

УДК: 539.213.1:538.913

©1995

ДИСПЕРСИЯ ФОНОНОВ В АМОРФНОМ Fe

В.К.Каширин

Томская государственная архитектурно-строительная академия

(Поступила в Редакцию 2 февраля 1994 г.

В окончательной редакции 29 декабря 1994 г.)

В рамках теории многократного рассеяния рассчитаны дисперсионные соотношения для трех разных модельных аморфных структур Fe, построенных с использованием метода непрерывной статической релаксации ансамбля нежестких сфер. Для построения и релаксации аморфных структур использовались эмпирические потенциалы Морзе и Джонсона и восстановленный из данных по рассеянию осциллирующий потенциал. Во всех случаях «ротонный минимум» совпадает с максимумом дебаевского рассеяния рентгеновских лучей, что подтверждает достоверность расчетов. Обнаружено, что для продольной моды максимальными частотами обладают колебания с длинами волн, равными радиусу второй координационной сферы, а длины тех волн, частоты которых отвечают «ротонному минимуму», примерно равны расстоянию до ближайших соседей. Численный анализ плотности колебательных состояний показал, что основной вклад дает поперечная мода. Оценка отношений скорости продольного звука к скорости поперечного для всех трех моделей показывает хорошее соответствие с теоретическими предсказаниями.

Проблема коллективных возбуждений в конденсированных топологически разупорядоченных средах, к которым относятся металлические стекла, является предметом интенсивных экспериментальных и теоретических исследований в последние двадцать лет. Обзор фундаментальных аспектов проблемы приведен в известной монографии [1]. Отсутствие трансляционной симметрии не позволяет применять в этом случае методы теории твердого тела [2]. Поэтому при решении задачи об элементарных возбуждениях в аморфной системе из N атомов необходимо либо решать систему дифференциальных уравнений движения размерностью $2 \times 3N$ [3], либо диагонализировать динамическую матрицу размерностью $3N \times 3N$ [3,4]. Альтернативный подход, основанный на методе функций Грина [5,6], позволяет рассчитывать наблюдаемые, усредненные по образцу характеристики, например динамический структурный фактор, дисперсионные соотношения и т.д., причем для расчета требуются лишь усредненные структурные характеристики, такие как корреляционные функции, и средняя по образцу плотность.

В работах [7,8] развит достаточно практичный, на наш взгляд, вариант теории колебаний в топологически разупорядоченных средах. Собственные частоты фононов в рамках этого подхода выражаются в терминах многочастичных корреляционных функций и потенциалов

мажатомного взаимодействия. В приближении парных корреляций дисперсионные соотношения для продольных и поперечных колебаний имеют вид

$$\omega_L^2(k) = \left(\frac{\rho}{M}\right) 4\pi \int_0^\infty W(r) \left\{ r \frac{dV}{dr} \left(1 - \frac{\sin(kr)}{kr}\right) + \left(r^2 \frac{d^2r}{dr^2} - r \frac{dV}{dr}\right) \times \right. \\ \left. \times \left[\frac{1}{3} - \frac{\sin(kr)}{kr} - 2 \frac{\cos(kr)}{(kr)^2} + 2 \frac{\sin(kr)}{(kr)^3} \right] \right\} dr, \quad (1)$$

$$\omega_T^2(k) = \left(\frac{\rho}{M}\right) 4\pi \int_0^\infty W(r) \left\{ r \frac{dV}{dr} \left(1 - \frac{\sin(kr)}{kr}\right) + \left(r^2 \frac{d^2r}{dr^2} - r \frac{dV}{dr}\right) \times \right. \\ \left. \times \left[1 + \frac{\cos(kr)}{(kr)^2} - \frac{\sin(kr)}{(kr)^3} \right] \right\} dr, \quad (2)$$

где $\omega_L(k)$ — частоты продольных (вдоль Z) колебаний, а $\omega_T(k)$ — частоты двукратно вырожденных поперечных колебаний, ρ — средняя плотность, M — атомная масса, $W(r)$ — парная корреляционная функция, $V(r)$ — потенциал межатомного взаимодействия. Необходимо отметить, что дисперсионные соотношения (1)–(2) получены в гармоническом приближении и затухание фононов не учитывается.

В работе [9] проведен расчет дисперсионных соотношений (1)–(2) для различных модельных структур аморфной меди, построенных с помощью метода непрерывной статической релаксации [11,12]. В настоящей работе аналогичный расчет выполнен для трех модельных структур аморфного железа [10,13], при генерации и релаксации которых использовались потенциалы Морзе и Джонсона для кристаллического железа и осциллирующий потенциал, восстановленный из экспериментальных данных [14].

Потенциал Морзе выбирался в виде

$$V_M(R) = D\beta \exp(-\alpha R)(\beta \exp(-\alpha R) - 2), \quad (3)$$

где D , α , β — подгоночные константы, определенные из экспериментальных данных [15].

Потенциал Джонсона для кристаллического α -железа представляет собой сумму трех кубических полиномов, каждый из которых определен в своем интервале, а область определения всего потенциала лежит в интервале $0 \leq R \leq 3.43 \text{ \AA}$ [14]

$$V_J(R) = a_1(R - a_2)^3 + a_3R + a_4, \quad (4)$$

где a_1 , a_2 , a_3 , a_4 — константы, зависящие от номера интервала и определенные из данных по упругим свойствам α -железа и из расчетов дефектов решетки.

Осциллирующий потенциал, определенный из эксперимента на жидком железе [14], имеет вид

$$V_{os}(R) = \frac{1.9715 \cos(2.7R - 4.2228)}{R^3} + 322.9 \exp(7.796 - 7.027R). \quad (5)$$

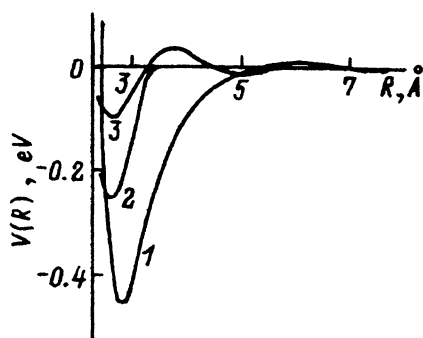


Рис. 1. Зависимость потенциалов межатомного взаимодействия от расстояния.

1 — потенциал Морзе, 2 — потенциал Джонсона [14], 3 — восстановленный из экспериментальных данных на расплаве Fe [14].

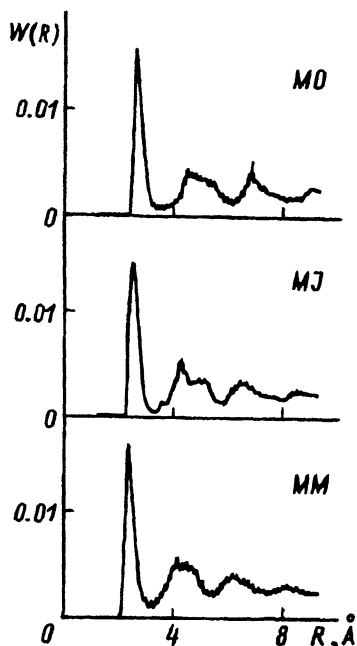


Рис. 2. Парные корреляционные функции для *ММ*, *МЖ* и *МО*.

Здесь расстояние R выражено в ангстремах, а сам потенциал — в электрон-вольтах.

На рис. 1 приведены зависимости потенциалов (3)–(5) от расстояния. Для краткости в дальнейшем будем обозначать кластер, отрелаксированный потенциалом Морзе, — Моделью Морзе (*ММ*), потенциалом Джонсона — (*МЖ*) и осциллирующим потенциалом — (*МО*).

На рис. 2 представлены необходимые для расчета дисперсионных соотношений парные корреляционные функции для (*ММ*), (*МЖ*) и (*МО*). Детали тонкой структуры и связь их с характером межатомного взаимодействия подробно обсуждены в [10,13].

Как видно из соотношений (1) и (2), для расчета дисперсии фононов необходимо задать плотность модели, которая в случае аморфного кластера конечных размеров и неправильной формы не является тривиальной константой, а зависит от расстояния до центроида кластера [16]. В центральных областях кластеров плотность почти постоянна, и именно эти значения ($0.105 (1/\text{Å}^3)$ для (*ММ*), $0.083 (1/\text{Å}^3)$ для (*МЖ*), $0.069 (1/\text{Å}^3)$ для (*МЖ*)) и были использованы для расчета.

На рис. 3 приведены кривые дисперсии продольных и поперечных колебаний для всех трех случаев, нормированные на максимальную частоту продольных колебаний (*ММ*). Прежде всего отметим, что общий ход зависимостей характерен для топологически разупорядочен-

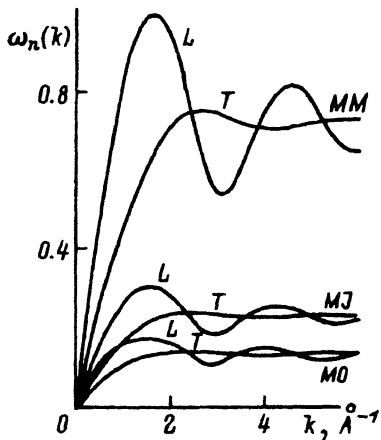


Рис. 3. Дисперсионные соотношения для квазифононов в модельных структурах. L — продольная мода, T — поперечная. Зависимости нормированы на ω_{\max}^L в MM .

ных систем, в том числе и для жидких металлов [7,8,17,21]. Классической особенностью дисперсии продольных колебаний в топологически разупорядоченных средах является наличие «ротонного минимума» на кривой $\omega_L(k)$ [18,21], причем положение этого минимума всегда близко к положению главного максимума статического структурного фактора, а волновой вектор, отвечающий максимуму частоты продольных колебаний, равен половине расстояния до главного максимума структурного фактора [17,19]. Расчет структурного фактора, проведенный по уравнению Дебая

$$I(k) = \frac{1}{N} \sum_{ij} f_i(k) f_j(k) \frac{\sin(kR_{ij})}{kR_{ij}}, \quad (6)$$

где $f_i(k)$ — атомные факторы рассеяния, R_{ij} — расстояние между атомами (i, j), показал весьма хорошее соответствие между положениями «ротонных минимумов» (ω_L^{\min}) на кривых $\omega_L(k)$ и главных максимумов структурных факторов для всех трех моделей (табл. 1). В табл. 2 приведены длины волн, отвечающие ω_L^{\max} и ω_L^{\min} , и радиусы первых двух координационных сфер для всех трех кластеров. Сопоставление данных показывает, что ω_L^{\max} соответствуют волны с длиной, практически совпадающей с радиусом второй координационной сферы, а длины волн, соответствующих «ротонному минимуму», близки к радиусу первой координационной сферы. Полученные результаты в каком-то

Таблица 1

Положения главных максимумов структурных факторов q_1^{\max} ($1/\text{Å}$) и «ротонных минимумов» $q_{\omega_L^{\min}}$ ($1/\text{Å}$) для всех трех моделей

	q_1^{\max}	$q_{\omega_L^{\min}}$
MM	3.2	3.1
MJ	3.05	2.95
MO	2.9	2.8

Длины волн, отвечающие ω_L^{\min} и ω_L^{\max} , и радиусы первых двух координационных сфер для всех трех кластеров

	$\lambda _{\omega_L^{\min}} (\text{Å})$	$R_1 (\text{Å})$	$\lambda _{\omega_L^{\max}} (\text{Å})$	$R_2 (\text{Å})$
<i>MM</i>	2.0	2.415	3.9	4.165
<i>MJ</i>	2.13	2.565	4.18	4.315
<i>MO</i>	2.24	2.615	4.33	4.515

смысле коррелируют с данными по дисперсии фононов в кристаллических твердых телах, где во многих случаях максимум частот приходится на волновой вектор, лежащий вблизи границы зоны Бриллюэна. Постоянная решетки α -железа $a = 3.61 \text{ Å}$ и $k = \frac{2\pi}{a} = 1.7 \text{ Å}^{-1}$, что указывает на то, что при аморфизации не происходит принципиальных изменений в закономерностях, присущих элементарным возбуждениям в кристаллических твердых телах [19].

Плотность состояний по определению может быть записана следующим образом [20]:

$$G(\omega) = \frac{1}{3} \sum_{jk} \delta(\omega - \omega_j(k)), \quad (7)$$

где j — номер моды. На рис. 4 представлены функции распределения частот для (*MM*), (*MJ*) и (*MO*), причем характер зависимостей похож

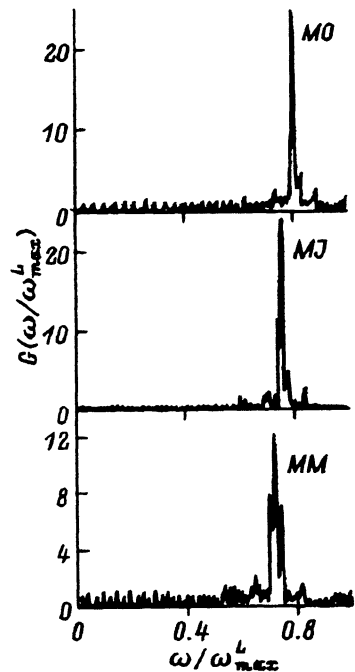


Рис. 4. Плотности колебательных состояний во всех трех модельных кластерах. В каждом случае частоты нормированы на соответствующую ω_L^{\max} .

на распределение частот в хаотической одномерной цепочке [20]. Такое сходство становится понятным, если вспомнить, что соотношения (1)–(2) получены для изотропной, однородной среды и частота зависит только от модуля волнового вектора. Сравнение рис. 3 и 4 показывает, что пик в функции распределения частот обусловлен вкладом поперечной моды, идущей почти параллельно оси абсцисс как раз в области 0.75 от нормированной максимальной частоты.

Дополнительным критерием корректности численных результатов моделирования может служить оценка отношений скоростей продольного и поперечного звука, которые в гидродинамическом пределе при $k \rightarrow 0$ определяются как $v = \frac{\omega}{k}$. В работе [7] получена следующая оценка отношения скоростей продольного и поперечного звука: $(v_L/v_T) \cong \sqrt{3}$. Из численных зависимостей, приведенных на рис. 3, получены следующие оценки: $(v_L/v_T) = 1.98$ для (ММ), $(v_L/v_T) = 1.73$ для (МЖ) и $(v_L/v_T) = 1.77$ для (МО).

Список литературы

- [1] Займан Дж. Модели беспорядка. М. (1982), 592 с.
- [2] Харрисон У. Теория твердого тела. М. (1972), 616 с.
- [3] Бетгер Р. Принципы динамической теории решетчатых структур. М. (1986), 382 с.
- [4] Dean P. Rev. Mod. Phys. **44**, 2, 127 (1972).
- [5] Вакарчук И.А., Мигаль В.М., Ткачук В.М. ТМФ **75**, 2, 306 (1988).
- [6] Hafner J. J. Phys. **16**, 5773 (1983).
- [7] Takeno S., Goda M. Prog. Theor. Phys. **45**, 2, 331 (1971).
- [8] Takeno S., Goda M. Prog. Theor. Phys. **47**, 3, 790 (1972).
- [9] Каширин В.Б. Изв. вузов. Физика, **4**, 31 (1994).
- [10] Каширин В.Б., Козлов Э.В. (Матер. Междунар. семинара 15–22 окт., 1990 г. Владивосток) Тр. Ч. II. Владивосток, 1991. С. 231.
- [11] Kashirin V.B., Kozlov E.V. J. Non-Cryst. Solids. **163**, 24 (1993).
- [12] Каширин В.Б., Козлов Э.В. ФММ **76**, 1, 19 (1993).
- [13] Каширин В.Б., Козлов Э.В. Расплавы, **1**, 73 (1994).
- [14] Yamamoto R., Matsuoka H. and Doyama M. Phys. St. Sol. **45**, 305 (1978).
- [15] Torrens I.M. Interatomic Potentials. Acad. Press: N.Y. (1972).
- [16] Mercier D. // Phys. Rev. B. **27**, 2, 1292 (1983).
- [17] Wang Y.R. and Overhauser A.W. Phys. Rev. **38**, 14, 9601 (1988).
- [18] Марч Н., Янг У., Сампантхар С. Проблема многих тел в квантовой механике. М. (1969), 496 с.
- [19] Hafner J. J. Phys. **16**, 5773 (1983).
- [20] Мараудин А. Дефекты и колебательный спектр кристаллов. М. (1968), 432 с.
- [21] Сак Ж.-Б., Рудин Х. Металлические стекла. Вып. II. Атомная структура и динамика, электронная структура, магнитные свойства. Под ред. Г. Бек и Г. Гюнтеродт. М. (1986), 251 с.