев Б. И. // ЖЭТФ. 1981. Т. 81. № 1. С. 308—313.
- [12] Жернов А. П. // Автореф. докт. дис. М., 1982. 346 с.

Поступило в Редакцию  
4 марта 1988 г.  
В окончательной редакции  
9 ноября 1988 г.

УДК 539.219.3

Физика твердого тела, том 31, в. 3, 1989  
Solid State Physics, vol. 31, N 3, 1989

## МЕХАНИЗМЫ УСКОРЕНИЯ ДИФФУЗИИ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ СВЧ ТОКА НА ДИСЛОКАЦИОННУЮ СТРУКТУРУ МЕТАЛЛА

A. P. Бедюх, Ф. А. Котенев, Т. В. Парубоча

Экспериментально установлено [1], что при диффузионном отжиге тонких слоев металлов наведенными в них СВЧ токами наблюдается значительное ускорение диффузии. Одним из ускоряющих механизмов может быть непосредственное воздействие СВЧ тока на дислокационную струк-