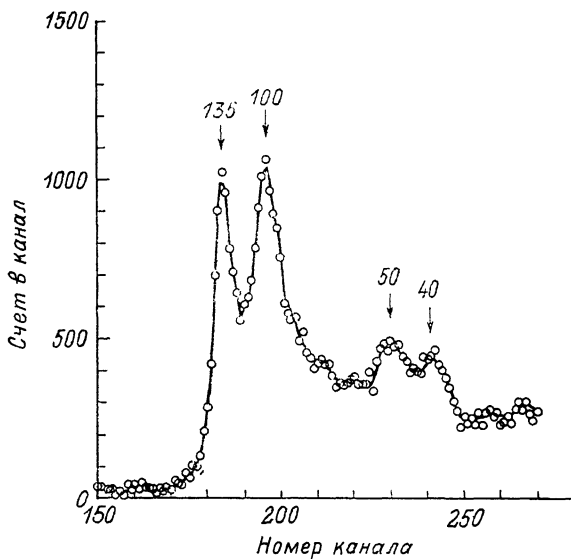


НАБЛЮДЕНИЕ ПРИМЕСНЫХ КОЛЕБАНИЙ АТОМОВ ВНЕДРЕНИЯ В ТВЕРДОМ РАСТВОРЕ $Y-O-N$ МЕТОДОМ НЕУПРУГОГО РАССЕЯНИЯ МЕДЛЕННЫХ НЕЙТРОНОВ

С. И. Морозов, В. В. Сумин

В работе [1] исследования методом неупругого рассеяния медленных нейтронов (НРН) твердого раствора водорода в ГПУ решетке Y впервые показали, что форма колебательного спектра водорода не соответствует локальной симметрии междоузельной позиции, представляющей собой правильный тетраэдр. Наличие двух пиков в спектре НРН атомами водо-



Спектр НРН сплава $Y_{0.03}H_{0.03}$ в области примесных колебаний кислорода и водорода.

Положения указанных стрелками особенностей даны в мэВ и соответствуют передаче энергии нейтронов $\sigma = E - E_0$, где E_0 и E — энергии нейтронов до и после рассеяния. Из спектра НРН вычтено рассеяние на чистом иттрии.

рода в сплаве $YH_{0.1}$ оказалось связано с разной частотой колебаний поляризованных вдоль оси C и в базисной плоскости.

Возникает вопрос, имеет ли место такого рода анизотропия во взаимодействии иттрия с более тяжелыми и большими по размеру атомами внедрения. В связи с этим в настоящей работе методом НРН исследовался сплав $Y_{0.03}H_{0.03}$, полученный многократной переплавкой Y и Y_2O_3 в соответствующих пропорциях. Водород насыщался из газовой фазы.

Измерения проводились на спектрометре ДИН-2ПИ [2], установленном на реакторе ИБР-2 при начальной энергии нейтронов $E_0 = 10$ мэВ. Высоко-частотная часть спектра, определяемая рассеянием нейтронов на локальных колебаниях (ЛК) атомов кислорода и водорода, приведена на рисунке. Структура спектра, отвечающего колебаниям атомов водорода ($\epsilon_{H_1} = 100$ мэВ и $\epsilon_{H_2} = 134$ мэВ), подобна той, что наблюдалась в [1] для $YH_{0.1}$.

Как видно из рисунка, спектр колебаний атомов кислорода в $Y_{0.03}H_{0.03}$ также состоит из двух особенностей $\epsilon_{O_1} = 40$ и $\epsilon_{O_2} = 50$ мэВ, что не соответствует почти кубической симметрии октаэдрической позиции (ОП), занимаемой атомами кислорода в решетке Y . Во всех исследованных ранее методом НРН сплавах с ГПУ структурой металлической решетки спектр

примесных колебаний p -элементов внедрения, занимающих ОП, наблюдался как один трехкратно вырожденный пик [3].

Одним из объяснений наличия двух пиков в спектре колебаний атомов кислорода может быть выпадение небольшого количества фазы Y_2O_3 , спектр НРН которой (измеренный в близких к настоящим условиям) имеет две основные особенности в области передач энергии $\epsilon=20$ и $\epsilon=42$ мэВ.¹ Действительно, на рентгенограмме образца $YO_{0.03}H_{0.03}$ имеются «следы» линий Y_2O_3 . Однако измерения методом НРН безводородного сплава $YO_{0.03}$, в котором не удалось зафиксировать кислород в α -фазе и практически весь он выпал в виде фазы Y_2O_3 , показали отсутствие сколько-либо заметных особенностей в области передач энергии 40—50 мэВ на фоне «подложки» многофононного рассеяния от атомов матрицы.

На наш взгляд, наблюдаемое расщепление пика ЛК как в случае $Y-H$, так и в случае $Y-O$ взаимодействия может быть объяснено тем, что атом внедрения смещен из центра междоузельной позиции и, таким образом, симметрия точечного дефекта снижена.

Динамика p -элемента внедрения, как правило, может быть удовлетворительно описана в рамках эффективного парного потенциала $Me-X$, причем положение минимума этого потенциала $R_0=R_M+R_X$, где R_M —металлический радиус атомов матрицы, а R_X —полинговский радиус примеси внедрения [4]. В случае $Y-O$ системы $R_0=2.46$ Å, что заметно меньше, чем расстояние от узла металлической решетки Y до центра октаэдрической позиции $R_{OII}=2.55$ Å. Это может приводить к тому, что потенциальный профиль силового поля, в котором находится атом внедрения, имеет два минимума. При такой форме потенциала можно ожидать заметного расщепления локального уровня.

Другое обстоятельство, которое может приводить к понижению симметрии точечного дефекта, — это взаимодействие $O-O$ и образование соответствующих пар атомов аналогично образованию $H-H$ пар в $YH_{0.1}$. Возможно, что наличие «двухъямного» потенциала и смещение атомов кислорода из центра ОП в $Y-O-H$ стимулируют образование пар $O-O$, и глубина ям, таким образом, различна.

МНК анализ структуры пиков ЛК свидетельствует о том, что взаимодействие $O-H$ (захват водорода на ловушках кислорода) также имеет место в сплаве $Y-O-H$, что, вероятно, способствует стабилизации α -фазы по кислороду. Это обстоятельство приводит к дополнительному усложнению структуры пиков ЛК водорода, однако, по-видимому, не является определяющим в наблюдаемом расщеплении пика ЛК кислорода.

В заключение отметим основные выводы работы. Во-первых, в процессе приготовления образцов было установлено, что присутствие в образце $Y-O$ водорода приводит к стабилизации α -фазы по кислороду при комнатной температуре. Во-вторых, в спектре колебаний атомов кислорода в системе $Y-O-H$ наблюдается расщепление уровней локальных колебаний. По нашему мнению, одной из причин наблюдаемого эффекта может быть снижение симметрии дефекта, однако для окончательного ответа необходимо проведение дополнительных исследований.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Anderson I. S., Rush J. J., Udovic T., Rowe J. M. // Phys. Rev. Lett. 1986. V. 57. N 22. P. 2822—2825.
- [2] Parfenov V. A., Klemyshev P. S., Morozov I. G., Pavlov A. F. // Neutr. Inelast. Scatt. 1977. IAEA, Vienna, 1978. V. 1. P. 81—123.
- [3] Морозов С. И., Сумин В. В., Белушкин Ф. В., Натканец И. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 6. С. 1653—1659.
- [4] Морозов С. И., Сумин В. В. // Препринт ФЭИ-1859. Обнинск, 1987.

Физико-энерготехнический институт
Обнинск

Поступило в Редакцию
16 мая 1991 г.

¹ Измерения спектра НРН сплава Y_2O_3 выполнены В. С. Шахматовым.