

УДК 534.1
ББК 22.213

Владимир Евгеньевич Холодовский,
кандидат физико-математических наук, доцент,
Брянский государственный университет
241036, Россия, г. Брянск, ул. Бежицкая, 14,
e-mail: v-e-holodovsky@yandex.ru

Елена Юрьевна Краюшкина,
старший преподаватель,
Брянский государственный технический университет,
241035, Россия, г. Брянск, бул. 50-летия Октября, 7,
e-mail: senichenkova@mail.ru

Параметры внутриатомных диполей кристаллов твёрдых растворов со структурой CsCl

В разработанной модели Ван-дер-Ваальсовских взаимодействий произведены расчёты, позволившие получить спектральное разложение колебаний внутриатомных диполей для соединений NiAl, FeAl и CuZn, рассчитать их усредненные характеристики и получить графическое изображение спектральной плотности распределения квадрата внутриатомного диполя для каждого сорта атомов, образующих кристалл.

Ключевые слова: кристаллическая решётка, динамическая модель, межатомное взаимодействие, диполь, фононный спектр, спектральная плотность квадрата плеча внутриатомного диполя.

Vladimir Yevgenyevich Kholodovskii,
Candidate of Physical and Mathematical Science, Associate Professor,
Bryansk State University,
14, Bezhitskaya St., Bryansk, Russia, 241036,
e-mail: v-e-holodovsky@yandex.ru

Elena Yur'evna Krayushkina,
Senior Teacher,
Bryansk State Technical University,
7, Pyatedisyeteletie Octyabrya St., Bryansk, Russia, 241035
e-mail: senichenkova@mail.ru

Parameters of Intra Dipoles Solid Solutions with CsCl Structure

Van der Waals models are considered. Oscillation spectral decomposition of intra dipoles for compounds NiAl, FeAl and CuZn was obtained. The calculations of spectral averaged parameters were made. The graphs of the spectral density of the intra-square dipole for each class of atoms forming a crystal are built.

Keywords: crystal lattice, dynamical model, inter-atomic interaction, dipole, phonon spectrum, spectral density of the square shoulder intra-dipole.

Введение. В работах [1; 2] построена динамическая модель, описывающая колебания решёток твёрдых растворов металлов со структурой CsCl. Для соединений NiAl, FeAl и

CuZn сделаны расчёты дисперсионных кривых, фононных спектров, теплоёмкостей и среднеквадратичных смещений атомов как для каждой из подрешёток, так и для всего кристалла. Полученные результаты определяются параметрами движения остовов атомов кристаллов. Согласно конструкции, остов атома является одним из полюсов внутриатомных диполей, вторым полюсом является центр заряда внешней электронной оболочки (ВЭО) атома кристалла. Учитывая колебания центров зарядов ВЭО атомов, можно получить тепловые динамические характеристики как электронного газа, так и внутриатомных диполей атомов.

В настоящей работе получены и решены уравнения, позволяющие сделать расчёты спектральных и динамических характеристик внутриатомных диполей кристалла NiAl при комнатной температуре. Для монокристаллов Na и Al подобные расчёты были проделаны в работах [3; 4].

Основные положения динамической модели. Рассмотрим бинарную кубическую кристаллическую решётку типа CsCl. Такая решётка может быть получена путем наложения двух простых кубических подрешёток, где 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 D_{hkl} решётки мог быть задан по формуле: $\mathbf{r}_{hkl} = (h\mathbf{e}_x + k\mathbf{e}_y + l\mathbf{e}_z)a/2$, где $h, k, l = 1, \dots, 2n$.

Пусть Λ – множество всех числовых наборов $\xi = (h, k, l)$, для которых приведенная выше формула определяет положение каждого узла решётки. Тогда все числа h, k, l либо нечётные, а набор $\xi = (h, k, l)$ определяет узел $D_\xi = D_{hkl}$ первой подрешётки, либо все числа h, k, l чётные и тогда набор определяет узел второй подрешётки. Обозначим через Λ_i множество всех наборов $\xi = (h, k, l) \in \Lambda$, определяющих узел i -й подрешётки.

Будем считать, что в процессе колебаний атомов решётки в каждом из них наводится внутриатомный диполь, одним из полюсов которого является остов атома, а другим – центр заряда его внешней электронной оболочки. Обозначим через \mathbf{p}_ξ плечо дипольного момента атома A_ξ , наведенного в результате его относительного перемещения с соседними атомами из первой и второй координационных сфер. Считая, что атом A_ξ принадлежит i -й подрешётке, так что $\xi \in \Lambda_i, i = 1, 2$, обозначим через α_i его поляризуемость, а через q_i – эффективный заряд его диполя.

На внутриатомный диполь атома A_ξ действует кулоновская сила \mathbf{Q}_ξ со стороны диполей остальных атомов решётки, в результате чего центр заряда ВЭО атома и следовательно плечо его дипольного момента получает некоторое приращение $\Delta\mathbf{p}_\xi$ и становится равным:

$$\mathbf{P}_\xi = \mathbf{p}_\xi + \Delta\mathbf{p}_\xi. \quad (1)$$

Наведённый дополнительный дипольный момент создаёт частичное экранирование силы \mathbf{Q}_ξ , с учётом чего внешняя сила, действующая на остов атома, становится равной:

$$\mathbf{F}_\xi = \mathbf{Q}_\xi - \frac{\beta_i}{\alpha_i} \Delta\mathbf{p}_\xi. \quad (2)$$

На остов атома A_ξ также действует сила \mathbf{R}_ξ реакции на излучение его внутриатомного диполя. В первом приближении эта сила пропорциональна плечу диполя и равна [5]:

$$\mathbf{R}_\xi = -\frac{2\beta_i}{3\rho_i^3} \mathbf{P}_\xi, \quad (3)$$

где ρ_i – радиус сферы, через которую плотность потока энергии излучения внутриатомного диполя считается равной работе силы реакции за единицу времени.

Пусть $\mathbf{u}_\xi(t)$ – вектор смещения остова атома A_ξ из положения равновесия в момент времени t . В состоянии термодинамического равновесия справедливо равенство

$$\mathbf{F}_\xi + \mathbf{R}_\xi = 0, \quad (4)$$

при этом уравнение движения остова атома A_ξ принимает вид

$$\mu_i \ddot{\mathbf{u}}_\xi = -\frac{\beta_i}{\alpha_i} \mathbf{P}_\xi, \quad i = 1, 2. \quad (5)$$

Пусть A_ξ – атом первой или второй подрешётки, а $A_{\xi'}$ – атом, находящийся на первой или второй координационной сфере атома A_ξ . Обозначим через $\mathbf{e}_{\xi\xi'}$ единичный вектор, указывающий направление от узла D_ξ к узлу $D_{\xi'}$, через $D_{\bar{\xi}}$ узел решётки, противоположно расположенный к $D_{\xi'}$ относительно узла D_ξ , а через $\bar{S}_j(\xi)$ множество мультииндексов, нумерующих атомы какой-нибудь полусферы j -й координационной сферы $S_j(\xi)$ атома A_ξ . Уравнение динамики решётки представляется в виде

$$\begin{aligned} \mu \ddot{\mathbf{u}}_\xi = & -\sigma_{0,i} \mathbf{u}_\xi + \sum_{\xi' \in \bar{S}_1(\xi)} \left[(\sigma_{1r} - \sigma_{1t}) \langle \mathbf{u}_{\xi'} + \mathbf{u}_{\bar{\xi}}, \mathbf{e}_{\xi\xi'} \rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'} + \sigma_{1t} (\mathbf{u}_{\xi'} + \mathbf{u}_{\bar{\xi}}) \right] + \\ & + \sum_{\xi' \in \bar{S}_2(\xi)} \left[(\sigma_{2r,i} - \sigma_{2t,i}) \langle \mathbf{u}_{\xi'} + \mathbf{u}_{\bar{\xi}}, \mathbf{e}_{\xi\xi'} \rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'} + \sigma_{2t,i} (\mathbf{u}_{\xi'} + \mathbf{u}_{\bar{\xi}}) \right], \end{aligned} \quad (6)$$

где $\xi \in \Lambda_i$, $i = 1, 2$; σ_{1r} , σ_{1t} , $\sigma_{2r,i}$, $\sigma_{2t,i}$ – коэффициенты для радиальных и тангенциальных составляющих сил взаимодействия между атомами решётки, а $\sigma_{0,i} = 8/3(\sigma_{1r} + 2\sigma_{1t}) + 2(\sigma_{2r,i} + 2\sigma_{2t,i})$.

В работах [1; 2] решение уравнения (6) было получено в виде бегущих волн

$$\mathbf{u}_{\xi,K,m}(t) = A_{K,m} \gamma_{K,m,i} \sin(\mathbf{K}\mathbf{r}_\xi - \omega_{K,m}t + \alpha_{K,m}) \mathbf{g}_{K,m,i}, \quad \xi \in \Lambda_i, \quad i = 1, 2. \quad (7)$$

Бегущая волна (7) представляет собой отдельную колебательную моду и определяется волновым вектором $\mathbf{K} = K_x \mathbf{e}_x + K_y \mathbf{e}_y + K_z \mathbf{e}_z$, принимающим значения из первой зоны Бриллюэна. Согласно условию цикличности Борна-Кармана справедливо равенство:

$$\mathbf{K} = \frac{2\pi}{na} (k_x \mathbf{e}_x + k_y \mathbf{e}_y + k_z \mathbf{e}_z),$$

где k_x , k_y , k_z – целые числа. Каждому значению волнового вектора отвечает шесть колебательных мод $m = 1, \dots, 6$, имеющих частоты $\omega_{K,m}$, амплитуды $A_{K,m} \gamma_{K,m,i}$ и направления поляризации $\mathbf{g}_{K,m,i}$ для каждой из подрешёток. При этом справедливы равенства:

$\omega_{K,m} = \omega_{-K,m}$, $\gamma_{K,m,i} = \gamma_{-K,m,i}$, $\mathbf{g}_{K,m,i} = \mathbf{g}_{-K,m}^i$. Для амплитудных множителей $\gamma_{K,m,i}$ также справедливо равенство $(\gamma_{K,m,1})^2 + (\gamma_{K,m,2})^2 = 1$.

Спектральное разложение колебаний внутриатомных диполей. Согласно классическим представлениям энергия одной колебательной моды, определяемой формулой (7), выражается равенством $E_{K,m} = N\mu_{K,m}A_{K,m}^2\omega_{K,m}^2/2$, где $\mu_{K,m} = \mu_1(\gamma_{K,m,1})^2 + \mu_2(\gamma_{K,m,2})^2$. С другой стороны, согласно М.Планку эта энергия равна $E_{K,m} = \hbar\omega_{K,m}/[\exp(\hbar\omega_{K,m}/k_B T) - 1]$. Отсюда следует, что

$$A_{K,m}^2 = \frac{2\hbar}{N\mu_{K,m}\omega_{K,m}[\exp(\hbar\omega_{K,m}/k_B T) - 1]}. \quad (8)$$

Наложение прямой и обратной бегущих волн, определяемых волновыми векторами \mathbf{K} и частотой $\omega_{K,m}$, представляется для каждой подрешётки стоячей волной $\tilde{\mathbf{u}}_{\xi,K,m}(t)$, которая согласно сказанному выше выражаемой формулой

$$\tilde{\mathbf{u}}_{\xi,K,m}(t) = \mathbf{u}_{\xi,K,m}(t) + \mathbf{u}_{\xi,-K,m}(t) = \gamma_{K,m,i}B_{\xi,K,m} \sin(\omega_{K,m}t + \phi_{K,m})\mathbf{g}_{K,m,i}, \quad (9)$$

где $B_{\xi,K,m} = 2A_{K,m} \cos(\mathbf{K}\mathbf{r}_{\xi} + \psi_{K,m})$.

Общее решение уравнения динамики решётки представляет собой наложение колебаний (9) и выражается формулой

$$\mathbf{u}_{\xi}(t) = \sum_{K,m} \tilde{\mathbf{u}}_{\xi,K,m}(t) = \sum_{K,m} \gamma_{K,m,i}B_{\xi,K,m} \sin(\omega_{K,m}t + \phi_{K,m})\mathbf{g}_{K,m,i}. \quad (10)$$

Колебания подрешёток, определённые по формуле (10), удовлетворяют системе уравнений (5). Отсюда следует, что плечо диполя $\mathbf{p}_{\xi,K,m}$, наводимого в атоме A_{ξ} за счёт его относительного перемещения с соседними атомами, при таких колебаниях выражается формулой

$$\mathbf{p}_{\xi,K,m}(t) = \frac{\alpha_i\mu_i}{\beta_i}\gamma_{K,m,i}\omega_{K,m}^2B_{\xi,K,m} \sin(\omega_{K,m}t + \phi_{K,m})\mathbf{g}_{K,m,i}, \quad \xi \in \Lambda_i. \quad (11)$$

Плечо же полного дипольного момента, наводимого в атоме A_{ξ} при колебаниях, заданных по формуле (10), тогда представляется так

$$\mathbf{p}_{\xi}(t) = \sum_{K,m} \mathbf{p}_{\xi,K,m}(t) = \frac{\alpha_i\mu_i}{\beta_i} \sum_{K,m} \gamma_{K,m,i}\omega_{K,m}^2B_{\xi,K,m} \sin(\omega_{K,m}t + \phi_{K,m})\mathbf{g}_{K,m,i}. \quad (12)$$

Отметим, что в формулах (10)–(12) волновой вектор \mathbf{K} пробегает не всю зону Бриллюэна, а некоторую её часть, не содержащую одновременно оба вектора \mathbf{K} и $-\mathbf{K}$. Число точек такого множества должно быть равно $N/2$.

Вернёмся теперь к уравнению (4). Рассмотрим некоторый атом A_{ξ} , $\xi \in \Lambda_i$, атом $A_{\xi'}$, $\xi' \in \Lambda_{i'}$ и положим $\beta' = q_i q_{i'}/4\pi\epsilon_0$. Кулоновская сила $\mathbf{Q}_{\xi,j}$, действующая на остов атома A_{ξ} со стороны всех атомов, расположенных на j -й его координационной сфере в первом приближении равна:

$$\mathbf{Q}_{\xi,j} = \frac{\beta'}{r_j^3} \sum_{\xi' \in S_j(\xi)} (3 \langle \mathbf{P}_{\xi'}, \mathbf{e}_{\xi\xi'} \rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'} - \mathbf{P}_{\xi'}),$$

где r_j – расстояние между атомами решётки, расположенными друг относительно друга на j -й координационной сфере.

Согласно (1) имеет место представление $\mathbf{P}_{\xi'} = \mathbf{p}_{\xi'} + \Delta\mathbf{p}_{\xi'}$. Поэтому справедливы равенства:

$$\mathbf{Q}_{\xi,j} = \mathbf{q}_{\xi,j} + \Delta\mathbf{q}_{\xi,j}, \quad \mathbf{Q}_{\xi} = \mathbf{q}_{\xi} + \Delta\mathbf{q}_{\xi}, \quad \mathbf{Q}_{\xi} = \sum_j \mathbf{Q}_{\xi,j},$$

где

$$\mathbf{q}_{\xi,j} = \frac{\beta'}{r_j^3} \sum_{\xi' \in S_j(\xi)} (3 \langle \mathbf{p}_{\xi'}, \mathbf{e}_{\xi\xi'} \rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'} - \mathbf{p}_{\xi'}), \quad \mathbf{q}_{\xi} = \sum_j \mathbf{q}_{\xi,j}, \quad (13)$$

$$\Delta\mathbf{q}_{\xi,j} = \frac{\beta'}{r_j^3} \sum_{\xi' \in S_j(\xi)} (3 \langle \Delta\mathbf{p}_{\xi'}, \mathbf{e}_{\xi\xi'} \rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'} - \Delta\mathbf{p}_{\xi'}), \quad \Delta\mathbf{q}_{\xi} = \sum_j \Delta\mathbf{q}_{\xi,j}. \quad (14)$$

Выражая $\mathbf{p}_{\xi'}$ по формуле (12), подставляя в формулу (13) и учитывая, что $\beta'/\beta_{i'} = q_i/q_{i'}$, приходим к равенству:

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_{\xi,j} &= \frac{\alpha_{i'}\mu_{i'}q_i}{r_j^3q_{i'}} \sum_{K,m} \gamma_{K,m,i'}\omega_{K,m}^2 \sin(\omega_{K,m}t + \phi_{K,m}) \times \\ &\times \sum_{\xi' \in S_j(\xi)} B_{\xi',K,m} (3 \langle \mathbf{g}_{K,m,i'}, \mathbf{e}_{\xi\xi'} \rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'} - \mathbf{g}_{K,m,i'}). \end{aligned}$$

Рассматриваемая решётка обладает свойством центральной симметрии относительно произвольного её узла. Это обстоятельство позволяет внутреннюю сумму в правой части приведенного равенства, где суммирование ведется по всей координационной сфере $S_j(\xi)$, преобразовать к сумме по какой-нибудь её полусфере $\bar{S}_j(\xi)$. Тогда это равенство представляется в виде

$$\mathbf{q}_{\xi,j} = \frac{\alpha_{i'}\mu_{i'}q_i}{q_{i'}a^3} \sum_{K,m} \gamma_{K,m,i'}\omega_{K,m}^2 B_{\xi,K,m} \sin(\omega_{K,m}t + \phi_{K,m}) \mathbf{f}_{K,m,j}, \quad (15)$$

где

$$\mathbf{f}_{K,m,j} = \frac{2}{\lambda_j^3} \sum_{\xi' \in \bar{S}_j(\xi)} \cos \mathbf{K}\Delta\mathbf{r}_{\xi\xi'} (3 \langle \mathbf{g}_{K,m,i'}, \mathbf{e}_{\xi\xi'} \rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'} - \mathbf{g}_{K,m,i'}), \quad \lambda_j = \frac{r_j}{a}, \quad \xi' \in \Lambda'_i. \quad (16)$$

Как видно из (16), вектор $\mathbf{f}_{K,m,j}$ является образом вектора $\mathbf{g}_{K,m,i'}$ относительно некоторого линейного преобразования. Это линейное преобразование определяется значением вектора \mathbf{K} и номером j координационной сферы, по которой ведется суммирование, и не зависит от того, какой подрешётке принадлежит атом A_{ξ} . Его матрицу в базисе $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$ мы обозначим через $\hat{F}_{K,j}$. Тогда равенство (16) может быть записано так: $\mathbf{f}_{K,m,j} = \hat{F}_{K,j}\mathbf{g}_{K,m,i'}$, а формула (15) принимает вид:

$$\mathbf{q}_{\xi,j} = \frac{\alpha_{i'}\mu_{i'}q_i}{q_{i'}a^3} \sum_{K,m} \gamma_{K,m,i'}\omega_{K,m}^2 B_{\xi,K,m} \sin(\omega_{K,m}t + \phi_{K,m}) \hat{F}_{K,j}\mathbf{g}_{K,m,i'}. \quad (17)$$

Рассмотрим уравнение (4). С учетом равенств (1)-(3) оно принимает вид

$$\beta_i \left(\frac{1}{\alpha_i} + \frac{2}{3\rho_i^3} \right) \Delta\mathbf{p}_{\xi} - \Delta\mathbf{q}_{\xi} = \mathbf{q}_{\xi} - \frac{2\beta_i}{3\rho_i^3} \mathbf{p}_{\xi}, \quad i = 1, 2. \quad (18)$$

Правые части равенств (18) представляют линейные комбинации стоячих волн $\sin(\omega_{K,m}t + \phi_{K,m})B_{\xi,K,m}$ с векторными коэффициентами. Для того, чтобы эти равенства были возможны необходимо, чтобы вектор-функция $\Delta \mathbf{p}_\xi = \Delta \mathbf{p}_\xi(t)$ (а вместе с ней и вектор-функция $\Delta \mathbf{q}_\xi$) также являлась линейной комбинацией тех же стоячих волн с некоторыми векторными коэффициентами. Будем искать вектор-функцию $\Delta \mathbf{p}_\xi$ в виде, подобном тому, как представлялась формулой (11) вектор-функция \mathbf{p}_ξ . Положим

$$\Delta \mathbf{p}_\xi(t) = \frac{\alpha_i \mu_i}{\beta_i} \sum_{K,m} \gamma_{K,m,i} \omega_{K,m}^2 B_{\xi,K,m} \sin(\omega_{K,m}t + \phi_{K,m}) \Delta \mathbf{g}_{K,m,i}. \quad (19)$$

Пусть M и M' – множества чисел, нумерующих координационные сферы атома A_ξ , лежащие соответственно в той же подрешётке, что и сам атом и в противоположной подрешётке. Тогда $M = \{2, 3, 5, 6, \dots\}$, $M' = \{1, 4, 7, \dots\}$. Положим

$$\begin{aligned} \hat{H}_K &= \sum_{j \in M} \hat{F}_{K,j}, & \hat{G}_K &= \sum_{j \in M'} \hat{F}_{K,j}, \\ d_{11} &= \frac{\alpha_1 \mu_1}{a^3} & d_{22} &= \frac{\alpha_2 \mu_2}{a^3}, & d_{12} &= \frac{q_1 \alpha_2 \mu_2}{q_2 a^3}, & d_{21} &= \frac{q_2 \alpha_1 \mu_1}{q_1 a^3}. \end{aligned}$$

Тогда система уравнений (18) приводится к виду

$$\begin{aligned} \gamma_{K,m,1} d_{11} \left[\left(\frac{a^3}{\alpha_1} + \frac{2a^3}{3\rho_1^3} \right) \hat{I} - \hat{H}_K \right] \Delta \mathbf{g}_{K,m,1} - \gamma_{K,m,2} d_{12} \hat{G}_K \Delta \mathbf{g}_{K,m,2} = \\ = \gamma_{K,m,1} d_{11} \left(\hat{H}_K - \frac{2a^3}{3\rho_1^3} \hat{I} \right) \mathbf{g}_{K,m,1} + \gamma_{K,m,2} d_{12} \hat{G}_K \mathbf{g}_{K,m,2}, \end{aligned} \quad (20)$$

$$\begin{aligned} -\gamma_{K,m,1} d_{21} \hat{G}_K \Delta \mathbf{g}_{K,m,1} + \gamma_{K,m,2} d_{22} \left[\left(\frac{a^3}{\alpha_2} + \frac{2a^3}{3\rho_2^3} \right) \hat{I} - \hat{H}_K \right] \Delta \mathbf{g}_{K,m,2} = \\ = \gamma_{K,m,1} d_{21} \hat{G}_K \mathbf{g}_{K,m,1} + \gamma_{K,m,2} d_{22} \left(\hat{H}_K - \frac{2a^3}{3\rho_2^3} \hat{I} \right) \mathbf{g}_{K,m,2}. \end{aligned} \quad (21)$$

Решив систему (20), (21), положим

$$\mathbf{h}_{K,m,i} = \mathbf{g}_{K,m,i} + \Delta \mathbf{g}_{K,m,i}, \quad D_{K,m,i} = \frac{\mu_i \omega_{K,m}^2 \alpha_i \gamma_{K,m,i}}{\beta_i}, \quad i = 1, 2. \quad (22)$$

Складывая равенства (12) и (19), учитывая обозначения (22), приходим к формулам

$$\mathbf{P}_\xi(t) = \sum_{K,m} D_{K,m,i} B_{\xi,K,m} \sin(\omega_{K,m}t + \phi_{K,m}) \mathbf{h}_{K,m,i}, \quad \xi \in \Lambda_i. \quad (23)$$

Введем обозначения, полагая

$$\mathbf{P}_{\xi,K,m}(t) = D_{K,m,i} B_{\xi,K,m} \sin(\omega_{K,m}t + \phi_{K,m}) \mathbf{h}_{K,m,i}, \quad \xi \in \Lambda_i. \quad (24)$$

Тогда формула (23) представляется в виде

$$\mathbf{P}_\xi(t) = \sum_{K,m} \mathbf{P}_{\xi,K,m}(t). \quad (25)$$

Усреднённые характеристики внутриатомных диполей. Рассмотрим колебание, заданное по формуле (24). Средний квадрат плеча внутриатомного диполя по времени и по всем атомам i -й подрешётки для данных \mathbf{K} и m очевидно выражается формулой

$$[\mathbf{P}_{K,m,i}^2] = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{TN} \int_0^T \sum_{\xi \in \Lambda_i} \mathbf{P}_{\xi,K,m}^2(t) dt, \quad i = 1, 2.$$

Как нетрудно видеть, справедливо равенство

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \mathbf{P}_{\xi,K,m}^2(t) dt = \frac{1}{2} D_{K,m,i}^2 B_{\xi,K,m}^2 h_{K,m,i}^2.$$

Следовательно,

$$[\mathbf{P}_{K,m,i}^2] = \frac{1}{2N} \sum_{\xi \in \Lambda_i} D_{K,m,i}^2 B_{\xi,K,m}^2 h_{K,m,i}^2 = \frac{2}{N} D_{K,m,i}^2 A_{K,m}^2 h_{K,m,i}^2 \sum_{\xi \in \Lambda_i} \cos^2(\mathbf{K}\mathbf{r}_\xi + \psi_{K,m}).$$

Но, как легко доказать, $\sum_{\xi \in \Lambda_i} \cos^2(\mathbf{K}\mathbf{r}_\xi + \psi_{K,m}) = N/2$. Поэтому с учётом (8) в итоге получаем

$$[\mathbf{P}_{K,m,i}^2] = \frac{2\hbar D_{K,m,i}^2 \mathbf{h}_{K,m,i}^2}{N\mu_{K,m}\omega_{K,m}[\exp(\hbar\omega_{K,m}/k_B T) - 1]}, \quad i = 1, 2. \quad (26)$$

Согласно (25) средний квадрат плеча внутриатомного диполя для каждой из подрешёток выражается формулой

$$[\mathbf{P}_i^2] = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{TN} \int_0^T \sum_{\xi \in \Lambda_i} \mathbf{P}_\xi^2(t) dt = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{TN} \int_0^T \sum_{\xi \in \Lambda_i} \left(\sum_{K,m} \mathbf{P}_{\xi,K,m}(t) \right)^2 dt.$$

Для вычисления подынтегрального выражения поменяем в нём порядок суммирования. Тогда

$$\sum_{\xi \in \Lambda_i} \mathbf{P}_\xi^2 = \sum_{K,L} \sum_{\xi \in \Lambda_i} \sum_{m,l=1}^6 \langle \mathbf{P}_{\xi,K,m}, \mathbf{P}_{\xi,L,l} \rangle. \quad (27)$$

Если $\mathbf{K} \neq \mathbf{L}$, то, как нетрудно проверить, справедливо равенство

$$\sum_{\xi \in \Lambda_i} \cos(\mathbf{K}\mathbf{r}_\xi + \psi_{K,m}) \cos(\mathbf{L}\mathbf{r}_\xi + \psi_{L,l}) = 0.$$

Следовательно, сумма (27) приводится к виду

$$\sum_{\xi \in \Lambda_i} \mathbf{P}_\xi^2 = \sum_K \sum_{\xi \in \Lambda_i} \sum_{m,l=1}^6 \langle \mathbf{P}_{\xi,K,m}, \mathbf{P}_{\xi,K,l} \rangle.$$

Нетрудно также проверить, что

$$\begin{aligned} & \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \sum_{m,l=1}^6 \langle \mathbf{P}_{\xi,K,m}(t), \mathbf{P}_{\xi,K,l}(t) \rangle dt = \\ & = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \sum_{m=1}^6 \mathbf{P}_{\xi,K,m}^2(t) dt = \frac{1}{2} \sum_{m=1}^6 D_{K,m,i}^2 B_{\xi,K,m}^2 h_{K,m,i}^2. \end{aligned}$$

Таким образом, справедливо равенство

$$[\mathbf{P}_i^2] = \sum_{K,m} \frac{1}{2N} \sum_{\xi \in \Lambda_i} D_{K,m,i}^2 B_{\xi,K,m}^2 h_{K,m,i}^2.$$

Вычисляя внутреннюю сумму, согласно (26) окончательно получаем формулу

$$[\mathbf{P}_i^2] = \sum_{K,m} \mathbf{P}_{K,m,i}^2 = \sum_{K,m} \frac{2 \hbar D_{K,m,i}^2 h_{K,m,i}^2}{N \mu_{K,m} \omega_{K,m} [\exp(\hbar \omega_{K,m}/k_B T) - 1]}. \quad (28)$$

Формула (28) позволяет рассчитать спектральную плотность распределения квадрата плеча $P_i^2(\omega)$ внутриатомного диполя.

Пусть $\{\omega_j\}$, $j = 1, \dots, n_0$ – некоторое разбиение фононного спектра кристалла $[0, \omega_{\max}]$ на достаточно малые части. Положим $\Delta\omega_j = \omega_j - \omega_{j-1}$ и $\Delta\Omega_j = [\omega_j, \omega_j + \Delta\omega_j]$. Тогда согласно (22) равенство (28) представляется в виде

$$[\mathbf{P}_i^2] = \sum_j \sum_{\omega_{K,m} \in \Delta\Omega_j} \frac{2 \hbar a^6 \mu_i^2 \omega_{K,m}^3 (\gamma_{K,m,i})^2 h_{K,m,i}^2}{N \mu_{K,m} [\exp(\hbar \omega_{K,m}/k_B T) - 1]}.$$

Положим

$$P_i^2(\omega_j) \Delta\omega_j = \frac{2 \hbar a^6 \mu_i^2 \omega_j^3}{\exp(\hbar \omega_j/k_B T) - 1} \sum_{\omega_{K,m} \in \Delta\Omega_j} \frac{(\gamma_{K,m,i})^2 h_{K,m,i}^2}{N \mu_{K,m}}. \quad (29)$$

Обозначим через $h_i^2(\omega_j)$ среднее значение величины $(\gamma_{K,m,i})^2 h_{K,m,i}^2 / \mu_{K,m}$ по всем значениям \mathbf{K}, m , для которых $\omega_{k,m} \in \Delta\Omega_j$. Пусть далее $g(\omega)$ – плотность вероятности распределения фононного спектра кристалла. Поскольку число слагаемых суммы (28) равно $3N$, величина $3Ng(\omega_j)\Delta\omega_j$ равна числу слагаемых суммы (29). Тогда сама эта сумма выражается равенством

$$\sum_{\omega_{K,m} \in \Delta\Omega_j} \frac{(\gamma_{K,m,i})^2 h_{K,m,i}^2}{N \mu_{K,m}} = 3g(\omega_j) h_i^2(\omega_j) \Delta\omega_j. \quad (30)$$

Из равенств (29), (30) следует, что справедлива формула

$$P_i^2(\omega) = \frac{6 \hbar a^6 \mu_i^2 \omega^3 g(\omega) h_i^2(\omega)}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1}. \quad (31)$$

Для произвольного значения частоты ω , принадлежащей фоннному спектру кристалла, величина $h_i^2(\omega)$ равна среднему значению величин $(\gamma_{K,m,i})^2 h_{K,m,i}^2 / \mu_{K,m}$ по всем значениям вектора \mathbf{K} и параметра m , при которых $\omega = \omega_{K,m}$.

Ниже приводятся расчётные кривые спектральной плотности квадрата плеча внутриатомного диполя для каждой из подрешёток (рис. 1), а также его среднее значение. Полученные графики воспроизводят все особенности плотности фоннных состояний (рис. 2) твёрдого раствора NiAl.

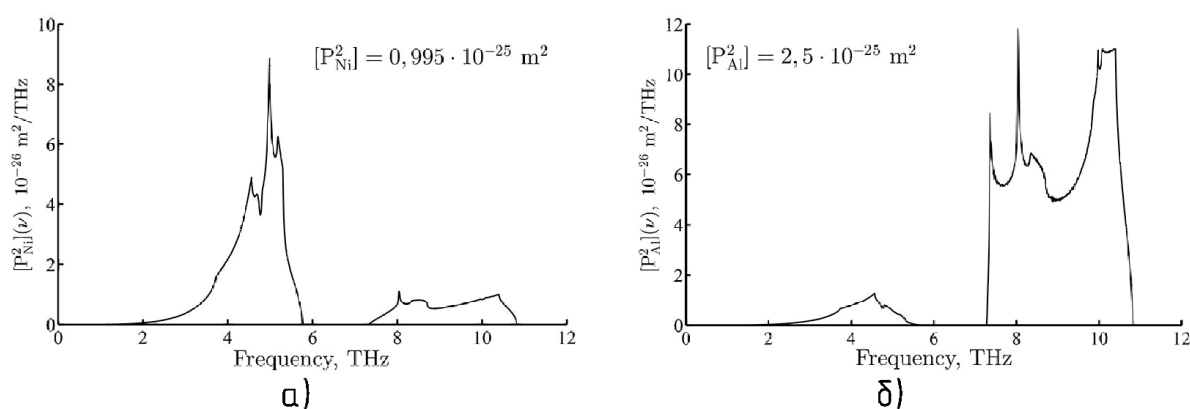


Рис. 1. Спектральная плотность квадрата плеча внутриатомного диполя: а) для подрешётки Ni; б) подрешётки Al.

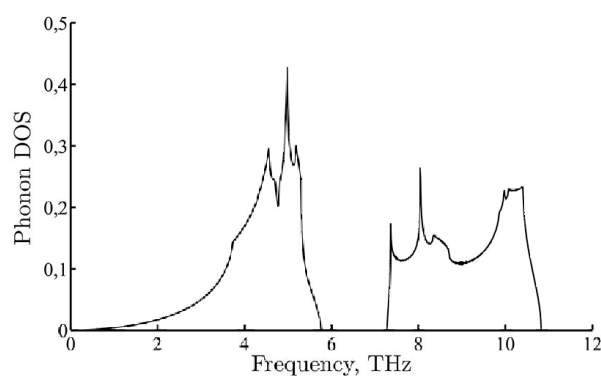


Рис. 2. Плотность фоннных состояний для NiAl.

Список литературы

1. Холодовский В. Е., Краюпкина Е. Ю. Дисперсионные соотношения для кристаллов твёрдых растворов со структурой CsCl // Ученые записки ЗабГУ. Сер. Физика, математика, техника, технология. 2013. № 3(50). С. 121–131.

2. Краюшкина Е. Ю., Холодовский В. Е. Расчёт теплоёмкости и среднеквадратичных смещений твёрдого раствора NiAl по фоновым спектрам // Вестник МГТУ им. Н. Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2015. № 3. С. 110–119.
3. Мачихина И. О., Холодовский В. Е. Динамические и испускательные характеристики внутриатомных диполей металлов в модели В-д-В взаимодействий // Ученые записки ЗабГУ. 2014. №3(56). С. 74–83.
4. Холодовский В. Е., Мачихина И. О. Параметры внутриатомных диполей металлов в модели В-д-В взаимодействий // Изв. Сам. науч. центра РАН. 2014. Т. 16. № 4. С. 102–108.
5. Холодовский В. Е., Сидоров А. А. Поток энергии и сила реакции на излучение внутриатомного диполя // Ученые записки ЗабГГПУ. Сер. Физика, математика, техника, технология 2012. № 3. С. 141–144.

References

1. Kholodovskii V. E., Krayushkina E. Yu. Dispersionnye sootnosheniya dlya kristallov tverdykh rastvorov so strukturoi CsCl // Uchenye zapiski ZabGU. Ser. Fizika, matematika, tekhnika, tekhnologiya. 2013. № 3(50). S. 121–131.
2. Krayushkina E. Yu., Kholodovskii V. E. Raschet teploemkosti i srednekvadraticnykh smeshchenii tverdogo rastvora NiAl po fononnyim spektram // Vestnik MGTU im. N. E. Baumana. Ser. Estestvennye nauki. 2015. № 3. С. 110–119.
3. Machikhina I. O., Kholodovskii V. E. Dinamicheskie i ispuskatel'nye kharakteristiki vnutriatomnykh dipolei metallov v modeli V-d-V vzaimodeistvii // Uchenye zapiski ZabGU. 2014. №3(56). С. 74–83.
4. Kholodovskii V. E., Machikhina I. O. Parametry vnutriatomnykh dipolei metallov v modeli V-d-V vzaimodeistvii // Izv. Sam. nauch. tsentra RAN. 2014. Т. 16. № 4. С. 102–108.
5. Kholodovskii V. E., Sidorov A. A. Potok energii i sila reaktsii na izluchenie vnutriatomnogo dipolya // Uchenye zapiski ZabGGPU. Ser. Fizika, matematika, tekhnika, tekhnologiya 2012. № 3. S. 141–144.

Статья поступила в редакцию 23.04.2015