

- [1] Дерягин Б. В., Кротова Н. А., Смилга В. П. Адгезия твердых тел. М.: Наука, 1973. 296 с.
- [2] Липсон А. Г., Кузнецов В. А., Саков Д. М. и др. // ДАН СССР. 1987. Т. 294. № 5. С. 1161—1164.
- [3] Dickinson J. T., Donaldson E. E., Park M. K. // J. Mat. Sci. 1981. V. 16. N 10. P. 2987—2998.
- [4] Липсон А. Г., Петров С. В., Кузнецов В. А. и др. // ДАН СССР. 1989. Т. 306. № 6. С. 1409—1412.
- [5] Lenger B., Wilhelm M., Jobst V. e. a. // Sol. St. Comm. 1988. V. 65. N 12. P. 1545—1548.
- [6] Горьков А. П., Копнин Н. Б. // УФН. 1988. Т. 156. № 1. С. 117—134.
- [7] Песчанская Н. Н., Смирнов Б. И., Шпейзман В. В. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 8. С. 176—185.

Институт физической химии
АН СССР
Москва

Поступило в Редакцию
20 февраля 1990 г.

УДК 538.214 : 541.571.3

© Физика твердого тела, том 32, № 8, 1990
Solid State Physics, vol. 32, N 8, 1990

К ТЕОРИИ РАСЧЕТА ЭФФЕКТА БЛОКИРОВАНИЯ ВОДОРОДА В МЕТАЛЛАХ

М. Н. Зубцов, В. Г. Гаврильев

Теоретическое описание эффектов блокирования водорода в металлах требует знания потенциала протон-протонного взаимодействия $V_{\text{нн}}$. Следуя [1, 2], представим полный потенциал в виде суммы деформационного потенциала V_{Si} и экранированного кулоновского потенциала V_e .

Вклад V_{Si} обычно рассчитывается на основе данных о фоновых спектрах и концентрационных зависимостях спонтанных деформаций в гармоническом приближении [1]. Для вычисления V_e воспользуемся предложенным в работе [3] представлением

$$V_e(r) = \frac{2e^2}{\pi r} \int_0^{\infty} \frac{dq}{q} \frac{\sin(rq)}{\varepsilon(q)}. \quad (1)$$

В этой работе было показано, что ни при каких известных авторам представлениях для $\varepsilon(q)$ и ни при каких значениях числа экранирующих электронов Z_e на атом металла в рамках гармонического приближения для V_{Si} не удастся описать экспериментально наблюдаемый эффект блокирования [1], т. е. получить значения, удовлетворяющие условию

$$(V_{\text{Si}} + V_e)_r \geq T_e, \quad r = 1, 2, 3, \dots \quad (2)$$

В связи с этим авторами сделан вывод о том, что несоответствие между полученным результатом и экспериментальными фактами обусловлено не учтенной в потенциале V_{Si} ангармоничностью.

На наш взгляд, полученный отрицательный результат имеет иное происхождение. Использованные в работе [3] выражения для $\varepsilon(q)$ содержат модельные параметрические представления обменного потенциала. Соответствующие численные значения этих параметров определялись численными значениями интегралов от функции распределения числа частиц, а не самой этой функцией. При этом терялась зависимость от особенностей поведения функции распределения. Вместе с тем именно эти особенности определяют эффект блокирования.

В работе [4] была предложена непараметрическая линеаризованная функция отклика, в которой учтено нелокальное обменное взаимодействие.

Для случая одиночной примеси в газе свободных электронов соответствующая функция диэлектрической проницаемости имеет вид

$$\epsilon(q) = 1 + \frac{k_0^2}{q^2} L(x) - \frac{k_0^2}{4k_F^2} F(x), \quad (3)$$

где $L(x)$ — известная функция отклика Линдхарда,

$$F(x) = \frac{1}{x} \begin{cases} D(2x) - D(x), & x \leq 1/2, \\ \pi^2/2 - D(x) - D(1/2x), & 1/2 < x \leq 1, \\ D(1/x) - D(1/2x), & 1 < x, \end{cases}$$

причем

$$D(x) = 2 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^{2k+1}}{(2k+1)^2} = \text{Li}_2(x) - \text{Li}_2(-x)$$

— разности дилогарифмов Эйлера, $x = q/(2k_F)$, k_0 — модуль волнового вектора Томаса—Ферми.

Функция $F(x)$ представляет собой Фурье-образ вклада обменного потенциала Фока [5] в линеаризованную функцию отклика и должна обеспечить верное описание распределения индуцированной плотности в пространстве (во всяком случае на расстояниях, превышающих длину экранирования). Интересующие нас точки пространства находятся именно на таких расстояниях. Поэтому есть основание надеяться на большую достоверность оценок при использовании проницаемости (3).

Вычисленные нами значения потенциала (1) с диэлектрической проницаемостью (3) показывают, что в ниобии при концентрации водорода $x < 0.6$ условия (2) выполняются для первых трех координационных сфер. Для гидрида палладия (октапоры в ГЦК решетке) эти условия не выполняются.

Авторы считают, что полученное согласие с опытными фактами не случайно и может служить подтверждением большей степени корректности при использовании проницаемости (3) для описания электронной структуры гидридов металлов.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Horner H., Wagner H. // J. Phys. 1974. V. C7. N 18. P. 3305—3325.
 [2] Dietrich S., Wagner H. // Zs. Phys. 1979. V. B36. N 2. P. 121—126.
 [3] Вакс В. Г., Зеин Н. Е., Зиненко В. И., Орлов В. Г. // ЖЭТФ. 1984. Т. 87. № 6. С. 2030—2046.
 [4] Зубцов М. Н. // Препринт физ. фак. МГУ. 1985. № 32/1985.
 [5] Фок В. А. Начала квантовой механики. М., 1976. 376 с.

Московский
государственный университет
им. М. В. Ломоносова

Поступило в Редакцию
16 октября 1989 г.
В окончательной редакции
12 февраля 1990 г.

КРИТИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ КРИСТАЛЛОВ С ТОЧЕЧНЫМИ И ДИСЛОКАЦИОННЫМИ УПРУГИМИ ДИПОЛЯМИ

А. А. Лужков

Исследование влияния упругих дефектов на свойства фазового перехода (ФП) второго рода проводилось ранее при учете какого-либо одного типа таких дефектов [1-3]. Было показано, что упругие взаимодействия в си-