

ность в определении величины η_{max}^2 . В качестве величины ξ_{max}^2 используется ее среднее значение, тогда как ξ_{max}^2 может меняться в зависимости от φ от 0.7 до 1. Такое предположение дает погрешность 15%. Суммарная погрешность измерения γ для пленки ЖИГ на ПТ составляла 25%.

4. Таким образом, дискретность спектров упругих и спин-волновых возбуждений в планарной структуре ферритовая пленка – подложка приводит к аномальной зависимости резонансных полей мод СВР от частоты возбуждения. В результате параметр определен по спектральным характеристикам СВР на частотах магнитоупругого синхронизма. В сочетании с методом „магнитной ямы“ [4] выше-разработанная методика позволяет определять параметр магнитоупругого взаимодействия с высокой степенью локальности в плоскости пленки (до 200 мкм).

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Б у г а е в А.С., Г у л я е в Ю.В., З и л ь б е р м а н П.Е., Ф и л и м о н о в Ю.А. // ФТТ. 1981. Т. 23. N 9. С. 2647–2652.
- [2] Г о р с к и й В.Б., П о м я л о в А.В. // Письма в ЖТФ. 1989. Т. 15. № 7. С. 61–64.
- [3] Л е - К р о у Р., К о м с т о к Р. // Магнитоупругое взаимодействие в ферромагнитных диэлектриках. В кн.: Физическая акустика / Под ред. У. Мезона. Т. 3. Ч. Б. М.: Мир, 1968. 156 с.
- [4] К а л и н и к о с Б.А., К о в ш и к о в Н.Г., Н а д е е в М.М. Всес. конф. по физике магнитных явлений. Тез. докл., Тула. 1983. 206 с.

Московский физико-технический институт

Поступило в Редакцию
12 апреля 1990 г.

Письма в ЖТФ, том 16, вып. 17

12 сентября 1990 г.

01; 02; 05.1; 05.4

© 1990

РАСЧЕТ ЦЕПОЧЕК ИОН-ИОННЫХ СТОЛКНОВЕНИЙ
В La_2SiO_4
МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Н.В. М о и с е е в

Перспектива использования открытых в 1986 году высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) вызывает большой интерес к

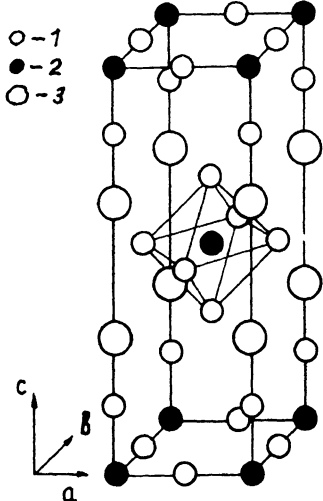


Рис. 1. Элементарная ячейка La_2CuO_4 .

Обозначения: 1 - кислород, 2 - медь, 3 - лантан.

типу и механизмам образования радиационных дефектов в них. Авторы работы [1] облучали пленки $\gamma\text{-Ba-Cu-O}$ ионами водорода, гелия и аргона. Анализ результатов показал, что механизм радиационных повреждений обусловлен, в основном, ион-ионными соударениями, а не процессами электронных потерь энергии. Поэтому для теоретического исследования динамики радиационных процессов можно применять метод молекулярной динамики.

В настоящей работе изучали цепочки ион-ионных столкновений в тетрагональном и орторомбическом La_2CuO_4 . Элементарная ячейка тетрагонального La_2CuO_4 изображена на рис. 1. Система октаэдров CuO_6 образует в плоскости (110) линейные цепочки, состоящие из ионов меди и кислорода и окруженные симметричными линзами. Орторомбическая структура отличается, в частности, тем, что октаэдры повернуты вокруг оси С и наклонены относительно тетрагональной оси (110). Ионы меди и кислорода зигзагообразно смещены от оси цепочки, а линзы несимметричны. В обоих типах структур эти ряды ионов являются наиболее плотноупакованными. Следовательно, можно предположить, что фокусоны и крадионы будут распространяться по этим цепочкам.

Вычисления проводили по программе *MOLDYN* [2]. Структурные параметры фаз взяли из работы [3]. Расчетная ячейка кристаллита сферической формы содержала 903 иона в случае тетрагональной фазы и 540 ионов в случае орторомбической фазы. Использовали „жесткие“ граничные условия. Влияние границ исключили введением приграничного демпфирующего слоя. Межионное взаимодействие определяли в виде потенциалов Леннарда-Джонса. Эта функциональная форма является наиболее простой для описания взаимодействий в ионных кристаллах [4]. Параметры потенциалов подгоняли под экспериментальные данные для кислорода, меди и лантана. Потенциалы взаимодействия ионов разного сорта вычисляли по „комбинационному“ правилу. На межионных расстояниях, характерных для процессов столкновений, взаимодействие задавали потенциалами типа Борна-Майера, которые были вычислены в работе [5].

Исследовалась динамика столкновений ионов в указанных выше цепочках. Первично выбитыми ионами (ПВИ) являлись как Cu , так и O . Начальные энергии ПВИ измерялись в пределах 20–50 эВ, углы вылета составляли 0–20°.

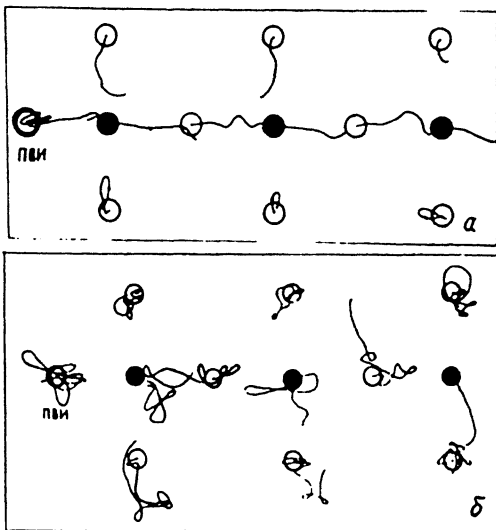


Рис. 2. Динамика ион-ионных столкновений в La_2CuO_4 . а - тетрагональная структура, б - орторомбическая структура. Обозначения аналогичны рис. 1. $E_{ПВИ} = 20$ эВ, угол вылета - 10° .

На рис. 2, а представлен фрагмент развития цепочки столкновений в тетрагональном La_2CuO_4 . Сплошными линиями показаны траектории движения ионов в проекции на плоскость (110). Из рисунка видно, что возникает фокусировка передаваемого импульса. Но характер фокусировки оказался необычным. Как и в работе [6], в процессе ускорения ионов изменялась величина начального угла вылета и у некоторых ионов происходила смена знака направления вылета. Анализ траекторий показал, что фокусированию импульса способствовали окружающие цепочку линзы. Характерными оказались большие смещения ионов кислорода в линзах, наблюдавшиеся также в работе [6]. Кроме того, по цепочке осуществлялась передача массы. Можно полагать, что в этом случае существует некоторая аналогия с динамическим краудионом в металлах.

На рис. 2, б показан фрагмент развития цепочки столкновений в орторомбическом La_2CuO_4 . В этом случае цепочка распространяется иначе, чем в тетрагональной структуре. При равных энергии и угле вылета ПВИ в орторомбической структуре нет передачи массы по цепочке, а происходит лишь передача энергии. Такая динамика столкновений сохранялась во всем исследованном интервале энергий и углов вылета ПВИ.

Таким образом, расчеты показали, что в двух структурных фазах La_2CuO_4 существует заметная разница в поведении цепочек ион-ионных столкновений в направлении плотной упаковки. Поскольку такие цепочки играют важную роль в процессах радиационного дефектообразования, следует, по-видимому, ожидать, что воздейст-

вие каскадообразующего облучения на La_2CuO_4 в разных структурных фазах должно приводить к образованию отличающихся дефектных структур.

В заключение автор выражает благодарность А.Н. Петрову за помощь в проведении вычислений на ЭВМ.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] E n g e r B., G e e r k J., L i H.C., L i n k e r G., M e y e r O., S t r e h l i a n B. // XVIII Int. Conf. Low Temp. Phys. LT18, Aug. 20-26, 1987, Kyoto, Japan.
- [2] П р о т а с о в В.И. Кинетика радиационного дефектообразования при воздействии быстрых нейтронов на металлы в зависимости от параметров облучения. Канд. дис., Свердловск: ИФМ УрО АН СССР, 1984. 22 с.
- [3] J o r g e n s e n J.D., S c h u t t l e r H.B., H i n k s D.G., G a p o n e D.W., Z h a n g K. B r o d s k y M.B., S c a l a p i n o D.J. // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 58. P. 1024.
- [4] Х а р р и с о н У. Электронная структура и свойства твердых тел. Т. 2. Физика химической связи. М.:Мир, 1983. 332 с.
- [5] A b r a h a m s o n A.A. // Phys. Rev. 1969. V. 178. P. 76.
- [6] К и р с а н о в В.В., М у с и н Н.Н. // Письма в ЖТФ. 1989. Т. 15. В. 23. С. 71.

Институт физики металлов
АН СССР,
Свердловск

Поступило в Редакцию
8 июня 1990 г.

Письма в ЖТФ, том 16, вып. 17. 12 сентября 1990 г.

11; 12

© 1990

ГЕНЕРАЦИЯ НЕЙТРОНОВ МЕХАНИЧЕСКИ АКТИВИРОВАННОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ МЕТАЛЛОВ

А.Г. Л и п с о н, В.А. К л ю е в,
Ю.П. Т о п о р о в, Б.В. Д е р я г и н, Д.М. С а к о в

Ранее нами было показано, что в процессе механического воздействия и некоторое время после его окончания в системе типа титан-дейтерий возможно инициирование DD -реакций синтеза, сопровождающихся эмиссией нейтронов [1-3]. Было установлено, что генерация нейтронов является следствием образования дейтеридной фазы типа TiD_x , при механическом воздействии, создающем свежую поверхность, через которую дейтерий диффундирует в образцы. Однако, вследствие высокой дисперсности частиц TiD_x ,