

УДК 539.1:539.21

РАСЧЕТ ИНТЕНСИВНОСТИ ТЕПЛООВОГО ДИФФУЗНОГО РАССЕЯНИЯ В ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ОЦК И ГЦК МЕТАЛЛАХ ПО БОРНУ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МОДЕЛЬНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ

В. М. Силонов, И. А. Балакирев, А. Ю. Гениев

(кафедра физики твердого тела)

E-mail: sols333@phys.msu.ru

На основе теории Макса Борна предложен новый метод расчета интенсивности теплового диффузного рассеяния (ТДР) поликристаллическими ОЦК и ГЦК металлами. В отличие от ранее широко использовавшейся теории Бори, основанной на модели Дебая, предлагается использовать реальные зависимости частот колебаний от волнового вектора. Фононные спектры рассчитывались как в приближении Борна–Бегби (учитываются упругие постоянные c_{11}, c_{12}, c_{44} , так и методом модельного потенциала с учетом взаимодействий в произвольной координационной сфере.

Рассеяние рентгеновских лучей на тепловых колебаниях атомов является одним из основных компонент диффузного рассеяния рентгеновских лучей (ДРРЛ) металлами и сплавами [1–3]. Метод ДРРЛ широко используется при определении параметров ближнего порядка в твердых растворах. Знание зависимости интенсивности теплового рассеяния необходимо и при изучении диффузного рассеяния на структурных несовершенствах сплавов. При этом интенсивность теплового диффузного рассеяния (ТДР) является «паразитным» компонентом и исключается из экспериментальных значений интенсивности ДРРЛ расчетным путем. Часто при исследовании поликристаллических сплавов для расчета интенсивности ТДР использовалась теория Бори [4]. Главным параметром этой теории является дебаевская характеристическая температура Θ_D . Данный подход не всегда оправдан при оценке вклада ТДР, поскольку в ряде случаев не позволяет адекватно учесть возможную перестройку фононных спектров сплавов. Известно [5, 6], что в ОЦК металлах такая перестройка наблюдается как размягчение фононных мод. Подобная перестройка видимо не всегда может быть учтена в модели Дебая. Одним из возможных методов учета деталей фононного спектра металлов может быть использование модели Борна–Бегби [7], где фононные спектры металлов явно зависят от значений упругих постоянных. Наиболее последовательным методом расчета фононных спектров металлов и сплавов является квантово-механический метод модельного потенциала [8–11]. Тепловое диффузное рассеяние металлами может быть рассчитано также по известным значениям фононных спектров с помощью теории Борна.

Целью данной работы является создание метода расчета интенсивности ТДР, ГЦК и ОЦК металлов, основанного на теории Борна и сопоставление результатов расчета интенсивности ТДР на примерах меди и железа с экспериментально измеренными

значениями, а также с результатами расчетов по традиционно используемой при исследованиях ближнего порядка теории Бори.

Методика расчета

Полная теория теплового диффузного рассеяния в общем случае была разработана Борном [12–15] исходя из теории Борна–Кармана, согласно которой динамика решетки для случая малых колебаний атомов может описываться рядом коэффициентов выражения потенциальной энергии, образующих динамическую матрицу. Потенциальная энергия взаимодействия между атомами в решетке является функцией смещения атомов из положения равновесия. Физические свойства кристалла могут быть выражены с помощью этой функции и ее производных. Силовое взаимодействие между атомами, обуславливающее колебательные свойства кристалла, определяется вторыми производными потенциальной энергии кристалла — функции фиксированной конфигурации атомов в каждый момент времени, которые и образуют динамическую матрицу. Борн выразил интенсивность теплового диффузного рассеяния J через элементы матрицы рассеяния $S(\mathbf{q})$:

$$J = e^{-2M} N \sum S_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) W_{\alpha}(\mathbf{q}) W_{\beta}(\mathbf{q}), \quad (1)$$

$$W_{\alpha}(\mathbf{q}) = W_{kx}(\mathbf{q}) = f_k e^{2\pi i \mathbf{q} \mathbf{r}(k)} / \sqrt{M_k},$$

где $\alpha, \beta = 1s, 3s$, $k = 1, s$, $x = 1, 3$, s — число атомов в ячейке, f_k — атомный фактор, M_k — масса атома, N — число атомов, \mathbf{q} — вектор рассеяния, $\mathbf{r}(k)$ — радиус-вектор атома k в ячейке. В свою очередь матрица рассеяния выражается через динамическую матрицу $D(\mathbf{q})$:

$$S(\mathbf{q}) = kT (D^{-1}(\mathbf{q}) - \sum (-1)^n \frac{B_n}{(2n)!} \left(\frac{\hbar}{kT} \right)^{2n} D^{n-1}(\mathbf{q})), \quad (2)$$

где B_n — числа Бернулли. Ограничившись в формуле (2) первым членом разложения, получаем выражение для матрицы рассеяния:

$$S(\mathbf{q}) = kTD^{-1}(\mathbf{q}).$$

Динамическая матрица, используемая в формуле для интенсивности ТДР, вычислялась в приближении Борна–Бегби. Компоненты динамической матрицы рассчитывались по формулам

$$D_{11} = ac_{11} \left[2 - \cos \frac{aq_x}{2} \left(\cos \frac{aq_y}{2} + \cos \frac{aq_z}{2} \right) \right] + a(2c_{44} - c_{11}) \left(1 - \cos \frac{aq_y}{2} \cos \frac{aq_z}{2} \right), \quad (3)$$

$$D_{12} = D_{\mathbf{q}21} = a(c_{12} + c_{44}) \sin \frac{aq_x}{2} \sin \frac{aq_y}{2}$$

— для ГЦК решетки;

$$D_{11} = 4ac_{44} \left(1 - \cos \frac{aq_x}{2} \cos \frac{aq_y}{2} \cos \frac{aq_z}{2} \right) + d(c_{11} - c_{44})(1 - \cos aq_x), \quad (4)$$

$$D_{12} = 2a(c_{12} + c_{44}) \sin \frac{aq_x}{2} \sin \frac{aq_y}{2} \cos \frac{aq_z}{2}$$

— для ОЦК решетки, где a — параметр решетки, c_{11}, c_{12}, c_{44} — модули упругости. Остальные элементы динамической матрицы получаются циклической перестановкой индексов.

При использовании модельных потенциалов выражения для компонент динамической матрицы $D_{ij}(\mathbf{q})$ можно записать в виде

$$D_{ij}(\mathbf{q}) = 2 \sum \{(\mathbf{G} + \mathbf{q})_i (\mathbf{G} + \mathbf{q})_j [F_{es}(|\mathbf{G} + \mathbf{q}|) + F_{bs}(|\mathbf{G} + \mathbf{q}|)]\} - 2 \sum \{G_i \{G_j [F_{es}(|\mathbf{G}|) + F_{bs}(|\mathbf{G}|)]\}, \quad (5)$$

$$F_{es}(\mathbf{q}) = \frac{2\pi Z^2}{\Omega q^2} \exp\left(-\frac{q^2}{4\eta}\right),$$

$$F_{bs}(\mathbf{q}) = \frac{\Omega q^2}{8\pi} |W(q)|^2 \frac{1 - \varepsilon(q)}{\varepsilon^*(q)},$$

$D_{ij}(\mathbf{q})$ — динамическая матрица сплава, \mathbf{G} — вектор обратной решетки сплава, Z — валентность, $W(q)$ — неэкранированные формфакторы псевдопотенциалов, Ω — атомный объем, $\varepsilon(q)$ — диэлектрическая проницаемость без учета обмена и корреляции электронов проводимости, $\varepsilon^*(q)$ — диэлектрическая проницаемость с учетом обмена и корреляции электронов проводимости, η — параметр Эвальда.

Расчет интенсивности ТДР монокристалла проводился с использованием выражения (1). Динамические матрицы, входящие в выражение матрицы рассеяния, рассчитывались с помощью выражений (3)–(5). С целью получения значений интенсивностей для поликристаллов проводилось усреднение по неприводимому участку первой зоны бриллюэна. Численные расчеты интенсивностей ТДР проводились на примере меди и железа. Использовались

следующие значения упругих постоянных c_{11}, c_{12}, c_{44} соответственно: для меди 16.84, 12.14, 7.54 и для железа 23.31, 13.54, 11.78 (все в 10^{11} дин/см²) [16].

В настоящей работе использовался модельный потенциал из работ [8–10].

Для расчета интенсивности ТДР поликристалла проводилось усреднение по неприводимому участку первой зоны бриллюэна. Уравнения плоскостей, ограничивающих неприводимую часть первой зоны Бриллюэна ГЦК решетки, имеют вид

$$q_z = 0, \quad q_x = \frac{2\pi}{a}, \quad q_x = q_y, \quad q_x = q_z, \quad q_x + q_y + q_z = \frac{3\pi}{a},$$

а для ОЦК решетки —

$$q_z = 0, \quad q_x = q_y, \quad q_x = q_z, \quad q_x + q_y = \frac{2\pi}{a},$$

где a — параметр решетки.

Число точек в зоне Бриллюэна, по которым проводилось усреднение, увеличивалось до достижения сходимости результатов расчета и составило 10^4 .

Методика эксперимента

Измерения интенсивности диффузного рассеяния рентгеновских лучей проводились на автоматизированном дифрактометре типа ДРОН с кобальтовым анодом. Монохроматизация рентгеновского пучка осуществлялась с помощью плоского монокристалла кремния (отражающая плоскость кристалл-монокристалла 111). Рассеянное излучение регистрировалось при помощи счетчика БДС-6-05. Образец, счетчик и кристалл-монокристалл располагаются на одной фокусирующей окружности. Для обеспечения независимости коэффициента поглощения от угла падения рентгеновских лучей на образец применялась схема съемки, при которой угол падения рентгеновских лучей равнялся углу отражения. Для сведения рассеяния воздухом к минимуму использовался коллиматор, установленный перед счетчиком, что позволяет исключить около 80% этого рассеяния. Оставшуюся часть интенсивности рассеяния от воздуха исключали путем вычитания половины измеренной интенсивности в отсутствие образца. Измерения интенсивности диффузного фона проводилось по точкам в области углов (2θ) от 10 до 120°. Интенсивность диффузного рассеяния состоит из «паразитной» и эффективной части. «Паразитную» часть, в свою очередь, можно представить в виде суммы следующих слагаемых: космический фон и шум установки, рассеяние воздухом, комптоновское и двойное брэгговское рассеяние. Все перечисленные выше компоненты исключались из измеренных интенсивностей. Космический шум и фон установки определяли при выключенном высоком напряжении. Интенсивность рассеянного рентгеновского излучения приводилась к электронным единицам с помощью измерения на больших углах интенсивности

рассеяния от плавленного кварца. Измерения кварца проводились при угле (2θ) 90° . Интенсивность рассеяния молекулой кварца при таком угле выражается формулой $I_q = f_{\text{Si}}^2 + 2f_{\text{O}}^2 + I_{\text{Si}}^{\text{Compt}} + 2I_{\text{O}}^{\text{Compt}}$, где f и I^{Compt} — атомные факторы и интенсивности комптоновского рассеяния кремния и кислорода соответственно.

Интенсивность рассеяния образцом имеет вид:

$$I_s = k_{\text{abs}} \frac{I_s^m}{I_q^m} \frac{1}{P(\theta)_s},$$

где k_{abs} — константа абсолютизации записывается в виде

$$k_{\text{abs}} = \frac{M_s(\mu/\rho)_s}{M_q(\mu/\rho)_q} P(\theta)_q (I_q)_{\text{e.u.}},$$

μ — линейный коэффициент поглощения, M — молекулярный вес, ρ — плотность. Поляризационный множитель $P(\theta)$ при использовании плоского монохроматора выражается через угол Брэгга α :

$$P(\theta) = \frac{1 + \cos^2(2\alpha) \cos^2(2\theta)}{1 + \cos^2(2\alpha)}.$$

Результаты расчета

Дисперсионные кривые $\omega = \omega(\mathbf{q}/\mathbf{q}_{\text{max}})$ рассчитывались в модели Борна–Бегби и методе псевдопотенциала. Оказалось, что фоновые спектры, рассчитанные по методу псевдопотенциала, лучше согласуются с экспериментом, нежели рассчитанные в рамках модели Борна–Бегби.

На рис. 1 представлены результаты расчетов и экспериментальные интенсивности ТДР меди (рис. 1, а) и железа (рис. 1, б). Для меди получено хорошее совпадение результатов расчета и эксперимента для всех рассмотренных в работе методов. В интервалах углов $60-80^\circ$ и $95-105^\circ$ (между рефлексами) результаты расчета удовлетворительно совпадают с экспериментом, хотя в области около 100° максимальная разница в уровне фона составила: 50 эл. ед. для расчета по теории Бори и 20 эл. ед. для методов Борна–Бегби и псевдопотенциала. Для железа уже явно заметно различие результатов расчета разными методами. Результаты расчета по теории Бори оказались согласующимися с экспериментом в области углов до первого структурного рефлекса. В остальных интервалах результаты расчета оказались ниже на 30–40 эл. ед. Расчет по модели Борна–Бегби практически везде оказался завышенным в среднем на 50 эл. ед. Также видно, что рассчитанные методом псевдопотенциала значения интенсивности ТДР для железа дают значения более близкие к экспериментальным, чем другие методы.

В теории Бори [4] реальная зона Бриллюэна заменялась эквивалентной по объему сферой. Ошибки, к которым могла привести подобная замена, в [4] не анализировались. Поэтому представляло интерес провести расчеты интенсивности ТДР для меди и железа с аналогичной заменой реальной зоны Брил-

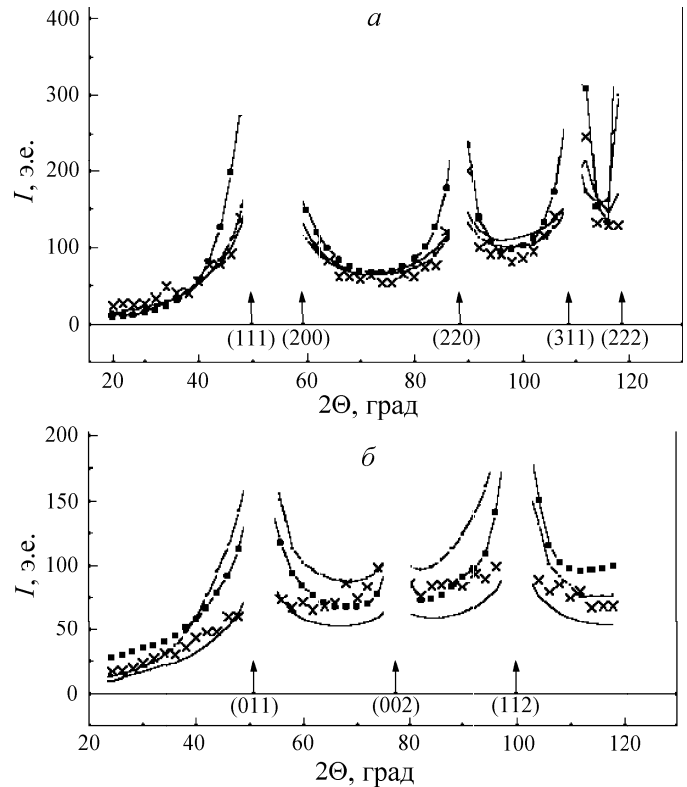


Рис. 1. Зависимости интенсивности ТДР от угла 2θ для меди (а) и железа (б): кресты — эксперимент, сплошная линия — расчет по Бори, большие кружки — расчет методом модельного потенциала, маленькие кружки — расчет в модели Борна-Бегби

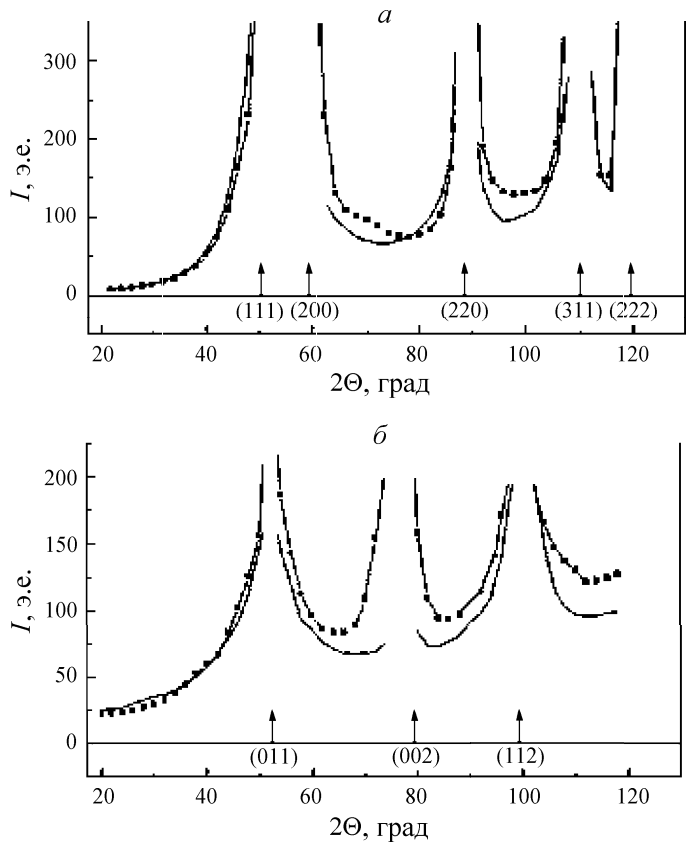


Рис. 2. Значения интенсивности ТДР от угла 2θ для меди (а) и железа (б): сплошная линия — суммирование по неприводимому участку зоны Бриллюэна, кружки — суммирование по сфере

люэна на сферу. Результаты этих расчетов, проведенных с использованием модельных потенциалов, даны на рис. 2, а, б. Из рисунка видно, что как для меди так и для железа практически нет различий в значениях интенсивности на интервале углов до первого структурного рефлекса. На остальных интервалах уже заметны существенные отличия. Для меди (рис. 2, а) в интервале углов $60-90^\circ$ при суммировании по сфере видно некоторое смещение в сторону больших углов, а в интервале $90-110^\circ$ значения интенсивности оказались существенно заниженными. Для железа (рис. 2, б) начиная с углов около 60° суммирование по сфере дает большие значения примерно на 20 эл. ед. Заметной оказалась разница и вблизи рефлексов. Подобные расчеты, проводившиеся по модели Борна–Бегби, показали, что замена зоны Бриллюэна сферой приводит к аналогичным искажениям результатов расчетов интенсивности ТДР.

Литература

1. Иверонова В.И., Кацнельсон А.А. Ближний порядок в твердых растворах. М., 1977.

2. Кривоглаз М.А. Теория рассеяния рентгеновских лучей и тепловых нейтронов реальными кристаллами. М., 1967.
3. Warren B.E. X-ray diffraction. N.Y., 1969.
4. Borie B. // Acta Cryst. 1961. **14**. P. 566.
5. Fontain D. de // Acta metallurgica. 1970. **18**. P. 275.
6. Захарова М.И., Фуэнтес Х.Э. // ДАН СССР. 1975. **225**, № 2. С. 296.
7. Begbie G.H., Born M. // Proc. Roy. Soc. 1947. **A188**. P. 179.
8. Харрисон У. Псевдопотенциалы в теории металлов. М., 1968.
9. Animalu A.O.E. // Phys. Rev. 1973. **B8**. P. 3542.
10. Animalu A.O.E. // Ibid. P. 3555.
11. Силонов В.М. Физика сплавов. М., 1993.
12. Born M., Karman T. // Phys. Z. 1912. **13**. P. 297.
13. Борн М., Кунь Х. Динамическая теория кристаллических решеток. М., 1958.
14. Born M. // Proc. Phys. Soc. 1942. **51**. P. 362.
15. Born M. // Ibid. **180**. P. 397.
16. Францевич И.Н., Воронов Ф.Ф., Бакута С.А. Упругие постоянные и модули упругости металлов и неметаллов. Киев, 1982.

Поступила в редакцию
07.02.03

ГЕОФИЗИКА

УДК 551.51:551.596

ИЗМЕРЕНИЕ ПОЛЯ ВЕТРА НАД ГОРОДОМ С ПОМОЩЬЮ АКУСТИЧЕСКОГО ЗОНДИРОВАНИЯ

В. П. Юшков, М. А. Каллистратова^{*)}, Е. В. Караваева, Р. Д. Кузнецов^{*)},
Г. А. Курбатов, В. Г. Перепелкин^{*)}, О. А. Тарасова, Е. А. Шурьгин^{*)}

(кафедра физики атмосферы)

E-mail: atmos@phys.msu.su

Акустическое зондирование обеспечивает дистанционные измерения вертикальных профилей вектора скорости ветра в городских условиях до высоты нескольких сотен метров, где контактные измерения трудно осуществимы. В работе описаны физические принципы доплеровской акустической локации. Приведены характеристики звуковых локаторов (содаров), используемых в исследовании поля ветра над Москвой, которые проводятся совместно на физическом факультете МГУ и в Институте физики атмосферы им. А. М. Обухова РАН. Изложены предварительные результаты содарных измерений скорости ветра в центре Москвы.

Введение

В исследованиях городского микроклимата главное внимание уделяется «острову тепла», характеристикам турбулентности и высоты слоя перемешивания, а также измерениям концентраций загрязнений. Меньше работ посвящено полю ветра, хотя именно ветровые потоки сильно влияют на накопление и распределение загрязняющих примесей от внутригородских источников. Обычно скорость ветра внутри города измеряется в приземном

слое [1]. Лишь в немногих городах, где имеются метеорологические башни, проводились измерения вертикальных профилей скорости ветра.

Экономичным и эффективным методом исследования вертикальной структуры поля ветра является доплеровская акустическая локация, которая обеспечивает хорошее пространственное разрешение, а также возможность проведения длительных непрерывных измерений [2]. Примеры применения акустических локаторов (содаров) в городах можно найти в работах [3–5]. В странах СНГ кратковремен-

^{*)} Институт физики атмосферы им. А. М. Обухова РАН.