

УДК 534.1
ББК В312

Владимир Евгеньевич Холодовский
кандидат физико-математических наук, доцент,
Брянский государственный университет им. И. Г. Петровского
(Брянск, Россия), e-mail: v-e-holodovsky@yandex.ru
Елена Юрьевна Краюшкина
аспирант,
Брянский государственный университет им. И. Г. Петровского
(Брянск, Россия), e-mail: v-e-holodovsky@yandex.ru

Дисперсионные соотношения для кристаллов твёрдых растворов со структурой CsCl¹

На основе ранее разработанной методики построена динамическая модель для кристаллов, имеющих структуру типа CsCl, учитывающая взаимодействие между атомами на первых двух координационных сферах. С применением экспериментальных данных по нейтронному рассеянию сделаны расчёты дисперсионных кривых и упругих констант для кристаллов твёрдых растворов NiAl, ZnCu и FeAl.

Ключевые слова: кристаллическая решётка, динамическая модель, межатомное взаимодействие, дисперсионные кривые, упругие константы.

Vladimir Evgen'evich Kholodovskiy
Candidate of Physics and Mathematics, Associate Professor,
Petrovskiy Bryansk State University
(Bryansk, Russia), e-mail: v-e-holodovsky@yandex.ru
Elena Yur'evna Krayushkina
Postgraduate Student,
Petrovskiy Bryansk State University
(Bryansk, Russia), e-mail: v-e-holodovsky@yandex.ru

Dispersion Relations for Solid Solution Crystals with CsCl Structure

Using a previously developed method, a dynamic model for the crystal structure of CsCl type is constructed. The model takes into account the interactions between the atoms of the first two coordination spheres. Based on experimental data on neutron scattering, calculations of the dispersion curves and elastic constants for crystal solid solutions of NiAl, ZnCu and FeAl are made.

Keywords: crystal lattice, dynamic model, interatomic interaction, dispersion curves, elastic constants.

В работах [1–5] в адиабатическом приближении была построена динамическая модель, описывающая вибрацию кристаллов инертных газов, а также металлов, имеющих ОЦК и ГЦК кристаллические решётки. При определении сил межатомного взаимодействия использовался механизм Ван-дер-Ваальсовских связей. Разработанные математические методы позволили произвести расчёты дисперсионных кривых, фоновых спектров, температурных зависимостей теплоёмкости и среднеквадратичных смещений для кристаллов инертных газов при различных сжатиях, а также для ряда элементов 1–5 групп таблицы Д. И. Менделеева. Расчёты производились без использования подгоночных параметров, а исходными данными служили значения упругих констант, атомная масса и параметр решётки соответствующего вещества. Для КИГ в тех случаях, когда данные по упругим константам отсутствовали, использовались экспериментальные данные по значениям дисперсионных кривых на границе зоны Бриллюэна. Полученные результаты обнаружили достаточно хорошее соответствие имеющимся экспериментальным данным.

¹Работа выполнена в рамках Государственного задания вузу Минобрнауки РФ по теме «Тепловые свойства новых термоэлектрических, полупроводниковых и оптических материалов».

К кристаллам, обладающим металлическими связями, помимо моноатомных относятся также бинарные соединения, называемые твёрдыми растворами или сплавами. Среди них, например, находятся соединения NiAl и ZnCu и др., кристаллические решётки которых имеют структуру типа CsCl. Исследования указанных соединений проводились в работах [6–11] и др. В них речь шла о сплавах, в которых соотношение образующих элементов отличалось от 50 % на 50 %. Так, в работе [6] с использованием ультразвуковых методов исследования определялась температурная зависимость значений упругих констант сплава NiAl от концентрации Ni. В работе [7] на основе экспериментальных данных производились расчёты дисперсионных кривых для сплава NiAl, где концентрация Ni составляла 49.4 %. Для расчётов использовалась динамическая модель Борна-Кармана. Для достижения приемлемой точности по отношению к экспериментальным данным необходим был учёт сил взаимодействия между атомами, расположенными друг относительно друга на 1–4 координационных сферах. Описание такого рода сил потребовало введения 8 свободных параметров. На основе полученных данных производились расчёты фононного спектра. Ещё раньше аналогичные исследования были проведены в работе [8] для сплава ZnCu, где концентрация Zn составляла 47 % и 48 %. Здесь также авторы отталкивались от экспериментальных данных по нейтронному рассеянию и использовали модель Борна-Кармана. Используя 8 подгоночных параметров, они произвели расчёты дисперсионных кривых, упругих констант и фононных спектров сплавов. Следует отметить, что во всех случаях физическая суть механизма межатомного взаимодействия оставалась невыясненной.

В настоящей работе в продолжение проведенных исследований разработанная динамическая модель рассматривается применительно к бинарным решеткам твёрдых растворов NiAl, ZnCu и FeAl, где соотношение образующих атомов считается равным 50 % на 50 %. Не вдаваясь в физическую суть механизмов межатомного взаимодействия (см. работы [1–5]), мы рассмотрим лишь математическую сторону вопроса.

1. Уравнение динамики. Рассмотрим бинарную кубическую кристаллическую решётку типа CsCl. Такая решётка может быть получена путём наложения двух простых кубических подрешёток, когда центры кубических ячеек первой подрешётки совмещаются с соответствующими узлами второй. Пусть каждая из подрешёток имеет форму куба, ребра которого содержат n атомов. Тогда $N = n^3$ – число атомов в каждой из подрешёток.

Обозначим через a параметр решётки, а через μ_1 и μ_2 – массы атомов, образующих первую и соответственно вторую подрешётки кристалла. Выберем в пространстве систему кристаллографических координат $Oxyz$ с единичными направляющими векторами $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$ координатных осей так, чтобы радиус-вектор каждого узла $P = P_{ijk}^1$ первой подрешётки мог быть задан по формуле

$$\mathbf{r}_{ijk}^1 = a(i\mathbf{e}_x + j\mathbf{e}_y + k\mathbf{e}_z).$$

Тогда радиус-вектор каждого узла $P = P_{ijk}^2$ второй подрешётки определится так:

$$\mathbf{r}_{ijk}^2 = [a(i + 1/2)\mathbf{e}_x + (j + 1/2)\mathbf{e}_y + (k + 1/2)\mathbf{e}_z],$$

где $i, j, k = 1, \dots, n$ – некоторый набор натуральных чисел.

Пусть Λ – множество всех числовых наборов $\xi = (i, j, k)$, в которых $i, j, k = 1, \dots, n$, а A_ξ^1 и A_ξ^2 – атомы первой и второй подрешёток, положения равновесий которых находятся в узлах $P_\xi^1 = P_{ijk}^1$ и $P_\xi^2 = P_{ijk}^2$ соответственно. Обозначим через $S_l^1(\xi)$ и $S_l^2(\xi)$ множества всех мультииндексов $\xi' \in \Lambda$, нумерующих атомы, находящиеся на l -той координационной сфере атомов A_ξ^1 и A_ξ^2 соответственно.

Пусть $\xi' = (i', j', k') \in S_l^1(\xi)$. Обозначим через $\mathbf{e}_{\xi\xi'}^1$ единичный вектор, указывающий направление от узла P_ξ^1 к узлу $P_{\xi'}^1$. Тогда, как легко видеть, справедливо равенство

$$\mathbf{e}_{\xi\xi'}^1 = \frac{1}{\sqrt{3}}(\epsilon_{ii'}^1\mathbf{e}_x + \epsilon_{jj'}^1\mathbf{e}_y + \epsilon_{kk'}^1\mathbf{e}_z),$$

где $\epsilon_{ii'}^1 = 2(i' - i) + 1$, $\epsilon_{jj'}^1 = 2(j' - j) + 1$, $\epsilon_{kk'}^1 = 2(k' - k) + 1$, причем $\epsilon_{ii'}^1, \epsilon_{jj'}^1, \epsilon_{kk'}^1 = \pm 1$.

Аналогично, если $\xi' = (i', j', k') \in S_l^2(\xi)$, то обозначим через $\mathbf{e}_{\xi\xi'}^2$ единичный вектор, указывающий направление от узла P_ξ^2 к узлу $P_{\xi'}^2$. Тогда справедливо равенство

$$\mathbf{e}_{\xi\xi'}^2 = \frac{1}{\sqrt{3}}(\epsilon_{ii'}^2\mathbf{e}_x + \epsilon_{jj'}^2\mathbf{e}_y + \epsilon_{kk'}^2\mathbf{e}_z),$$

где $\epsilon_{ii'}^2 = 2(i' - i) - 1$, $\epsilon_{jj'}^2 = 2(j' - j) - 1$, $\epsilon_{kk'}^2 = 2(k' - k) - 1$, так что $\epsilon_{ii'}^2, \epsilon_{jj'}^2, \epsilon_{kk'}^2 = \pm 1$.

В случае, когда $\xi' = (i', j', k') \in S_2^1(\xi)$ (или $\xi' = (i', j', k') \in S_2^2(\xi)$), единичный вектор, указывающий направление от узла P_ξ^1 к узлу $P_{\xi'}^1$ (или от узла P_ξ^2 к узлу $P_{\xi'}^2$), будет обозначаться просто $\mathbf{e}_{\xi\xi'}$. Полагая в этом случае $\epsilon_{ii'} = i' - i$, $\epsilon_{jj'} = j' - j$, $\epsilon_{kk'} = k' - k$, приходим к равенству

$$\mathbf{e}_{\xi\xi'} = \epsilon_{ii'}\mathbf{e}_x + \epsilon_{jj'}\mathbf{e}_y + \epsilon_{kk'}\mathbf{e}_z,$$

в правой части которого всегда два из трёх коэффициентов $\epsilon_{ii'}$, $\epsilon_{jj'}$, $\epsilon_{kk'}$ равны нулю, тогда как третий может принимать значения ± 1 .

Обозначим, наконец, через $\mathbf{u}_\xi^1(t)$ вектор смещения атома A_ξ^1 из положения равновесия в момент времени t ; аналогично определим вектор $\mathbf{u}_\xi^2(t)$.

Пусть A_ξ – атом первой или второй подрешётки, а $A_{\xi'}$ – атом, находящийся на первой или второй координационной сфере атома A_ξ . Обозначим, как и выше, опуская пока верхние индексы, через $\mathbf{e}_{\xi\xi'}$ единичный вектор, указывающий направление от узла P_ξ к узлу $P_{\xi'}$. Пусть $\mathbf{w}_{\xi\xi'} = \mathbf{u}_{\xi'} - \mathbf{u}_\xi$ – вектор относительного перемещения атомов A_ξ и $A_{\xi'}$, а $\mathbf{r}_{\xi\xi'} = \langle \mathbf{w}_{\xi\xi'}, \mathbf{e}_{\xi\xi'} \rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'}$ – его радиальная и $\mathbf{p}_{\xi\xi'} = \mathbf{w}_{\xi\xi'} - \mathbf{r}_{\xi\xi'}$ – тангенциальная составляющие. На атом A_ξ со стороны атома $A_{\xi'}$ действует сила $\mathbf{F}_{\xi\xi'}$, которую мы будем считать линейно зависящей от вектора $\mathbf{w}_{\xi\xi'}$ согласно формулам

$$\mathbf{F}_{\xi\xi'} = \sigma_{1r}\mathbf{r}_{\xi\xi'} + \sigma_{1t}\mathbf{p}_{\xi\xi'} = (\sigma_{1r} - \sigma_{1t}) \langle \mathbf{w}_{\xi\xi'}, \mathbf{e}_{\xi\xi'} \rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'} + \sigma_{1t}\mathbf{w}_{\xi\xi'},$$

если $\xi' \in S_1(\xi)$ и

$$\mathbf{F}_{\xi\xi'} = \sigma_{2r}\mathbf{r}_{\xi\xi'} + \sigma_{2t}\mathbf{p}_{\xi\xi'} = (\sigma_{2r} - \sigma_{2t}) \langle \mathbf{w}_{\xi\xi'}, \mathbf{e}_{\xi\xi'} \rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'} + \sigma_{2t}\mathbf{w}_{\xi\xi'},$$

если $\xi' \in S_2(\xi)$, где σ_{ir} , σ_{it} – некоторые константы, определяемые свойствами кристалла. Ограничиваясь действием сил указанного вида и обозначая через μ массу атома A_ξ , приходим к уравнению Ньютона

$$\begin{aligned} \mu\ddot{\mathbf{u}}_\xi = & \sum_{\xi' \in S_1(\xi)} [(\sigma_{1r} - \sigma_{1t}) \langle \mathbf{w}_{\xi\xi'}, \mathbf{e}_{\xi\xi'} \rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'} + \sigma_{1t}\mathbf{w}_{\xi\xi'}] + \\ & + \sum_{\xi' \in S_2(\xi)} [(\sigma_{2r} - \sigma_{2t}) \langle \mathbf{w}_{\xi\xi'}, \mathbf{e}_{\xi\xi'} \rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'} + \sigma_{2t}\mathbf{w}_{\xi\xi'}]. \end{aligned}$$

Преобразуем полученное уравнение, используя равенство $\mathbf{w}_{\xi\xi'} = \mathbf{u}_{\xi'} - \mathbf{u}_\xi$. Тогда уравнение принимает вид

$$\begin{aligned} \mu\ddot{\mathbf{u}}_\xi = & -\sigma_0\mathbf{u}_\xi + \sum_{\xi' \in S_1(\xi)} [(\sigma_{1r} - \sigma_{1t}) \langle \mathbf{u}_{\xi'}, \mathbf{e}_{\xi\xi'} \rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'} + \sigma_{1t}\mathbf{u}_{\xi'}] + \\ & + \sum_{\xi' \in S_2(\xi)} [(\sigma_{2r} - \sigma_{2t}) \langle \mathbf{u}_{\xi'}, \mathbf{e}_{\xi\xi'} \rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'} + \sigma_{2t}\mathbf{u}_{\xi'}], \end{aligned} \quad (1.1)$$

где

$$\sigma_0 = \frac{8}{3}(\sigma_{1r} + 2\sigma_{1t}) + 2(\sigma_{2r} + 2\sigma_{2t}). \quad (1.2)$$

Рассматриваемая кристаллическая решётка обладает свойством центральной симметрии относительно произвольного её узла. Это значит, что для каждого узла P_ξ и соседнего к нему узла $P_{\xi'}$ найдётся узел $P_{\bar{\xi}'}$, противоположно расположенный к $P_{\xi'}$ относительно узла P_ξ . При этом, если $\xi' \in S_l(\xi)$, то и $\bar{\xi}' \in S_l(\xi)$, а $\mathbf{e}_{\xi\bar{\xi}'} = -\mathbf{e}_{\xi\xi'}$.

Из сказанного следует, что в уравнении (1.1) суммирование по координационным сферам можно свести к суммированию по полусферам, взяв в качестве слагаемых суммы сил, действующих на атом A_ξ со стороны двух противоположно расположенных атомов соответствующей координационной сферы. Обозначим через $\bar{S}_l(\xi)$ множество мультииндексов, нумерующих атомы какой-нибудь полусферы l -той координационной сферы атома A_ξ . Тогда уравнение (1.1) может быть записано так:

$$\begin{aligned} \mu \ddot{\mathbf{u}}_{\xi} = & -\sigma_0 \mathbf{u}_{\xi} + \sum_{\xi' \in S_1(\xi)} [(\sigma_{1r} - \sigma_{1t}) \langle \mathbf{u}_{\xi'} + \mathbf{u}_{\bar{\xi}'}, \mathbf{e}_{\xi\xi'} \rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'} + \sigma_{1t}(\mathbf{u}_{\xi'} + \mathbf{u}_{\bar{\xi}'})] + \\ & + \sum_{\xi' \in S_2(\xi)} [(\sigma_{2r} - \sigma_{2t}) \langle \mathbf{u}_{\xi'} + \mathbf{u}_{\bar{\xi}'}, \mathbf{e}_{\xi\xi'} \rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'} + \sigma_{2t}(\mathbf{u}_{\xi'} + \mathbf{u}_{\bar{\xi}'})]. \end{aligned}$$

Разделяя атомы кристалла по подрешёткам, будем считать, что силовые коэффициенты $\sigma_{2r}^1, \sigma_{2r}^2$, а также $\sigma_{2t}^1, \sigma_{2t}^2$, определяющие взаимодействие между собой атомов каждой из подрешёток, различны для этих подрешёток. Тогда согласно формуле (1.2) получаем

$$\sigma_0^1 = \frac{8}{3}(\sigma_{1r} + 2\sigma_{1t}) + 2(\sigma_{2r}^1 + 2\sigma_{2t}^1); \quad \sigma_0^2 = \frac{8}{3}(\sigma_{1r} + 2\sigma_{1t}) + 2(\sigma_{2r}^2 + 2\sigma_{2t}^2).$$

С учётом сказанного система уравнений, описывающая колебания каждой из подрешёток, может быть записана в виде:

$$\begin{aligned} \mu_1 \ddot{\mathbf{u}}_{\xi}^1 = & -\sigma_0^1 \mathbf{u}_{\xi}^1 + \sum_{\xi' \in S_1^1(\xi)} [(\sigma_{1r} - \sigma_{1t}) \langle \mathbf{u}_{\xi'}^2 + \mathbf{u}_{\bar{\xi}'}^2, \mathbf{e}_{\xi\xi'}^1 \rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'}^1 + \sigma_{1t}(\mathbf{u}_{\xi'}^2 + \mathbf{u}_{\bar{\xi}'}^2)] + \\ & + \sum_{\xi' \in S_2^1(\xi)} [(\sigma_{2r}^1 - \sigma_{2t}^1) \langle \mathbf{u}_{\xi'}^1 + \mathbf{u}_{\bar{\xi}'}^1, \mathbf{e}_{\xi\xi'} \rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'} + \sigma_{2t}^1(\mathbf{u}_{\xi'}^1 + \mathbf{u}_{\bar{\xi}'}^1)], \end{aligned} \quad (1.3)$$

$$\begin{aligned} \mu_2 \ddot{\mathbf{u}}_{\xi}^2 = & -\sigma_0^2 \mathbf{u}_{\xi}^2 + \sum_{\xi' \in S_1^1(\xi)} [(\sigma_{1r} - \sigma_{1t}) \langle \mathbf{u}_{\xi'}^1 + \mathbf{u}_{\bar{\xi}'}^1, \mathbf{e}_{\xi\xi'}^2 \rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'}^2 + \sigma_{1t}(\mathbf{u}_{\xi'}^1 + \mathbf{u}_{\bar{\xi}'}^1)] + \\ & + \sum_{\xi' \in S_2^1(\xi)} [(\sigma_{2r}^2 - \sigma_{2t}^2) \langle \mathbf{u}_{\xi'}^2 + \mathbf{u}_{\bar{\xi}'}^2, \mathbf{e}_{\xi\xi'} \rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'} + \sigma_{2t}^2(\mathbf{u}_{\xi'}^2 + \mathbf{u}_{\bar{\xi}'}^2)]. \end{aligned} \quad (1.4)$$

Будем искать решение полученной системы уравнений в виде бегущих волн:

$$\mathbf{u}_{\xi}^1(t) = \mathbf{v}^1 \sin(\mathbf{K}\mathbf{r}_{\xi}^1 - \omega t) = \mathbf{v}^1 s_{\xi}^1(t), \quad \mathbf{u}_{\xi}^2(t) = \mathbf{v}^2 \sin(\mathbf{K}\mathbf{r}_{\xi}^2 - \omega t) = \mathbf{v}^2 s_{\xi}^2(t), \quad (1.5)$$

где ω – частота, $\mathbf{K} = K_x \mathbf{e}_x + K_y \mathbf{e}_y + K_z \mathbf{e}_z$ – волновой вектор, а $\mathbf{v}^1, \mathbf{v}^2$ – векторы поляризации. Согласно условию цикличности Борна-Кармана, при описании движения решётки волновой вектор может принимать только те значения, при которых на протяжении решётки в направлении каждой координатной оси укладывается целое число длин волн. Это значит, что должны выполняться равенства:

$$\mathbf{K}na\mathbf{e}_x = K_x na = 2\pi h, \quad \mathbf{K}na\mathbf{e}_y = K_y na = 2\pi l, \quad \mathbf{K}na\mathbf{e}_z = K_z na = 2\pi m,$$

где h, l, m – целые числа. Отсюда следует, что волновой вектор должен иметь вид

$$\mathbf{K} = \frac{2\pi}{na} (h\mathbf{e}_x + l\mathbf{e}_y + m\mathbf{e}_z).$$

Пусть $\xi = (i, j, k) \in \Lambda$, а $\xi' = (i', j', k') \in S_1^1(\xi)$. Положим $\Delta\mathbf{r}_{\xi\xi'}^1 = \mathbf{r}_{\xi'}^2 - \mathbf{r}_{\xi}^1$. Тогда

$$\mathbf{r}_{\xi'}^2 = \mathbf{r}_{\xi}^1 + \Delta\mathbf{r}_{\xi\xi'}^1, \quad \mathbf{r}_{\bar{\xi}'}^2 = \mathbf{r}_{\xi}^1 - \Delta\mathbf{r}_{\xi\xi'}^1, \quad \Delta\mathbf{r}_{\xi\xi'}^1 = \frac{a}{2}(\epsilon_{ii'}^1 \mathbf{e}_x + \epsilon_{jj'}^1 \mathbf{e}_y + \epsilon_{kk'}^1 \mathbf{e}_z). \quad (1.6)$$

Вычисляя сумму $\mathbf{u}_{\xi'}^2(t) + \mathbf{u}_{\bar{\xi}'}^2(t)$ и учитывая (1.5), (1.6), получаем

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{\xi'}^2(t) + \mathbf{u}_{\bar{\xi}'}^2(t) = & \mathbf{v}^2 \{ \sin[\mathbf{K}(\mathbf{r}_{\xi}^1 + \Delta\mathbf{r}_{\xi\xi'}^1) - \omega t] + \sin[\mathbf{K}(\mathbf{r}_{\xi}^1 - \Delta\mathbf{r}_{\xi\xi'}^1) - \omega t] \} = \\ = & 2s_{\xi}^1(t) \cos(\mathbf{F}\Delta\mathbf{r}_{\xi\xi'}^1) \mathbf{v}^2. \end{aligned}$$

Аналогично, определяя вектор смещения $\Delta \mathbf{r}_{\xi\xi'}^2 = \mathbf{r}_{\xi'}^1 - \mathbf{r}_{\xi}^2$, приходим к равенству

$$\mathbf{u}_{\xi'}^1(t) + \mathbf{u}_{\xi}^1(t) = 2s_{\xi}^2(t) \cos(\mathbf{K}\Delta \mathbf{r}_{\xi\xi'}^2) \mathbf{v}^1.$$

Если $\xi' \in S_2^1(\xi)$ или $\xi' \in S_2^2(\xi)$, то $\mathbf{r}_{\xi'}^1 - \mathbf{r}_{\xi}^1 = \mathbf{r}_{\xi'}^2 - \mathbf{r}_{\xi}^2$. Полагая $\Delta \mathbf{r}_{\xi\xi'} = \mathbf{r}_{\xi'}^1 - \mathbf{r}_{\xi}^1$, получаем

$$\mathbf{u}_{\xi'}^1(t) + \mathbf{u}_{\xi}^1(t) = 2s_{\xi}^1(t) \cos(\mathbf{K}\Delta \mathbf{r}_{\xi\xi'}) \mathbf{v}^1, \quad \mathbf{u}_{\xi'}^2(t) + \mathbf{u}_{\xi}^2(t) = 2s_{\xi}^2(t) \cos(\mathbf{K}\Delta \mathbf{r}_{\xi\xi'}) \mathbf{v}^2.$$

Введем сокращенные обозначения, полагая для заданного вектора \mathbf{K}

$$c_{\xi\xi'}^1 = \cos(\mathbf{K}\Delta \mathbf{r}_{\xi\xi'}^1), \quad c_{\xi\xi'}^2 = \cos(\mathbf{K}\Delta \mathbf{r}_{\xi\xi'}^2), \quad c_{\xi\xi'} = \cos(\mathbf{K}\Delta \mathbf{r}_{\xi\xi'}).$$

Подставляя бегущие волны (1.5) в полученную выше систему, учитывая приведенные выше равенства и сокращая обе её части на общие множители $s_{\xi}^1(t)$ и $s_{\xi}^2(t)$ соответственно, приходим к системе уравнений относительно частоты ω и векторов $\mathbf{v}^1, \mathbf{v}^2$:

$$\begin{aligned} -\mu_1 \omega^2 \mathbf{v}^1 &= -\sigma_0^1 \mathbf{v}^1 + 2 \sum_{\xi' \in \bar{S}_1^1(\xi)} c_{\xi\xi'}^1 [(\sigma_{1r} - \sigma_{1t}) < \mathbf{v}^2, \mathbf{e}_{\xi\xi'}^1 > \mathbf{e}_{\xi\xi'}^1 + \sigma_{1t} \mathbf{v}^2] + \\ &+ 2 \sum_{\xi' \in \bar{S}_2^1(\xi)} c_{\xi\xi'} [(\sigma_{2r}^1 - \sigma_{2t}^1) < \mathbf{v}^1, \mathbf{e}_{\xi\xi'} > \mathbf{e}_{\xi\xi'} + \sigma_{2t}^1 \mathbf{v}^1], \end{aligned} \quad (1.7)$$

$$\begin{aligned} -\mu_2 \omega^2 \mathbf{v}^2 &= -\sigma_0^2 \mathbf{v}^2 + 2 \sum_{\xi' \in \bar{S}_1^1(\xi)} c_{\xi\xi'}^2 [(\sigma_{1r} - \sigma_{1t}) < \mathbf{v}^1, \mathbf{e}_{\xi\xi'}^2 > \mathbf{e}_{\xi\xi'}^2 + \sigma_{1t} \mathbf{v}^1] + \\ &+ 2 \sum_{\xi' \in \bar{S}_2^1(\xi)} c_{\xi\xi'} [(\sigma_{2r}^2 - \sigma_{2t}^2) < \mathbf{v}^2, \mathbf{e}_{\xi\xi'} > \mathbf{e}_{\xi\xi'} + \sigma_{2t}^2 \mathbf{v}^2]. \end{aligned} \quad (1.8)$$

Обозначим через x_1, y_1, z_1 и x_2, y_2, z_2 координаты векторов \mathbf{v}^i . Вводя сокращённые обозначения

$$\sigma_1 = \frac{\sigma_{1r} + 2\sigma_{1t}}{3}, \quad \sigma_2 = \frac{\sigma_{1r} - \sigma_{1t}}{3}, \quad c_h = \cos \frac{\pi h}{n}, \quad s_h = \sin \frac{\pi h}{n} \quad (1.9)$$

и вычисляя суммы

$$\sum_{\xi' \in \bar{S}_1^1(\xi)} c_{\xi\xi'}^1 = 4c_h c_l c_m, \quad \sum_{\xi' \in \bar{S}_1^1(\xi)} c_{\xi\xi'}^1 \epsilon_{ii'}^1 \epsilon_{jj'}^1 = -4s_h s_l c_m, \quad \sum_{\xi' \in \bar{S}_1^1(\xi)} c_{\xi\xi'}^1 \epsilon_{ii'}^1 \epsilon_{kk'}^1 = -4s_h c_l s_m,$$

приходим к системе

$$\begin{aligned} (a_x^1 - \mu_1 \omega^2) x_1 + b x_2 + b_z y_2 + b_y z_2 &= 0, & (a_y^1 - \mu_1 \omega^2) y_1 + b_z x_2 + b y_2 + b_x z_2 &= 0, \\ (a_z^1 - \mu_1 \omega^2) z_1 + b_y x_2 + b_x y_2 + b z_2 &= 0, \end{aligned} \quad (1.10)$$

$$b x_1 + b_z y_1 + b_y z_1 + (a_x^2 - \mu_2 \omega^2) x_2 = 0, \quad b_z x_1 + b y_1 + b_x z_1 + (a_y^2 - \mu_2 \omega^2) y_2 = 0,$$

$$b_y x_1 + b_x y_1 + b z_1 + (a_z^2 - \mu_2 \omega^2) z_2 = 0,$$

$$a_x^1 = 8\sigma_1 + 4\sigma_{2r}^1 s_h^2 + 4\sigma_{2t}^1 (s_l^2 + s_m^2), \quad a_x^2 = 8\sigma_1 + 4\sigma_{2r}^2 s_h^2 + 4\sigma_{2t}^2 (s_l^2 + s_m^2), \quad (1.11)$$

$$b = -8\sigma_1 c_h c_l c_m, \quad b_x = 8\sigma_2 c_h s_l s_m. \quad (1.12)$$

Остальные коэффициенты получаются перестановкой индексов.

2. Дисперсионные соотношения и принцип длинных волн. Будем искать решение системы (1.10) в случае, когда направление волнового вектора совпадает с одним из основных кристаллографических направлений. К таким направлениям относятся: направление [100],

$$\mathbf{K} = \frac{2\pi h}{na} \mathbf{e}_x = K_x \mathbf{e}_x, \quad \frac{\pi h}{n} = \frac{Ka}{2} = \frac{K_x a}{2}; \quad (2.1)$$

направление [110],

$$\mathbf{K} = \frac{2\pi h}{na} (\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y) = K_x (\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y), \quad \frac{\pi h}{n} = \frac{Ka}{2\sqrt{2}} = \frac{K_x a}{2}; \quad (2.2)$$

направление [111],

$$\mathbf{K} = \frac{2\pi h}{na} (\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z) = K_x (\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z), \quad \frac{\pi h}{n} = \frac{Ka}{2\sqrt{3}} = \frac{K_x a}{2}. \quad (2.3)$$

Рассмотрим направление [100]. Обращаясь к формулам (1.11), (1.12) и учитывая (2.1), приходим к равенствам

$$a_x^1 = 8\sigma_1 + 4\sigma_{2r}^1 s_h^2 = \sigma_1 + 4\sigma_{2r}^1 \sin^2 \frac{Ka}{2}, \quad a_x^2 = 8\sigma_1 + 4\sigma_{2r}^2 s_h^2, \quad a_y^1 = a_z^1 = 8\sigma_1 + 4\sigma_{2t}^1 s_h^2,$$

$$a_y^2 = a_z^2 = 8\sigma_1 + 4\sigma_{2t}^2 s_h^2, \quad b = -8\sigma_1 c_h = -8\sigma_1 \cos \frac{Ka}{2}, \quad b_x = b_y = b_z = 0.$$

Из этих равенств следует, что система (1.10) распадается на три независимые подсистемы, одна из которых описывает продольные колебания, поляризованные вдоль оси Ox , а две другие, совпадающие между собой, – поперечные колебания, поляризованные вдоль других осей. Решая соответствующие характеристические уравнения, приходим к дисперсионным соотношениям

$$\omega^2 = \frac{a_x^2 \mu_1 + a_x^1 \mu_2 \pm \sqrt{(a_x^2 \mu_1 - a_x^1 \mu_2)^2 + 4\mu_1 \mu_2 b^2}}{2\mu_1 \mu_2}, \quad (2.4)$$

$$\omega^2 = \frac{a_y^2 \mu_1 + a_y^1 \mu_2 \pm \sqrt{(a_y^2 \mu_1 - a_y^1 \mu_2)^2 + 4\mu_1 \mu_2 b^2}}{2\mu_1 \mu_2}, \quad (2.5)$$

Рассмотрим теперь направление [110]. Положим $\sigma_{rt}^1 = \sigma_{2r}^1 + \sigma_{2t}^1$, $\sigma_{rt}^2 = \sigma_{2r}^2 + \sigma_{2t}^2$. Тогда справедливы равенства

$$a_x^1 = a_y^1 = 8\sigma_1 + 4\sigma_{rt}^1 s_h^2 = 8\sigma_1 + 4\sigma_{rt}^1 \sin^2 \frac{Ka}{2}, \quad a_x^2 = a_y^2 = 8\sigma_1 + 4\sigma_{rt}^2 s_h^2,$$

$$a_z^1 = 8\sigma_1 + 8\sigma_{2t}^1 s_h^2, \quad a_z^2 = 8\sigma_1 + 8\sigma_{2t}^2 s_h^2, \quad b = -8\sigma_1 c_h^2 = -8\sigma_1 \cos^2 \frac{Ka}{2},$$

$$b_x = b_y = 0, \quad b_z = 8\sigma_2 s_h^2.$$

Как нетрудно видеть, в этом случае система (1.10) распадается на две подсистемы, из которых одна описывает продольные и поперечные, поляризованные в плоскости Oxy , колебания, а другая – поперечные колебания, поляризованные вдоль оси Oz .

В случае поперечных волн, поляризованных вдоль оси Oz , получим

$$\omega^2 = \frac{a_z^2 \mu_1 + a_z^1 \mu_2 \pm \sqrt{(a_z^2 \mu_1 - a_z^1 \mu_2)^2 + 4\mu_1 \mu_2 b^2}}{2\mu_1 \mu_2}. \quad (2.6)$$

В случае продольных колебаний дисперсионное соотношение даётся равенством

$$\omega^2 = \frac{a_x^2 \mu_1 + a_x^1 \mu_2 \pm \sqrt{(a_x^2 \mu_1 - a_x^1 \mu_2)^2 + 4\mu_1 \mu_2 (b + b_z)^2}}{2\mu_1 \mu_2}. \quad (2.7)$$

В случае же поперечных колебаний, поляризованных в плоскости Oxy , дисперсионное соотношение имеет вид

$$\omega^2 = \frac{a_x^2 \mu_1 + a_x^1 \mu_2 \pm \sqrt{(a_x^2 \mu_1 - a_x^1 \mu_2)^2 + 4\mu_1 \mu_2 (b - b_z)^2}}{2\mu_1 \mu_2}. \quad (2.8)$$

Пусть теперь волновой вектор имеет направление $[111]$. Положим $\sigma_{r2t}^1 = \sigma_{2r}^1 + 2\sigma_{2t}^1$, $\sigma_{r2t}^2 = \sigma_{2r}^2 + 2\sigma_{2t}^2$. Тогда справедливы равенства

$$a_x^1 = a_y^1 = a_z^1 = 8\sigma_1 + 4\sigma_{r2t}^1 s_h^2 = 8\sigma_1 + 4\sigma_{r2t}^1 \sin^2 \frac{Ka}{2\sqrt{3}}, \quad a_x^2 = a_y^2 = a_z^2 = 8\sigma_1 + 4\sigma_{r2t}^2 s_h^2,$$

$$b = -8\sigma_1 c_h^3 = -8\sigma_1 \cos^3 \frac{Ka}{2\sqrt{3}}, \quad b_x = b_y = b_z = 8\sigma_2 c_h s_h^2.$$

Если колебательная мода имеет продольную поляризацию, то для неё закон дисперсии выражается соотношением

$$\omega^2 = \frac{a_x^2 \mu_1 + a_x^1 \mu_2 \pm \sqrt{(a_x^2 \mu_1 - a_x^1 \mu_2)^2 + 4\mu_1 \mu_2 (b + 2b_x)^2}}{2\mu_1 \mu_2}. \quad (2.9)$$

В случае же поперечной поляризации справедливо равенство

$$\omega^2 = \frac{a_x^2 \mu_1 + a_x^1 \mu_2 \pm \sqrt{(a_x^2 \mu_1 - a_x^1 \mu_2)^2 + 4\mu_1 \mu_2 (b - b_x)^2}}{2\mu_1 \mu_2}. \quad (2.10)$$

Рассматривая полученные дисперсионные соотношения, нетрудно обнаружить, что все они приводятся к виду

$$\omega^2 = \frac{A_1 \mu_1 + A_2 \mu_2}{2\mu_1 \mu_2} \left[1 \pm \sqrt{1 - \frac{4\mu_1 \mu_2 (A_1 A_2 - B^2)}{(A_1 \mu_1 + A_2 \mu_2)^2}} \right],$$

где A_1, A_2, B – некоторые числа, определяемые коэффициентами системы (1.10). При этом знак (+) берется для оптических, а знак (–) – для акустических колебательных мод.

В континуальном приближении, когда выполняется условие $Ka \ll 1$, справедливо соотношение $A_1 A_2 - B^2 \ll 1$. Поэтому можно считать, что для акустических мод справедливо соотношение

$$\omega^2 = \frac{A_1 A_2 - B^2}{A_2 \mu_1 + A_1 \mu_2}. \quad (2.11)$$

Сравнивая соотношение (2.11) с дисперсионными соотношениями из теории упругости для основных кристаллографических направлений, приходим к равенствам

$$2\sigma_1 = aC_{44} - (\sigma_{2t}^1 + \sigma_{2t}^2), \quad 4\sigma_2 = a(C_{12} + C_{44}),$$

$$\sigma_{2r}^1 + \sigma_{2r}^2 = a(C_{11} - C_{44}) + \sigma_{2t}^1 + \sigma_{2t}^2. \quad (2.12)$$

В настоящей работе были проделаны расчёты дисперсионных кривых по приведённым выше формулам в сравнении с экспериментальными данными, полученными методом неупругого рассеяния нейтронов и представленными в работах [7; 8; 10] для кристаллов твердых растворов NiAl, CuZn и FeAl. Используя подобранные значения силовых констант, по формулам (2.12) были рассчитаны значения упругих констант рассматриваемых соединений. Следует отметить, что имеющиеся данные о значениях упругих констант для рассматриваемых веществ существенно отличаются друг от друга у разных авторов. Так, например, в работе [11] приводятся данные разных авторов по упругим константам для соединения FeAl, где разброс значений достигает 10 & – 30 %.

Ниже, в табл. 1 приведены используемые и полученные (для упругих констант) в настоящей работе данные. В табл. 2 приводятся аналогичные данные, взятые из работ [6; 9; 11]. На рис. 1, 2, 3 изображены дисперсионные кривые для указанных соединений в сравнении с экспериментальными данными, полученными методом неупругого рассеяния нейтронов и представленными в работах [7, 8, 10]. Во всех случаях q обозначает K_x и изменяется в пределах $0 \leq q \leq \pi/a$.

Таблица 1

	a, нм	C11, ГПа	C12, ГПа	C44, ГПа	m1, а.е.м.	m2, а.е.м.
NiAl	0,288	181	108	87	58,693	26,982
CuZn	0,294	108	88	64,5	63,546	65,39
FeAl	0,291	148	90	123,5	55,845	26,982

Таблица 2

	a, нм	C11, ГПа	C12, ГПа	C44, ГПа	m1, а.е.м.	m2, а.е.м.
NiAl	0,288	190,36	129,64	108	58,693	26,982
CuZn	0,294	133,6	103,8	74	63,546	65,39
FeAl	0,291	181	113	127	55,845	26,982

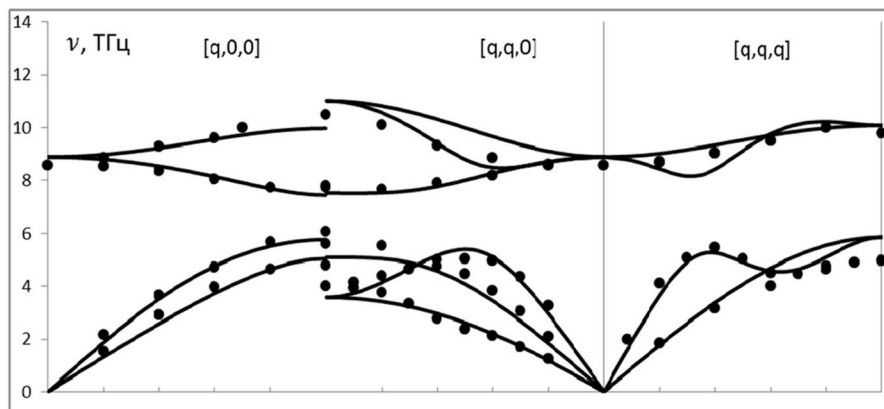


Рис. 1. Расчетные кривые дисперсии фононов в NiAl при 296°K. Кружками отмечены экспериментальные точки, взятые из [7]

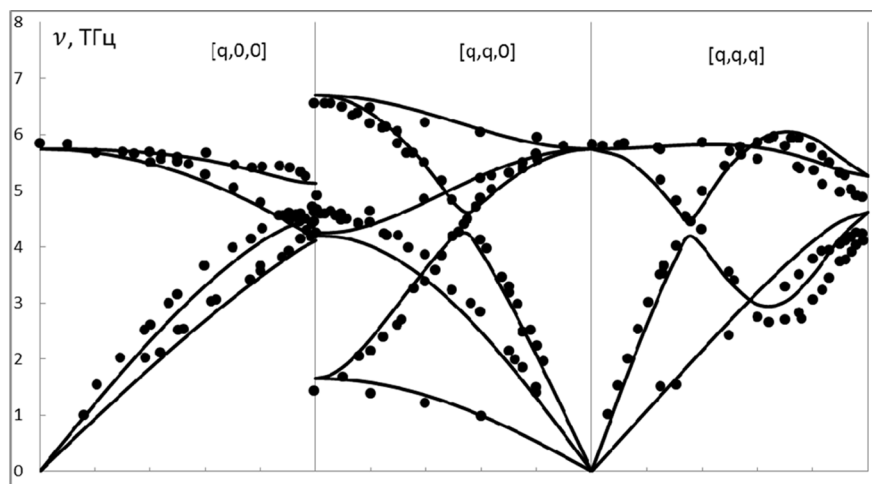


Рис. 2. Расчетные кривые дисперсии фононов в CuZn при 296°K.
Кружками отмечены экспериментальные точки, взятые из [8]

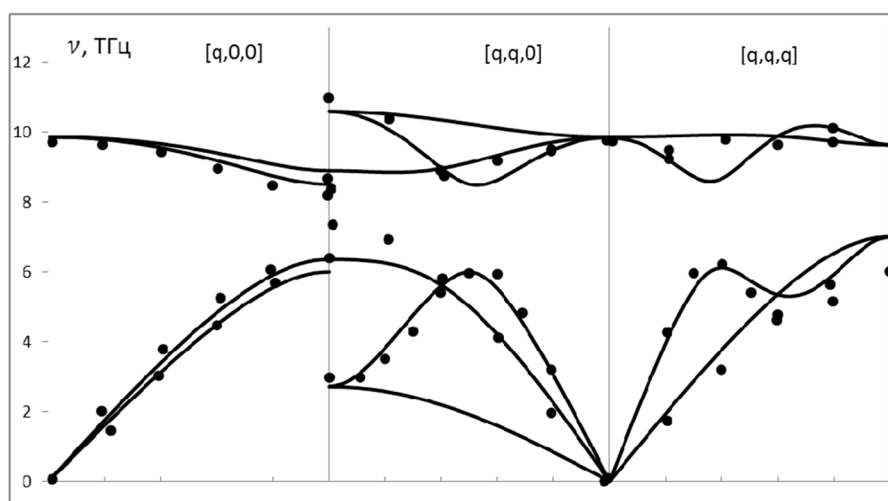


Рис. 3. Расчетные кривые дисперсии фононов в FeAl при 296°K.
Кружками отмечены экспериментальные точки, взятые из [10]

Список литературы

1. Холодовский В. Е., Мачихина И. О., Кульченков Е. А. Принцип длинных волн и дисперсионные соотношения для кубических кристаллических решёток в модели диполь-дипольных взаимодействий // Известия СамНЦ РАН. Сер. «Физика и электроника». 2009. Том 11. № 5(31). С. 49–55.
2. Холодовский В. Е., Мачихина И. О., Кульченков Е. А. Дисперсионные соотношения для кубических кристаллических решёток в модели диполь-дипольных взаимодействий // Вестник ЮУрГУ. Сер. «Математика, физика, химия». 2009. Вып. 12. № 10(143). С. 92–99.
3. Холодовский В. Е., Мачихина И. О. Принцип длинных волн и фононные спектры кубических кристаллических решёток // Вестник ЮУрГУ. Сер. «Математика. Механика. Физика». 2009. Вып.1. № 22. С. 109–116.
4. Холодовский В. Е., Мачихина И. О., Кульченков Е. А. Расчёт теплоёмкости и среднеквадратичных смещений по фононным спектрам для кристаллов с ОЦК и ГЦК решёткой // Вестник ЮУрГУ. Сер. «Математика. Механика. Физика». 2010. Вып. 2. № 9. С. 101–109.

5. Мачихина И. О. Холодовский В. Е. Расчёт теплофизических свойств кристаллов инертных газов по упругим константам // Известия СамНЦ РАН. Т. 14. № 4. 2012. С. 116–120.
6. Rusovic N., Warlimont H. The Elastic Behaviour of β_2 -NiAl Allaus // Phys. Stat. Sol. 1977. vol. 44. iss. 2. P. 609–619.
7. Mostolle M., Nicklow R. M., Zehner D. M., Lui S.-C., Mundenar J. M., Plummer. E. W. Bulk and surface vibrational modes in NiAl // Phys. Rev. B, 1989, volume 40, issue 5, pp. 2856–2872.
8. Gilat G., Dolling G.. Normal Vibrations of β Brass // Phys. Rev., 1965, volume 138, issue 4A. P. A1053–A1065.
9. McManus G.M. Elastic Properties of β -CuZn // Phys. Rev. 1963. vol. 129, iss. 5. P. 2004–2007.
10. Meyer B., Schott V., Fahnle M.. Phonon spectrum of B2-FeAl: Ab initio calculation and comparison with data from inelastic neutron scattering // Phys. Rev. B 1998, volume 58, issue 22. P. 674–676.
11. Yifang Ouyang, Xiaofeng Tong, ChangLi, HongmeiChen, XiaomaTao, Tilmann Hickel, YongDuc. Thermodynamic and physical properties of FeAl and Fe3Al: an atomistic study by EAM simulation // Physica B 407 (2012) pp, 4530–4536.

References

1. Kholodovsky V. Ye., Machikhin I. O., Kulchenkov Ye. A. Printsip dlinnykh voln i dispersionnye sootnosheniya dlya kubicheskikh kristallicheskikh reshyotok v modeli dipol-dipolnykh vzaimodeystvy // Izvestiya SamNTs RAN. Ser. «Fizika i elektronika». 2009. T. 11. № 5(31). S. 49–55.
2. Kholodovsky V. Ye., Machikhina I. O., Kulchenkova Ye. A. Dispersionnye sootnosheniya dlya kubicheskikh kristallicheskikh reshyotok v modeli dipol-dipolnykh vzaimodeystvy // Vestnik YuUrGU. Ser. «Matemtaika, fizika, khimiya». 2009. Vyp. 12. № 10(143). S. 92–99.
3. Kholodovsky V. Ye., Machikhina I. O. Printsip dlinnykh voln i fononnye spektry kubicheskikh kristallicheskikh reshyotok // Vestnik YuUrGU. Ser. «Matematika. Mekhanika. Fizika». 2009. Vyp. № 22. S. 109–116.
4. Kholodovsky V. Ye., Machikhina I. O. Kulchenkov Ye. A. Raschyot teployomkosti i srednekvadraticnykh smeshcheny po fonovym spektram dlya kristallov s OTsK i GTsK reshyotkoy // Vestnik YuUrGU. Ser. «Matemtaika. Mekhanika. Fizika». 2010. Vyp. 2. № 9. S. 101–109.
5. Machikhina I. O., Kholodovsky V. Ye. Raschyot teplofizicheskikh svoystv kristallov inertnykh gazov po uprugim konstantam // Izvestiya SamNTs RAN. T. 14. № 4. 2012. S. 116–120.
6. Rusovic N., Warlimont H. The Elastic Behaviour of β_2 -NiAl Allaus // Phys. Stat. Sol. 1977. vol. 44. iss. 2. P. 609–619.
7. Mostolle M., Nicklow R. M., Zehner D. M., Lui S.-C., Mundenar J. M., Plummer. E. W. Bulk and surface vibrational modes in NiAl // Phys. Rev. B, 1989, volume 40, issue 5, pp. 2856–2872.
8. Gilat G., Dolling G.. Normal Vibrations of β Brass // Phys. Rev., 1965, volume 138, issue 4A. P. A1053–A1065.
9. McManus G.M. Elastic Properties of β -CuZn // Phys. Rev. 1963. vol. 129, iss. 5. P. 2004–2007.
10. Meyer B., Schott V., Fahnle M.. Phonon spectrum of B2-FeAl: Ab initio calculation and comparison with data from inelastic neutron scattering // Phys. Rev. B 1998, volume 58, issue 22, pp.674–676.

11. Yifang Ouyang, Xiaofeng Tong, ChangLi, HongmeiChen, XiaomaTao, Tilmann Hickel, YongDuc. Thermodynamic and physical properties of FeAl and Fe₃Al: an atomistic study by EAM simulation // Physica B 407 (2012) P. 4530–4536.

Статья поступила в редакцию 10.04.2013