

чений входящих в него величин, проводя минимизацию зависимости g от давления, получено, что наибольший вклад в уменьшение g относительно теоретических значений, полученных в модели статического кристаллического поля, вносят фононы с частотами $\approx 110 \text{ см}^{-1}$, что хорошо согласуется с аналогичными расчетами, полученными в [2].

Таким образом, в данной работе наблюдалась уникальная ситуация, связанная с пересечением энергетических уровней под давлением, что должно вызывать существенное изменение магнитных свойств этого соединения.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Krigin I. M., Lukin S. N., Neilo G. N., Prokhorov A. D. // Phys. St. Sol. (b). 1981. V. 104. N 1. P. K21—K25.
- [2] Крыгин И. М., Нейло Г. Н., Прохоров А. Д. // ЖЭТФ. 1983. Т. 84. № 6. С. 2242—2250.
- [3] Neilo G. N., Prokhorov A. D., Tsintsadze G. A. // Phys. St. Sol. (b). 1977. V. 83. N 1. P. K59—K61.
- [4] Крыгин И. М., Лукин С. Н., Прохоров А. Д. // ФНТ. 1984. Т. 10. № 5. С. 499—502.
- [5] Крыгин И. М., Прохоров А. Д. // ЖЭТФ. 1984. Т. 86. № 2. С. 590—596.
- [6] Bagguley D. M. S., Vella—Coleiro G. // J. Phys. C: Sol. St. Phys. 1969. Ser. 2. V. 2. P. 2310—2319.

Донецкий физико-технический
институт АН УССР
Донецк

Поступило в Редакцию
4 апреля 1989 г.

УДК 548.571

Физика твердого тела, том 31, в. 10, 1989
Solid State Physics, vol. 31, № 10, 1989

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ АТОМНЫХ ДЕФЕКТОВ ПО МЕХАНИЗМУ ВАРЛИ В ИОННЫХ КРИСТАЛЛАХ

В. В. Алексеенко, Б. И. Якобсон

При взаимодействии ионизирующих излучений небольших энергий с твердыми телами основная доля их энергии идет не на процессы упругого смещения атомов, а на возбуждение электронной подсистемы кристалла [1]. Распад локализованных электронных возбуждений может приводить к образованию атомных дефектов. Одним из механизмов превращения энергии электронного возбуждения в образование атомных дефектов является механизм Варли [2]. До настоящего времени была выполнена единственная работа по численному моделированию этого в кристалле KCl [3], где полагалось, что размер катионов и анионов одинаков. Но в ряде кристаллов со структурой типа NaCl размер катионов почти в два раза меньше размера аниона [4]. Как показали наши исследования, этот факт имеет большое значение для атомного дефектообразования.

Расчеты проводились для системы $9 \times 9 \times 9$ ионов, размещенных в узлах решетки с элементарной ячейкой типа NaCl. Граничные атомы жестко закреплялись. Потенциал межатомного взаимодействия выбирался в виде

$$U(R_{ij}) = \frac{e_i e_j}{R_{ij}} + C \frac{(\sigma_i + \sigma_j)^{12}}{R_{ij}^{12}}, \quad (1)$$

где e_i — заряд i -го иона, σ_i — его размер, R_{ij} — расстояние между ионами i и j . Выражение (1) удобно переписать в виде

$$U(r_{ij}) = \frac{\alpha_i \alpha_j}{r_{ij}} + P \left(\frac{\sigma_i + \sigma_j}{\sigma_+ + \sigma_-} \right)^{12} \frac{1}{r_{ij}^{12}}, \quad (2)$$

где $r_{ij} = R_{ij}/A$; $U(r_{ij}) = U(R_{ij})/\varepsilon$; $\varepsilon = e^2/A$; e — заряд иона; A — постоянная решетки; σ_+ , σ_- — радиусы катиона и аниона соответственно; $\alpha_i = e_i/e$. Безразмерный параметр P

$$P = \frac{CA}{e^2} (1 + \sigma_+/\sigma_-)^{12} \left(\frac{\sigma_-}{A}\right)^{12}$$

определяет соотношение между кулоновской и отталкивательной частями потенциала (при заданном отношении σ_+/σ_-). У нас $P \approx 0.02$, при таком значении вклад кулоновской энергии $E_k = -330\varepsilon$, а отталкивательной $E_{or} = 35\varepsilon$, что можно считать типичным для ШГК, где $|E_{or}|$ составляет около 10 % от $|E_k|$ [5]. Выбор отношения $\sigma_+/\sigma_- = 0.6$ также типичен для ряда кристаллов: NaCl (0.54), LiF (0.59), TeSr (0.6), KI (0.61) [4].

Предварительный молекулярно-динамический (МД) расчет проводился при температуре $T = 0.005\varepsilon$, отклонения ионов от положения равновесия

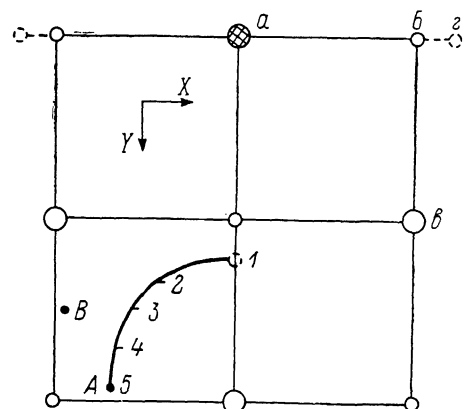


Рис. 1. Образование атомного дефекта вблизи центра перезарядки.

a — перезаряженный анион, b — катионы, c — анионы, z — положение ближайших катионов после релаксации решетки (смещения остальных ионов малы, поэтому они расположены в узлах бездефектной решетки). Сплошная линия — проекция координаты реакции на плоскость X, Y . Координата Z в реперных точках: 1 — 0, 2 — 0.23, 3 — 0.45, 4 — 0.42, 5 — 0.38.

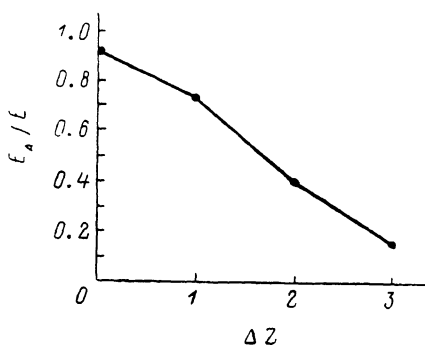


Рис. 2. Энергия образования атомного дефекта E_d при различных величинах перезарядки ΔZ .

Δx составляли $\overline{\Delta x^2} \approx 10^{-3} A^2$, так что конфигурация ионов соответствовала кристаллу ниже точки плавления. После мгновенной перезарядки $Cl^- \rightarrow Cl^z$ ($z=2$) уже через несколько периодов колебаний произошло большое смещение (на расстояние порядка A) одного из ближайших к перезаряженному аниону катиона, тогда как сам Cl^z сместился незначительно. Это дало основание при детальном квазистатическом МД расчете выбрать в качестве координаты реакции смещение катиона.

Далее проводились расчеты квазистатическим методом МД [6], которые заключались в следующем. После мгновенной перезарядки аниона, находящегося в центре рассматриваемого кластера (кластер имел нулевую температуру), производилась релаксация решетки к минимуму потенциальной энергии всей системы, от которого далее отсчитывалась энергия образования атомного дефекта. Координата реакции (оптимальная траектория перемещения катиона для образования френкелевской пары) находилась следующим образом. Задавая пошаговое смещение катиона по оси Y (рис. 1) и производя релаксацию по координатам X и Z , а также по координатам всех остальных ионов, рассчитывали потенциальную энергию решетки. Координата реакции для тройной перезарядки показана на рис. 1. Энергия образования дефекта через грань вблизи точки B (рис. 1) на 5 % больше, чем по траектории, указанной на этом же рисунке. Точка A (точка перевала) не достигает соответствующей грани по оси Y на 0.1 A .

Аналогичные результаты получаются при меньших величинах перезарядки. На рис. 2 изображена зависимость энергии образования дефекта от величины ионизации аниона.

Отметим, что даже при тройной ионизации аниона энергия образования анионного дефекта в несколько раз превышает энергию образования катионного дефекта (хотя, казалось бы, анион находится в очень нестабильном положении). Конечно, эффективность данного механизма для процесса атомного дефектообразования должна сильно зависеть от времени жизни ионизованного аниона, но в настоящее время существуют лишь качественные оценки времен жизни таких состояний [7].

Таким образом, нами показано, что, во-первых, вплоть до тройной перезарядки аниона дефекту легче образовываться в катионной подрешетке; во-вторых, энергия образования атомного дефекта остается конечной величиной и для образования атомного дефекта необходимы достаточно высокие температуры.

Авторы признательны К. М. Салихову за стимулирующее обсуждение.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Клингер М. И., Лущик Ч. Б., Машовец Т. В. и др. // УФН. 1985. Т. 147. № 3. С. 523—559.
 [2] Varley J. H. O. // J. Nucl. Energy. 1954. V. 1. N 1. P. 130—143.
 [3] Chadderton L., Morgan D., Torrens I. // Phys. Lett. 1966. V. 20. N 4. P. 329—332.
 [4] Лейбфрид Г. Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов. М.: Наука. 1963. 312 с.
 [5] Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела. М.: Мир, 1979. Т. 2. 422 с.
 [6] Flynn C. P., Jacucci G. // Phys. Rev. 1982. V. B25. N 10. P. 6225—6233.
 [7] Каршов В. Г., Клингер М. И. // ФТП. 1978. Т. 12. № 10. С. 1887—1897.

Институт химии твердого тела
и переработки минерального сырья СО АН СССР
Новосибирск

Поступило в Редакцию
4 апреля 1989 г.

УДК 538.913

Физика твердого тела, том 31, в. 10, 1989
Solid State Physics, vol. 31, № 10, 1989

РАСЧЕТ СПЕКТРАЛЬНОЙ ПЛОТНОСТИ ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ КАРБИДА И НИТРИДА ТАНТАЛА

Е. М. Гололобов, Н. Н. Дорожкин, Б. В. Новыш

Спектральная плотность электрон-фононного взаимодействия (СП ЭФВ) $\alpha^2(\omega) F(\omega)$ играет важную роль в физике сверхпроводимости, определяя, в частности, температуру перехода в сверхпроводящее состояние T_c .

Мы приводим результаты расчета СП ЭФВ двух сверхпроводящих систем — карбида и нитрида тантала (структура типа В1) в локальном приближении жесткого МТ-потенциала [1]. В этом приближении СП ЭФВ имеет вид

$$\alpha^2(\omega) F(\omega) = \frac{mE_F}{\hbar^2\pi^2N(E_F)} \sum_{\alpha} \sum_l 2(l+1) \sin^2(\delta_l^{\alpha} - \delta_{l+1}^{\alpha}) \times \\ \times \frac{n_l^{\alpha} n_{l+1}^{\alpha}}{n_{\delta_l}^{\alpha} n_{\delta_{l+1}}^{\alpha}} \frac{1}{M_{\alpha}\omega} F_{\alpha}(\omega), \quad (1)$$

где m — масса электрона; \hbar — постоянная Планка, E_F — энергия Ферми; $N(E_F)$, n_l^{α} — полная и парциальные плотности электронных состояний