

## Краудионы в атомарных криокристаллах и металлах с ГЦК и ОЦК решетками

В. Д. Нацик, С. Н. Смирнов

*Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина НАН Украины  
пр. Ленина, 47, г. Харьков, 61103, Украина  
E-mail: natsik@ilt.kharkov.ua.  
smirnov@ilt.kharkov.ua.*

Е. И. Назаренко

*Харьковский национальный университет им. В. Н. Каразина, пл. Свободы, 4, г. Харьков, 61077, Украина*

Статья поступила в редакцию 3 июля 2001 г.

Получены численные значения параметров потенциалов кристаллического поля и краудионов (собственной энергии, эффективной массы и характерной длины) для криокристаллов Ag и Kг с ГЦК решеткой, металлов Cu и Al с ГЦК решеткой, металлов  $\alpha$ - и  $\delta$ -Fe с ОЦК решеткой. Расчеты выполнены в предположении, что межатомное взаимодействие в кристаллах описывается парными эмпирическими потенциалами Ленарда-Джонса и Морзе. Для расчетов потенциалов кристаллического поля разработан и применен новый алгоритм, основанный на представлении кристаллической решетки как совокупности параллельных атомных рядов. Для потенциала, описывающего взаимодействие атома плотноупакованного ряда с кристаллической матрицей, получено аналитическое выражение в виде тригонометрического ряда. Получено также явное аналитическое выражение для энергетического параметра, характеризующего межатомное взаимодействие внутри выделенного ряда. Показано, что главное условие слабой связи плотноупакованных рядов с кристаллической матрицей, допускающее существование краудионов и использование при их описании длинноволнового приближения, выполняется во всех исследованных кристаллах.

Одержано числові значення параметрів потенціалів кристалічного поля та краудіонів (власної енергії, ефективної маси і характерної довжини) для криокристалів Ag і Kг з ГЦК ґраткою, металів Cu і Al з ГЦК ґраткою, металів  $\alpha$ - і  $\delta$ -Fe з ОЦК ґраткою. Розрахунки виконано з припущенням, що міжатомна взаємодія у кристалах описується парними емпіричними потенціалами Ленарда-Джонса і Морзе. Для розрахунків потенціалів кристалічного поля розроблено і застосовано новий алгоритм, який базується на представленні кристалічної ґратки як сукупності паралельних атомних рядів. Для потенціала, що описує взаємодію атома щільноупакованого ряду з кристалічною матрицею, отримано аналітичний вираз у вигляді тригонометричного ряду. Одержано також явний аналітичний вираз для енергетичного параметра, який характеризує міжатомну взаємодію всередині виділеного ряду. Показано, що головна умова слабкого зв'язку щільноупакованих рядів з кристалічною матрицею, яка припускає існування краудіонів та використання для їх опису довгохвильового наближення, виконується для всіх досліджених кристалів.

PACS: 61.50.Ah, 61.72.Bb, 61.72.Ji, **61.80.-x**

### Введение

Краудионные возбуждения кристаллической решетки — один из интересных объектов исследований в современной физике кристаллов. Краудионы могут играть значительную роль в динамике и кинетике радиационных дефектов, в процессах диффузии и в некоторых явлениях неупругой

деформации кристаллов [1–8]. В современной трактовке краудион представляет собой нелинейную уединенную волну смещений, возникающую в плотноупакованных атомных рядах, и рассматривается как пример топологического солитона [9–12].

В работе [13] задача о движении краудиона сформулирована как динамическая проблема

трехмерной кристаллической решетки. Показано, что корректное разделение нелинейных краудионных возбуждений и линейных упругих деформаций в трехмерном кристалле возможно только в длинноволновом приближении. Этому приближению соответствуют краудионы, имеющие достаточно большую ширину  $\lambda \gg b$  и достаточно малую скорость  $V \ll c$  ( $b$  и  $c$  — соответственно характерные значения межатомного расстояния и скорости звука в кристалле). Выполнение указанных выше требований позволяет в уравнениях, описывающих краудионы, перейти к континуальному пределу, выделить краудионные возбуждения на фоне малых упругих деформаций кристалла и свести описание краудионов к анализу уединенных волн в одномерном кристалле Френкеля–Конторовой. Модель одномерного кристалла Френкеля–Конторовой — цепочка сильно взаимодействующих между собой атомов, совершающих одномерное движение на неподвижной периодической подложке, которая создает относительно слабое потенциальное поле [9,10,14,15]. При сопоставлении этой модели с реальным кристаллом предполагается, что подвижная цепочка атомов соответствует выделенному атомному ряду, а периодический потенциал подложки моделирует взаимодействие этого ряда с кристаллической матрицей.

В [13] показано, что при описании краудионов в первом приближении можно считать кристаллическую матрицу абсолютно жесткой, т.е. пренебречь ее деформациями. В этом случае для описания нелинейной динамики атомов выделенного ряда в качестве естественной полевой динамической переменной удобно использовать функцию  $u(x, t)$  — поле продольных смещений атомов из положений равновесия в идеальном кристалле, которое зависит от координаты  $x$  вдоль цепочки и времени  $t$ . Предполагается, что направления оси  $0x$  и смещения  $u(x, t)$  задаются элементарным вектором трансляций кристалла  $\mathbf{b}$  вдоль рассматриваемой цепочки атомов. Функционал энергии, соответствующий этому приближению, имеет следующий вид:

$$H = \frac{1}{b} \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \frac{m_a}{2} (\dot{u})^2 + \frac{\omega}{2} (u')^2 + \Phi(u) \right] dx. \quad (1)$$

Здесь  $m_a$  — масса атомов выделенного ряда,  $\omega$  — параметр межатомного взаимодействия внутри выделенного ряда,  $\Phi(u) = \Phi(u + b)$  — периодический потенциал кристаллического поля для атомов выде-

ленного ряда (потенциал подложки),  $\dot{u} = \partial u / \partial t$ ,  $u' = \partial u / \partial x$ .

В данной работе мы будем рассматривать простые кристаллы, состоящие из атомов одного сорта, взаимодействие между которыми на расстоянии  $\mathbf{r}$  описывается парным потенциалом  $U(\mathbf{r})$ . В этом случае выражения для параметра  $\omega$  и потенциала  $\Phi(u)$  имеют вид [13]:

$$\omega = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}} \rho_i \rho_k \frac{\partial^2 U(\mathbf{p})}{\partial \rho_i \partial \rho_k}; \quad (2)$$

$$\Phi(u) = \sum_{\mathbf{R}} [U(\mathbf{R} - \boldsymbol{\tau}u) - U(\mathbf{R})], \quad \boldsymbol{\tau} = \frac{\mathbf{b}}{b}. \quad (3)$$

Здесь суммирование выполняется по равновесным положениям атомов выделенного ряда  $\mathbf{p}$  и атомов матрицы  $\mathbf{R}$ . Второе слагаемое в квадратных скобках в формуле (3) задает начало отсчета потенциальной энергии, которое выбрано так, чтобы обеспечить неотрицательность потенциала  $\Phi(u) \geq 0$ .

В нашей недавно опубликованной работе [16] был проведен анализ структуры и динамических свойств краудионов в случае периодического потенциала  $\Phi(u)$  произвольного вида. Анализ показал, что структура краудиона описывается решением  $u(x, t)$ , имеющим форму кинка, который характеризуется набором параметров  $\lambda_0, \lambda_m, \lambda_m^*$ :

$$\lambda_0 = \sqrt{\omega / \Phi''(0)}, \quad \lambda_m = \sqrt{\omega / |\Phi''(b/2)|}, \quad (4)$$

$$\lambda_m^* = \sqrt{2\Phi_m / |\Phi''(b/2)|}.$$

Здесь  $\Phi''(u) = (d^2/du^2)\Phi(u)$ ,  $\Phi_m = \Phi(b/2)$  — высота барьера. Установлено, что для широкого класса однобарьерных симметричных потенциалов  $\Phi(u)$ , удовлетворяющих условию применимости континуального приближения, но отличающихся кривизной в точках минимума ( $u = 0$ ) и максимума ( $u = b/2$ ), для оценок характерной ширины статического кинка  $\lambda_s$  можно использовать формулу

$$\lambda_s = 2 \left[ \lambda_0 + \lambda_m \arcsin \frac{b}{4\lambda_m^*} \right]. \quad (5)$$

Второе слагаемое в (5) определяет ширину центральной части кинка, а первое — протяженность его «крыльев». При использовании параметра  $\lambda_s$  для характеристики краудиона следует учитывать специфику краудионных возбуждений в реальных трехмерных кристаллах: поскольку поля деформаций краудиона на больших расстояниях от его центра имеют степенную асимптотику [13,17],

параметр  $\lambda_s$  имеет смысл характерного размера ядра краудиона в трехмерном кристалле.

Краудионное возбуждение (как и любая устойчивая уединенная волна) может рассматриваться как частица, обладающая собственной полевой энергией  $E_s$  и эффективной массой покоя  $m_s$ . Для статического краудиона в модели Френкеля-Конторовой [16] эти величины определяются выражениями:

$$E_{s0} = \frac{1}{b} \int_0^b \sqrt{2\omega\Phi(u)} du, \quad m_s = \frac{m_a}{b} \int_0^b \sqrt{2\Phi(u)/\omega} du. \quad (6)$$

Учет упругой податливости (деформируемости) кристаллической матрицы может привести к существенной перенормировке значений этих характеристик краудиона [13].

Использование общих положений и выводов теории краудионов для интерпретации обусловленных ими физических эффектов предполагает дальнейшую детализацию теории, в первую очередь, решение следующих задач:

- установление критериев существования краудионных возбуждений в конкретных кристаллических структурах;
- выяснение условий, допускающих использование модели Френкеля-Конторовой и длинноволнового приближения для описания краудионов в тех или иных конкретных кристаллах;
- получение для конкретных кристаллов численных значений параметра  $\omega$ , явного выражения для потенциала кристаллического поля  $\Phi(u)$  и численных оценок для геометрических и энергетических характеристик краудионов.

До настоящего времени были выполнены только некоторые первые шаги на пути решения перечисленных выше задач. В частности, имеются компьютерные расчеты энергий статических краудионных конфигураций для нескольких кристаллов с ГЦК и ОЦК решетками, выполненные методами молекулярной динамики [2, 18–20].

В данной работе проведен комплексный анализ всех перечисленных выше вопросов для простых атомарных кристаллов с ГЦК и ОЦК структурой. Анализ базируется на использовании для описания межатомного взаимодействия в кристаллах классических эмпирических потенциалов: потенциала Ленарда-Джонса и обобщенного потенциала Морзе. Для плотноупакованных атомных рядов в таких кристаллах получены аналитические выражения для параметра  $\omega$  и потенциала кристаллического поля  $\Phi(u)$ , установлено выполнение усло-

вия слабой связи этих рядов с кристаллической матрицей, а также предложен алгоритм вычисления энергии, эффективной массы и ширины краудионов в этих рядах. Обсуждено влияние вида потенциала межатомного взаимодействия и температурной зависимости его параметров на параметры краудионов. В качестве конкретных примеров, для которых получены численные значения основных параметров кристаллического поля и краудионов, выбраны криокристаллы Ag и Kг с ГЦК решеткой, металлы Cu и Al с ГЦК решеткой и металлы  $\alpha$ - и  $\delta$ -Fe с ОЦК решеткой.

Для расчетов потенциалов кристаллического поля в данной работе разработан и применен новый алгоритм, основанный на представлении кристаллической решетки как совокупности параллельных атомных рядов. Такой метод расчета потенциалов кристаллического поля допускает естественное обобщение и может быть использован в случае сложных многоатомных решеток.

### 1. Анализ взаимодействия плотноупакованных атомных рядов с кристаллической матрицей

Рассмотрим одноатомные кристаллы с ГЦК и ОЦК решетками, в которых плотноупакованные ряды атомов ориентированы вдоль кристаллографических направлений типа  $\langle 110 \rangle$  и  $\langle 111 \rangle$  соответственно. Будем считать, что межатомное взаимодействие в кристаллах описывается парным центрально-симметричным потенциалом  $U(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  ( $\mathbf{r}$  и  $\mathbf{r}'$  — координаты двух произвольных атомов). Это предположение считается приемлемым при микроскопическом описании физических свойств отвердевших инертных газов и простых металлов, оно, как правило, широко используется при компьютерном моделировании атомных структур таких кристаллов и дефектов в них [21–24].

Выберем отдельный плотноупакованный ряд атомов, в котором будет рассматриваться краудионное возбуждение, — в дальнейшем этот ряд будем называть отсчетным. При расчете кристаллического поля  $\Phi(u)$  для атомов данного ряда, записанного в виде суммы (3), целесообразно использовать следующую процедуру:

- представить кристаллическую матрицу как совокупность атомных рядов, параллельных отсчетному;
- выполнить суммирование по узлам одного из таких рядов;
- выполнить суммирование по последовательности рядов.

Кристаллогеометрическое обоснование предлагаемой процедуры изложено в Приложении. Здесь

же отметим только главное обстоятельство, определяющее ее конструктивность: потенциал  $\Phi(u)$  является периодической функцией, поэтому удобно воспользоваться ее представлением в виде ряда Фурье, а предлагаемая процедура позволяет сравнительно просто получать такое представление в явном виде.

При вычислениях используем цилиндрическую систему координат с полярной осью  $0u$  вдоль отсчетного ряда. Найдем потенциал  $\varphi(u - hb, r_{\perp})$ , который создает в точке  $u$  полярной оси параллельный этой оси атомный ряд с периодом  $b$ , находящийся от нее на расстоянии  $r_{\perp}$ ,

$$\varphi(u - hb, r_{\perp}) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} U \left( \sqrt{r_{\perp}^2 + (u - hb - nb)^2} \right),$$

где  $h$  — дробная часть координаты атома на оси  $0u$ . С помощью известной формулы суммирования Пуассона [25]

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} f(n) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(z) e^{2\pi i n z} dz$$

после несложных преобразований получим выражение для  $\varphi$  в виде ряда Фурье

$$\begin{aligned} \varphi(u - hb, r_{\perp}) &= \frac{1}{2} \varphi_0(r_{\perp}) + \\ &+ \sum_{n=1}^{\infty} \varphi_n(r_{\perp}) \cos \left( \frac{2\pi n(u - hb)}{b} \right); \end{aligned} \quad (7)$$

здесь

$$\begin{aligned} \varphi_n(r_{\perp}) &= \frac{4}{b} \int_0^{\infty} U \left( \sqrt{r_{\perp}^2 + \xi^2} \right) \cos \left( \frac{2\pi n \xi}{b} \right) d\xi, \quad (8) \\ n &= 0, 1, 2, \dots \end{aligned}$$

Формула (7) позволяет потенциал кристаллического поля  $\Phi(u)$  для атомов отсчетного ряда, определяемый выражением (3), также записать в виде ряда Фурье. Как показано в Приложении, отсчетный ряд можно рассматривать как ось дискретного набора соосных цилиндрических поверхностей (координационных цилиндров) с номерами  $N$  и радиусами  $r_{\perp} = R_N$ , на которых расположены параллельные друг другу однотипные атомные ряды, составляющие матрицу. Координационный цилиндр с номером  $N$  содержит  $Z_N$

атомных рядов, которые могут быть сдвинуты по отношению к отсчетному ряду на дробную часть периода  $b$ , определяемую коэффициентом сдвига  $h_N$ . Величины  $R_N$ ,  $Z_N$  и  $h_N$  являются кристаллогеометрическими параметрами решетки, их значения для отсчетных рядов типа  $\langle 110 \rangle$  в ГЦК решетке и  $\langle 111 \rangle$  в ОЦК решетке приведены в Приложении. Изложенные выше соображения и формула (7) дают возможность представить потенциал  $\Phi(u)$  как сумму вкладов  $\varphi(u - h_N b, R_N)$  от последовательности координационных цилиндров.

При вычислении потенциала кристаллического поля для атомов плотноупакованного ряда в ГЦК решетке преимущество метода суммирования по координационным цилиндрам проявляется в полной мере, поскольку все атомные ряды, принадлежащие одному координационному цилиндру, имеют одинаковые сдвиги относительно отсчетного ряда и дают одинаковый вклад в искомый потенциал  $\Phi(u)$ . В случае ОЦК решетки в пределах отдельного координационного цилиндра атомные ряды разделены на две группы с различными сдвигами по отношению к отсчетному ряду, что несколько усложняет вычисления. Несмотря на указанное отличие, для обоих типов решеток можно предложить единообразную форму записи потенциала  $\Phi(u)$  в виде ряда

$$\Phi(u) = \sum_{n=1}^{\infty} \Phi_n \sin^2 \left( \frac{\pi n u}{b} \right), \quad (9)$$

коэффициенты которого вычисляются по формуле

$$\Phi_n = -2 \sum_{N=1}^{\infty} Z_N \varphi_n(R_N) \cos(2\pi n h_N). \quad (10)$$

Значения параметров  $b$ ,  $R_N$ ,  $Z_N$  и  $h_N$ , разумеется, различны для разных типов решеток (см. Приложение). В частности: для ГЦК решетки  $b = d^{(\text{ГЦК})}$  — период атомного ряда типа  $\langle 110 \rangle$ ; для ОЦК решетки  $b = d^{(\text{ОЦК})}$  — период атомного ряда типа  $\langle 111 \rangle$ ;  $d$  — величина базисных векторов соответствующих примитивных ячеек.

Формулы (9) и (10) справедливы для центрально-симметричного парного потенциала произвольного вида и имеют смысл, если существуют интегралы (8). Конкретный вид потенциала кристаллического поля  $\Phi(u)$ , определяемого формулой (9), зависит от величин и знаков коэффициентов  $\Phi_n$ . Легко показать, что потенциал  $\Phi(u)$  на одном периоде  $[0, b)$  имеет экстремумы в точках  $u = 0$  и  $u = b/2$ . Одно из условий механической устойчивости решетки — наличие минимума  $\Phi(u)$  в точке

$u = 0$ . Ниже будет показано, что все использованные в работе парные потенциалы  $U(r)$  дают для ГЦК и ОЦК решеток следующий результат:  $u = 0$  является точкой минимума, а точка  $u = b/2$  — точкой максимума функции  $\Phi(u)$ , т.е. выполняются неравенства

$$\Phi''(0) = 2 \left(\frac{\pi}{b}\right)^2 \sum_{n=1}^{\infty} n^2 \Phi_n > 0, \quad (11)$$

$$\Phi''\left(\frac{b}{2}\right) = 2 \left(\frac{\pi}{b}\right)^2 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n n^2 \Phi_n < 0.$$

Учитывая вышеперечисленные свойства потенциала  $\Phi(u)$  и используя (9), получаем выражение для его амплитуды

$$\Phi_m = \Phi(b/2) = \sum_{n=1}^{\infty} \Phi_{2n-1}. \quad (12)$$

Для решения перечисленных во Введении задач достаточно воспользоваться относительно простыми эмпирическими потенциалами двух типов, многократно апробированными при описании физических свойств различных кристаллов:

— двухпараметрическим ( $\epsilon, \sigma$ ) потенциалом Ленарда–Джонса

$$U(r) = 4\epsilon \left[ \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right], \quad (13)$$

который широко используется в физике крио-кристаллов [26];

— четырехпараметрическим ( $\epsilon, r_0, \alpha, m$ ) обобщенным потенциалом Морзе

$$U(r) = \frac{\epsilon}{m-1} \left\{ \exp[-m\alpha(r-r_0)] - m \exp[-\alpha(r-r_0)] \right\}, \quad (14)$$

который ранее использовался при описании механических свойств целого ряда кубических металлов, при этом параметр  $m$  варьировался в пределах от 1,25 до 6 [27] (классический потенциал Морзе является частным случаем (14) при  $m = 2$ ).

Подставляя (13) и (14) в формулу (8) и выполняя интегрирование, получим:

— для потенциала Ленарда–Джонса (13)

$$\Phi_n(R_N) = \frac{\pi\epsilon}{4} \exp\left(-\frac{2\pi n R_N}{b}\right) \times$$

$$\times \left[ \frac{1}{2^{5.5}} \left(\frac{\sigma}{b}\right)^{12} \sum_{k=0}^5 \frac{(4\pi n)^k (10-k)!}{k! (5-k)!} \left(\frac{b}{R_N}\right)^{11-k} - \left(\frac{\sigma}{b}\right)^6 \sum_{k=0}^2 \frac{(4\pi n)^k (4-k)!}{k! (2-k)!} \left(\frac{b}{R_N}\right)^{5-k} \right]; \quad (15)$$

— для обобщенного потенциала Морзе (14)

$$\Phi_n(R_N) = \frac{4\epsilon m \alpha R_N}{m-1} \left[ K_1 \left( z_{nm} \frac{R_N}{b} \right) \frac{\exp(m\alpha r_0)}{z_{nm}} - K_1 \left( z_{n1} \frac{R_N}{b} \right) \frac{\exp(\alpha r_0)}{z_{n1}} \right], \quad (16)$$

где  $z_{nm} = \sqrt{4\pi^2 n^2 + m^2 \alpha^2 b^2}$  и  $K_1(x)$  — функция Бесселя мнимого аргумента (модифицированная функция Бесселя третьего рода).

Дальнейший анализ потенциала  $\Phi(u)$  и его использование для получения характеристик краудионов возможны только для конкретных кристаллов методом компьютерных вычислений с привлечением приведенных в Приложении последовательностей величин  $R_N, Z_N$  и  $h_N$ , а также справочных данных о численных значениях параметров эмпирических потенциалов (13) и (14). Отметим только, что величины  $\Phi_n(R_N)$ , определяемые формулами (15) и (16), экспоненциально убывают по мере роста радиусов  $R_N$  и номера  $n$ , поэтому ряды (9) и (10) являются быстро сходящимися, и это обстоятельство значительно упрощает численный анализ. В частности оказалось, что для всех рассмотренных в данной работе конкретных примеров потенциала  $\Phi(u)$  с относительной точностью порядка 0,07–0,01 определяется первым членом ряда (9) (см. табл. 1–4), т.е. решеточный потенциал практически совпадает с модельным потенциалом, предложенным в классической работе Френкеля–Конторовой [14].

В заключение данного раздела запишем также выражения, удобные для вычислений величины энергетического параметра  $w$ , который характеризует межатомное взаимодействие в плотноупакованных атомных рядах. Подставляя (13) и (14) в формулу (2) и выполняя суммирование, получим:

— для потенциала Ленарда–Джонса (13)

$$w = 24\epsilon \left[ 26\zeta(12) \left(\frac{\sigma}{b}\right)^{12} - 7\zeta(6) \left(\frac{\sigma}{b}\right)^6 \right], \quad (17)$$

где  $\zeta(x)$  — дзета-функция Римана;

– для обобщенного потенциала Морзе (14)

$$w = \frac{\varepsilon m(\alpha b)^2}{4(m-1)} \times \left[ m \frac{\operatorname{ch}(m\alpha b/2)}{\operatorname{sh}^3(m\alpha b/2)} \exp(m\alpha r_0) - \frac{\operatorname{ch}(\alpha b/2)}{\operatorname{sh}^3(\alpha b/2)} \exp(\alpha r_0) \right]. \quad (18)$$

Описанный алгоритм можно использовать для вычисления потенциала кристаллического поля в сложной кристаллической решетке, элементарная ячейка которой содержит несколько сортов неидентичных атомов. Для этого следует решетку представить как совокупность подрешеток из атомов одного сорта и построить для каждой из подрешеток свою систему атомных рядов, а затем просуммировать вклады этих подрешеток, учтя их сдвиги в соответствии с векторами базиса кристаллической решетки.

## 2. Расчеты параметров потенциала кристаллического поля и краудионов

Детальному обсуждению проблем, связанных с компьютерным моделированием дефектов кристаллической решетки, посвящен ряд обзоров и монографий, например, [21–24]. К ключевым вопросам компьютерного эксперимента относятся выбор физической модели кристалла и адекватное описание взаимодействия атомов друг с другом. Строгий квантовомеханический анализ межатомных взаимодействий в реальном кристалле весьма сложен, поэтому, как правило, принимается ряд упрощающих предположений относительно характера взаимодействия и вида потенциала. В частности, в большинстве расчетов многочастичные силы не принимаются во внимание, и энергия кристалла записывается в виде суммы парных взаимодействий атомов.

Вклад многочастичных взаимодействий неодинаков в кристаллах с различными типами химической связи: он невелик в случае отвердевших благородных газов, но играет определяющую роль в металлических кристаллах. Хотя современная электронная теория металлов, в принципе, позволяет при описании межатомных взаимодействий последовательно учитывать электронную структуру металла, в частности, наличие электронов проводимости и структуру внутренних электронных оболочек, реализация этого пути при компьютерном моделировании металлических кристаллов является слишком сложной задачей. По этой причине для металлов чаще всего также

используются парные эмпирические потенциалы. Во всех случаях при выборе конкретных эмпирических потенциалов ориентиром служат два критерия: такие потенциалы должны правильно отражать основные особенности химической связи и записываться в виде достаточно простой аналитической функции. Наиболее простые парные эмпирические потенциалы используются при моделировании отвердевших инертных газов – двухпараметрические степенные функции. Специфика металлов, чаще всего, учитывается выбором парных потенциалов в виде показательных трех- или четырехпараметрических функций.

Атомарные криокристаллы представляются нам удобным модельным объектом для изучения физики краудионов. Широкий спектр свойств этих кристаллов описан, например, в монографии [26]. Все инертные газы, за исключением гелия, образуют кристалл с ГЦК решеткой. Атомы инертных газов имеют заполненные сферически-симметричные электронные оболочки и их взаимодействие с хорошей точностью можно аппроксимировать суммой парных потенциалов. Анализ многочастичных взаимодействий показал, что их вклад возрастает с увеличением порядкового номера инертного элемента и составляет 6% для ксенона.

В данной работе мы провели расчеты для аргона и криптона. Помимо малого относительного вклада многочастичных взаимодействий эти кристаллы характеризуются сравнительно малыми значениями квантового параметра де Бура, т.е. обладают относительно малыми амплитудами нулевых колебаний, и поэтому их можно рассматривать как обычные кристаллы с атомами, локализованными в узлах кристаллической решетки [9,26].

При описании свойств атомарных криокристаллов наиболее популярным является, по-видимому, потенциал Ленарда–Джонса (13). Значения параметров  $\sigma$  и  $\varepsilon$  обычно определяются из измерений в газовой фазе или по величине постоянной решетки (экстраполированной к 0 К) и величине энергии связи решетки. Величины, полученные рядом авторов, несколько отличаются друг от друга. Мы использовали значения параметров  $\sigma$  и  $\varepsilon$ , приведенные в монографии [26] на стр. 365.

Из металлов мы рассмотрели Cu и Al с ГЦК решеткой, а также  $\alpha$ - и  $\delta$ -Fe с ОЦК решеткой. При расчетах атомных конфигураций дефектов в кубических металлах взаимодействие между атомами, как правило, описывается с помощью потенциала Морзе или его обобщения (14). При определении параметров потенциала Морзе в ра-

ботах [28, 29] использовались экспериментальные значения параметра решетки, энергии связи решетки (на один атом) и модуля всестороннего сжатия. Дополнительно учитывалось требование выполнения критерия устойчивости Борна [30].

Параметры потенциала Морзе для некоторых металлов с кубической решеткой были определены в [28]. В работе [29] для Cu и Al были получены другие значения параметров потенциала Морзе и с его помощью были рассчитаны энергии дефектов упаковки, энергии и атомные конфигурации полных и расщепленных дислокаций. Значения параметров обобщенных потенциалов Морзе (14) для ряда кубических металлов при шести значениях  $m$  в интервале от 1,25 до 6 были рассчитаны в работе [27]. При расчете задавались значения параметра  $m$ , параметра решетки и упругих постоянных  $C_{11}$  и  $C_{12}$ . В данной работе мы использовали значения параметров парных потенциалов из работ [27–29], значения параметров решетки и энергии связи кристаллов были взяты из монографий [31–33].

В задачах компьютерного моделирования кристаллов отдельной проблемой является учет теплового расширения. При исследовании температурных зависимостей интересующих нас геометрических и энергетических параметров краудионов и решеточного потенциала мы учитывали только температурную зависимость параметра решетки, предполагая, что параметры парных потенциалов являются температурнонезависимыми величинами. Температурные зависимости параметров решетки для Ag и Kг были взяты из [26]. Для оценки значений параметров краудионов в Cu и Al при предплавильных температурах мы для определенности в качестве реперных точек взяли температуры плавления этих металлов и для них рассчитали значения параметров решеток, используя экспериментальные данные по тепловому расширению [34].

Железо известно в трех кристаллических модификациях. Две из них имеют ОЦК решетку: низкотемпературная  $\alpha$ -фаза является стабильной ниже температуры 1184 К, а высокотемпературная  $\delta$ -фаза стабильна выше температуры 1673 К. Мы провели расчеты для этих кристаллических модификаций с помощью одного потенциала Морзе, параметры которого найдены в [28]. Величины параметров решеток при нескольких значениях температуры приведены в [31].

### 2.1. Атомарные криокристаллы

Результаты численных расчетов для Ag и Kг при двух значениях температуры 5 К и 80 К представлены в табл. 1\*.

Из табл. 1 видно, что условие слабой связи выделенного атомного ряда и окружающей его матрицы, а также главное условие применимости длинноволнового приближения  $w/\Phi_m \gg 1$  можно считать выполненным при всех температурах. Свидетельствами в пользу такого вывода являются также полученные нами численные оценки ширины краудиона  $\lambda_s/b \approx 2,7$  и его эффективной массы  $m_s \approx 0,3m_a$ .

Обсудим более детально свойства потенциала  $\Phi(u)$ , который полностью определяется своими коэффициентами  $\Phi_n$ . Видно, что абсолютные значения этих коэффициентов быстро убывают с ростом номера  $n$  (по этой причине мы приводим значения лишь первых трех из них), причем их знаки чередуются. По существующей классификации [15,16] потенциалы кристаллического поля  $\Phi(u)$ , полученные нами для Ag и Kг, являются однобарьерными. Поскольку коэффициент  $\Phi_1 > 0$ , то согласно (11) в точке  $u = 0$  эти потенциалы имеют минимум, а в точке  $u = b/2$  — максимум. Амплитуда потенциала  $\Phi(u)$  с точностью порядка 0,2% определяется амплитудой его первой гармоники, так как вторая гармоника в (12) не изменяет амплитуду потенциала, а приводит лишь к изменению его формы:  $\Phi_1$  и  $\Phi_2$  имеют разные

Таблица 1

Параметры краудионов и потенциал кристаллического поля в криокристаллах

Кристалл	Ag		Kг	
	5	80	5	80
$T$ , К	5	80	5	80
$\Phi_1$ , эВ	0,12	0,08	0,17	0,13
$\Phi_2/\Phi_1 \cdot 10^2$	-6,6	-7,0	-6,6	-6,8
$\Phi_3/\Phi_1 \cdot 10^3$	1,5	1,6	1,5	1,5
$\Phi_m$ , эВ	0,12	0,08	0,17	0,13
$w$ , эВ	1,01	0,61	1,41	1,02
$w/\Phi_m$	8,36	7,54	8,39	7,89
$\lambda_s/b$	2,76	2,64	2,76	2,69
$m_s/m_a$	0,30	0,31	0,30	0,31
$E_{s0}$ , эВ	0,30	0,19	0,42	0,31

\* Известно, что для инертных отвердевших газов очень хорошо выполняется закон соответственных состояний, т. е. на шкале гомологических температур температурные зависимости решеточных характеристик таких кристаллов совпадают [26]. Данное обстоятельство позволяет распространить результаты табл. 1 и на Хе.

Таблица 2

знаки, и при учете  $\Phi_2$  склоны максимумов потенциала становятся несколько круче, а склоны минимумов — более пологими. Модуль отношения вторых производных в точках экстремумов потенциала составляет примерно 1,7 и слабо увеличивается с ростом температуры. При температуре 80 К абсолютные значения коэффициентов  $\Phi_n$  уменьшились примерно в 1,5 раза для Ag и в 1,3 раза для Kг, однако при этом относительные величины  $|\Phi_n/\Phi_1|$  возрастают лишь в пределах 6–8 %. Таким образом имеется тенденция к некоторому росту весьма малого вклада высших гармоник в потенциал  $\Phi(u)$  при увеличении температуры.

Величина параметра  $w$  с ростом температуры уменьшается в 1,7 раза для Ag и 1,4 раза для Kг. Именно температурная зависимость параметров  $w$  и  $\Phi_1$  определяет в основном температурную зависимость энергии краудиона. Как видно, энергия краудиона с ростом температуры уменьшилась примерно в 1,6 раз для Ag и в 1,3 раза для Kг. Однако параметры  $\lambda_s$  и  $m_s$  с ростом температуры изменяются слабо.

Энергия краудиона в атомарных кристаллах получилась достаточно большой: даже при предплавильных температурах в Ag она более чем в два раза превышает энергию связи атома в решетке, которая равна 0,08 эВ. Интересно отметить, что энергия связи для решеток Ag и Kг, вычисленная в рамках рассматриваемой модели при 80 К, уменьшилась лишь на 4% и 2% соответственно по сравнению с ее значением при 0 К.

В заключение отметим полезный для практических оценок результат: расчет энергии краудиона на основе лишь первой гармоники потенциала  $\Phi(u)$  (т.е. в рамках классической модели Френкеля–Конторовой) дает завышенное значение с погрешностью порядка 5%.

### 2.2. Металлы с ГЦК решеткой

Результаты численных расчетов для Cu представлены в табл. 2, а для Al — в табл. 3.

Условия существования краудионов и применимости длинноволнового приближения  $w/\Phi_m \gg 1$  и  $\lambda_s/b \gg 1$  для этих кристаллов выполняется значительно лучше, чем для кристаллов.

Общие закономерности, характерные для всех использованных нами потенциалов, следующие. Знаки первых нескольких коэффициентов  $\Phi_n$  чередуются, а их абсолютные значения убывают с ростом номера  $n$  гораздо быстрее, чем в случае кристаллов: отношение  $|\Phi_2/\Phi_1|$  составляет величину порядка  $10^{-2}$ , а величина  $\Phi_3/\Phi_1$  не превосходит значения  $5 \cdot 10^{-5}$ . Вследствие этого амплитуда потенциала  $\Phi(u)$  практически опреде-

Параметры краудионов и потенциал кристаллического поля в Cu

Потенциал	[27]			[28]	[29]	
$m$	1,25	2	6		2	
$\Phi_1$ , эВ	1,66	1,66	1,67	1,60	1,47	1,33
$\Phi_2/\Phi_1 \cdot 10^3$	-9,2	-9,7	-10,6	-10,6	-9,0	-9,5
$\Phi_3/\Phi_1 \cdot 10^5$	3,3	3,7	4,4	3,9	3,3	3,6
$\Phi_m$ , эВ	1,66	1,66	1,67	1,60	1,47	1,33
$w$ , эВ	24,5	25,5	28,9	24,3	23,3	20,3
$w/\Phi_m$	14,8	15,4	17,3	15,1	15,9	15,3
$\lambda_s/b$	3,34	3,41	3,62	3,38	3,46	3,39
$m_s/m_a$	0,23	0,23	0,22	0,23	0,23	0,23
$E_{s0}$ , эВ	5,70	5,83	6,22	5,58	5,24	4,64
$T$ , К			293			1356

Таблица 3

Параметры краудионов и потенциал кристаллического поля в Al

Потенциал	[29]		[28]	
$T$ , К	293	932	293	932
$\Phi_1$ , эВ	1,20	1,11	1,21	1,11
$\Phi_2/\Phi_1 \cdot 10^3$	-8,5	-8,9	-9,2	-9,7
$\Phi_3/\Phi_1 \cdot 10^5$	3,0	3,2	3,4	3,6
$\Phi_m$ , эВ	1,20	1,11	1,21	1,11
$w$ , эВ	19,5	17,4	19,0	16,9
$w/\Phi_m$	16,2	15,7	15,7	15,2
$\lambda_s/b$	3,50	3,44	3,44	3,38
$m_s/m_a$	0,22	0,23	0,23	0,23
$E_{s0}$ , эВ	4,33	3,93	4,30	3,87

ляется амплитудой его первой гармоники. Учет второй гармоники незначительно увеличивает крутизну склонов максимума и уменьшает крутизну склонов минимума, однако это уточнение практического значения не имеет.

Используемый в настоящее время при моделировании металлических кристаллов обобщенный потенциал Морзе (14) имеет дополнительный параметр  $m$ , что дает более широкие возможности его варьирования по сравнению с классическим потенциалом, для которого  $m = 2$ . В связи с этим целесообразно обсудить влияние величины  $m$  на изучаемые параметры кристаллического поля и краудионов. Анализируя краудионы в Cu, мы



провели расчеты для шести значений параметра  $m$  и установили, что зависимости от  $m$  всех изучаемых нами величин имеют монотонный характер. Поэтому для иллюстрации влияния вариаций  $m$  на величины расчетных параметров приведены результаты для стандартного значения  $m = 2$  и двух граничных значений:  $m = 1, 2, 5; 6$ . Из табл. 2 видно, что при изменении величины параметра  $m$  в указанных пределах все параметры потенциала кристаллического поля и параметры краудионов изменяются слабо. Замечена закономерность: чем больше порядковый номер гармоники, тем сильнее возрастает ее амплитуда при увеличении  $m$ . Однако, поскольку сами коэффициенты  $\Phi_n$ , начиная с  $n = 3$  весьма малы, эта закономерность имеет, по-видимому, лишь чисто теоретическое значение. Наиболее сильно с ростом  $m$  возрастает параметр  $w$ , что приводит к увеличению отношения  $w/\Phi_m$  примерно в 1,17 раза и собственной энергии краудиона  $E_{s0}$  примерно в 1,09 раз. Ширина краудиона и его эффективная масса изменяются гораздо слабее, причем с увеличением  $m$  отношение  $m_s/m_a$  убывает, а отношение  $\lambda_s/b$  возрастает. В целом можно сделать вывод, что варьирование формы потенциала с помощью изменения параметра  $m$  в (14) не приводит к существенному изменению численных значений параметров и появлению качественно новых закономерностей. Отметим также, что величины расчетных параметров существенно не изменяются при использовании разновидностей потенциалов Морзе, предложенных в работах [28,29].

Вычисление энергии связи для решетки Cu с помощью семейства потенциалов (14), с параметрами, предложенными в [27], дает при разных  $m$  разброс значений порядка 35%, при этом минимальное отличие от экспериментальной величины 3,5–3,6 эВ получено при  $m \approx 2$ .

По изложенным выше причинам для исследования влияния температуры на параметры краудионов мы ограничились расчетами с использованием только классического потенциала Морзе. Из табл. 2 и табл. 3 видно, что наиболее сильно с ростом температуры изменяются величина параметра  $w$  и энергия краудиона  $E_{s0}$ , примерно на 10–15%. Таким образом, температурная зависимость параметров потенциала кристаллического поля и краудионов в ГЦК металлах более слабая, чем в криокристаллах.

Для обоих металлов величина энергии краудиона превышает энергию связи атома в решетке. В случае Cu такое превышение составляет примерно 1,5 раза при 293 К и 1,32 раза при предплавленных температурах. В случае Al различие не-

сколько меньше: в 1,3 раза при 293 К и 1,2 раза при предплавленных температурах.

В заключение данного раздела обсудим еще один важный вопрос. Ранее энергия краудионной конфигурации атомов в кристаллах Cu была рассчитана в рамках дискретно-континуальной компьютерной модели, которая не предполагала абсолютной жесткости кристаллической матрицы. В первоначальном варианте модели [2] для энергии краудиона получено значение 3,20 эВ, а в усовершенствованном варианте [19] – 4,59 эВ. Последнее значение примерно на 20–30% меньше наших оценок, полученных в рамках недеформируемой (абсолютно жесткой) кристаллической матрицы. Из общей теории краудионов [13] следует, что такое различие всегда имеет место, а проведенное выше сравнение дает его знак и оценку масштаба.

### 2.3. Металлы с ОЦК решеткой

Результаты численных расчетов для  $\alpha$ - и  $\delta$ -Fe при нескольких температурах представлены в табл. 4.

Наиболее важный результат для ОЦК металлов состоит в том, что условие существования краудионов и применимости длинноволнового приближения  $w/\Phi_m \gg 1$  выполняется с большим запасом при всех температурах. При этом отношение  $w/\Phi_m$  в два раза больше, чем для ГЦК металлов. Это обстоятельство приводит к заметно большему численному значению ширины краудиона  $\lambda_s/b \approx 5,1$  и меньшему значению эффективной массы  $m_s/m_a \approx 0,15$ .

В случае ОЦК металлов абсолютные значения коэффициентов  $\Phi_n$  убывают также быстро с рос-

Таблица 4

Параметры краудионов и потенциал кристаллического поля в  $\alpha$ - и  $\delta$ -Fe

Кристалл	$\alpha$ -Fe		$\delta$ -Fe
$T, K$	293	1073	1698
$\Phi_1, \text{эВ}$	0,98	0,90	0,84
$\Phi_2/\Phi_1 \cdot 10^3$	5,5	5,7	5,9
$\Phi_3/\Phi_1 \cdot 10^5$	-3,0	-3,2	-3,4
$\Phi_m, \text{эВ}$	0,98	0,90	0,84
$w, \text{эВ}$	35,9	32,4	30,2
$w/\Phi_m$	36,7	36,2	35,9
$\lambda_s/b$	5,15	5,11	5,09
$m_s/m_a$	0,15	0,15	0,15
$E_{s0}, \text{эВ}$	5,35	4,87	4,57

том номера  $n$ , как и в случае ГЦК металлов. Однако имеется другой порядок чередования их знаков: первые два коэффициента  $\Phi_1$  и  $\Phi_2$  положительны. Поэтому учет второй гармоники в (9) увеличивает крутизну склонов минимума и уменьшает крутизну склонов максимума потенциала  $\Phi(u)$ . Это изменение невелико, так как модуль отношения вторых производных в точках экстремумов потенциала равен примерно 0,96, но тем не менее такая форма потенциала  $\Phi(u)$  сопряжена с уменьшением протяженности периферии краудиона и более резким выделением его центральной части. Вместе с тем, относительный вклад второй гармоники почти в два раза меньше, чем в случае ГЦК металлов, поэтому потенциал  $\Phi(u)$  в  $\alpha$ - и  $\delta$ -Fe наиболее близок к чисто гармоническому.

Влияние температуры на изучаемые параметры потенциала кристаллического поля и краудионов для  $\alpha$ - и  $\delta$ -Fe такого же порядка, как и для ГЦК металлов: энергия краудиона  $E_{s0}$  при изменении гомологической температуры от 0,16 до 0,94 уменьшается примерно в 1,17 раза. Величина  $E_{s0}$  превышает энергию связи атома в решетке  $\alpha$ -Fe примерно на 26% при 293 К и на 8% при предплавильных температурах.

В работе [35] было проведено машинное моделирование собственных локальных дефектов в ОЦК металлах и для энергии краудиона в  $\alpha$ -Fe получено значение  $\approx 4$  эВ. Оценка  $E_{s0}$ , полученная нами в приближении жесткой кристаллической матрицы, превышает эту величину примерно на 30%. Это расхождение позволяет оценить величину уменьшения энергии краудиона, обусловленного упругой релаксацией ОЦК решетки.

### Заключение

В работе проведен комплексный аналитический и численный анализ ряда вопросов, относящихся к проблеме краудионных возбуждений в простых атомарных кристаллах с ГЦК и ОЦК структурами. Получены следующие основные результаты.

Для расчетов потенциалов кристаллического поля разработан и применен новый алгоритм, основанный на представлении кристаллической решетки как совокупности параллельных атомных рядов. Для потенциала  $\Phi(u)$ , описывающего взаимодействие атома плотноупакованного ряда с кристаллической матрицей, получено аналитическое выражение в виде тригонометрического ряда. Получено также явное аналитическое выражение для энергетического параметра  $\omega$ , характеризующего межатомное взаимодействие внутри выделенного ряда. Расчеты выполнены в предположении,

что межатомное взаимодействие в кристаллах описывается парными эмпирическими потенциалами Ленарда–Джонса и Морзе.

Получены численные значения параметров потенциалов кристаллического поля для кристаллов Ag и Kг с ГЦК решеткой, металлов Cu и Al с ГЦК решеткой, металлов  $\alpha$ - и  $\delta$ -Fe с ОЦК решеткой. Показано, что в исследованных кристаллах форма потенциала  $\Phi(u)$  близка к моногармонической: вклад высших гармоник в кристаллах не превышает 7%, а в металлах он меньше 1%.

Показано, что главное условие слабой связи плотноупакованных рядов с кристаллической матрицей, допускающее существование краудионов и использование при их описании длинноволнового приближения, выполняется во всех исследованных кристаллах. Отношение величины  $\omega$  к амплитуде потенциала кристаллического поля  $\Phi_m = \max \Phi(u)$  имеет величину: для ГЦК кристаллов примерно 8, для ГЦК металлов примерно 15, а для ОЦК металлов может достигать значения 36. Во всех таких решетках характерная ширина краудиона в несколько раз превышает параметр плотноупакованного ряда.

Получены численные значения основных параметров краудионов: собственной энергии, эффективной массы и характерной длины, которые согласуются с имеющимися литературными данными.

Установлено, что использование приближения абсолютно жесткой кристаллической матрицы и одномерной модели Френкеля–Конторовой позволяет получать оценки энергии краудионов, завышенные примерно на 20–30% по сравнению со значениями, полученными вычислительными методами молекулярной динамики.

Авторы благодарны А. С. Ковалеву за интерес к работе и полезные обсуждения.

### Приложение

Хорошо известно, что решетку узлов идеально кристалла можно получить, бесконечно повторяя в пространстве одну элементарную ячейку с помощью тройки основных трансляций — некопланарных векторов  $\mathbf{d}_1$ ,  $\mathbf{d}_2$ ,  $\mathbf{d}_3$  [36]. Наряду с представлением о кристаллической решетке как о совокупности узлов в некоторых случаях целесообразно использовать представление об этой решетке как о совокупности прямолинейных параллельных атомных рядов. Такое представление возникает естественным образом, если при построении кристалла вначале осуществить все переносы элементарной ячейки с помощью одной из основных трансляций: например, повторив с по-

мощью трансляции  $\mathbf{d}_1$  какой-либо узел элементарной ячейки, получим бесконечный ряд идентичных точек с периодом, равным  $d_1$ . Оставшаяся пара трансляций осуществит параллельный перенос получившегося атомного ряда и сформирует систему однотипных рядов, состоящих из атомов одного сорта. Взаимное положение указанных систем атомных рядов и тип атомов в каждой системе однозначно определяется базисом кристаллической решетки, а число систем атомных рядов равно числу узлов элементарной ячейки. Напомним, что в случае решетки, состоящей из  $p$  сортов неидентичных атомов, элементарная ячейка содержит не менее  $p$  узлов.

Поскольку выбор элементарной ячейки (тройки основных трансляций  $\{\mathbf{d}_i\}$ ) неоднозначен, то и представление кристалла в виде совокупности атомных рядов также неоднозначно. При разбиении кристаллической решетки на совокупность атомных рядов, их направление может быть задано с помощью любого вектора из множества векторов, образованного всеми возможными тройками  $\{\mathbf{d}_i\}$ .

Если простая (одноатомная) кристаллическая решетка обладает примитивной ячейкой, то ее можно построить с помощью трансляций лишь одного узла. Примитивной ячейке ГЦК решетки отвечает тройка векторов, которые в декартовой системе координат, привязанной к осям симметрии 4-го порядка, имеют следующие компоненты:  $\mathbf{d}_1 = (a/2)(1, 1, 0)$ ,  $\mathbf{d}_2 = (a/2)(1, 0, 1)$ ,  $\mathbf{d}_3 = (a/2)(0, 1, 1)$ . Длина всех векторов одинакова и составляет  $d = a/\sqrt{2}$  ( $a$  — параметр решетки), что соответствует минимальному расстоянию между двумя атомами. Следовательно, одноатомная ГЦК решетка может быть получена с помощью двухмерной трансляции одного плотноупакованного атомного ряда, имеющего кристаллографическое направление типа  $\langle 110 \rangle$ .

Примитивной ячейке ОЦК решетки отвечает тройка векторов  $\mathbf{d}_1 = (a/2)(1, 1, 1)$ ,  $\mathbf{d}_2 = (a/2)(1, 1, -1)$ ,  $\mathbf{d}_3 = (a/2)(1, -1, -1)$ , имеющих одинаковую длину  $d = a\sqrt{3}/2$ , равную минимальному расстоянию между двумя атомами в этой решетке. Следовательно, одноатомная ОЦК решетка может быть получена с помощью двухмерной трансляции одного плотноупакованного атомного ряда, имеющего кристаллографическое направление типа  $\langle 111 \rangle$ .

Задание базисных векторов примитивных ромбоэдрических ячеек ГЦК и ОЦК решеток однозначно определяет совокупность плотноупакованных атомных рядов, из которых состоит простой кристалл. При этом, разумеется, в системе плотноупакованных рядов нет выделенных рядов - все

атомные ряды равноправны (изотипны). Однако описание решетки в косоугольном базисе не всегда оптимально, часто более удобно перейти к прямоугольной системе координат, совместив одну из ее осей, например, для определенности ось  $0x$ , с осью одного из плотноупакованных атомных рядов (назовем этот ряд отсчетным), поместив начало координат в один из его узлов. Тогда плоскость  $y0z$  совпадет с кристаллографической плоскостью типа  $\langle 110 \rangle$  в ГЦК решетке и с плоскостью типа  $\langle 111 \rangle$  в ОЦК решетке. Точки пересечения осей плотноупакованных рядов с этой плоскостью образуют плоские сетки, которые показаны на рис. 1.

В ГЦК решетке структура этих точек пересечения образована наложением двух равноразмерных прямоугольных (с отношением сторон  $1 : \sqrt{2}$ ) сеток, которые смещены друг относительно друга на половину диагонали прямоугольника. При этом узлы только одной сетки совпадают с узлами кристаллической решетки, и в них находятся атомы, а в узлах другой сетки атомов нет. Первой сетке соответствуют атомные ряды типа  $\langle 110 \rangle$ , которые не смещены вдоль оси  $0x$  относительно выбранного отсчетного ряда, а второй сетке соответствуют ряды, которые смещены вдоль своей оси на половину периода, равную  $a/(2\sqrt{2})$ .

В ОЦК решетке структура точек пересечения осей кристаллографических рядов направления  $\langle 111 \rangle$  с плоскостью  $\langle 111 \rangle$  образована наложением трех правильных треугольных сеток, состоящих из равносторонних треугольников, с длиной стороны равной  $\sqrt{2} a$  (такие сетки обычно называются плотноупакованными сетками  $3^6$  [37]). Эти сетки смещены друг относительно друга в направлении высоты треугольника на расстояние, равное  $2/3$  высоты, что составляет  $\sqrt{3}/2 a$ . Узлы только одной сетки совпадают с узлами кристаллической решетки, и ей соответствуют атомные ряды, которые не смещены вдоль оси  $0x$  относительно выбранного отсчетного ряда. Второй сетке соответствуют атомные ряды, которые смещены вдоль оси  $0x$  на  $1/3$  своего периода, равную  $\sqrt{3} a/6$ . Третьей сетке соответствуют атомные ряды, которые смещены вдоль оси  $0x$  на  $2/3$  своего периода, что составляет  $a/\sqrt{3}$ . Можно также считать, что эти ряды смещены вдоль оси  $0x$  на величину, равную  $-1/3$  своего периода.

Количественными характеристиками структуры локального окружения отсчетного ряда являются числа соседей (первых, вторых и т.д.) и соответствующие расстояния до них. В данном случае, естественно использовать согласованную с общепринятыми кристаллоструктурными поня-

тиями терминологию, поэтому далее будем использовать термины:  $N$ -ый координационный цилиндр с радиусом  $R_N$  и координационное число  $Z_N$  ( $N = 1, 2, \dots$ ).

II.1. Последовательность координационных цилиндров для ГЦК решетки

В случае ГЦК решетки значения радиусов координационных цилиндров и координационных чисел определяются следующими последовательностями:

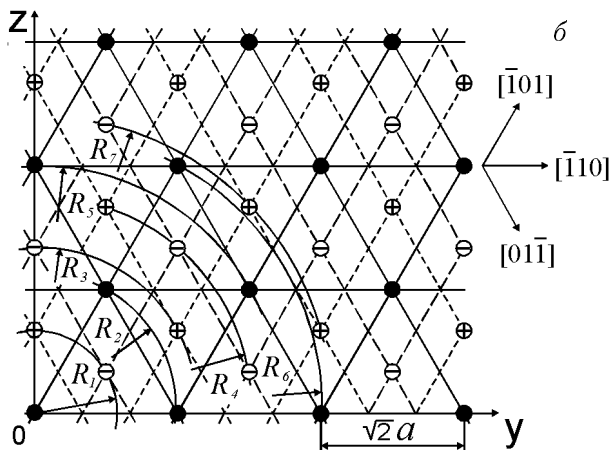
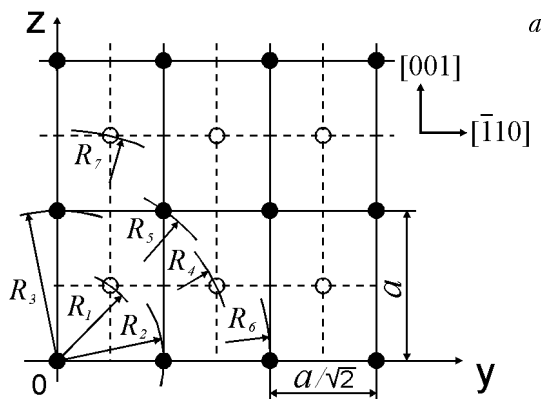


Рис. 1. Двумерные сетки, образованные точками пересечения осей плотноупакованных атомных рядов, имеющих кристаллографические направления  $\langle 110 \rangle$  в ГЦК решетке и  $\langle 111 \rangle$  в ОЦК решетке, с плоскостями  $(110)$  и  $(111)$  соответственно: ● — узлы сеток, совпадающие с узлами кристаллической решетки и занятые атомами; ○, ⊕, ⊖ — узлы сеток, не совпадающие с узлами решетки;  $R_1, R_2, \dots$  — радиусы нескольких первых координационных цилиндров. Двумерная сетка в ГЦК решетке, соответствующие узлам ○ атомные ряды сдвинуты вдоль оси  $Ox$  на половину периода  $a/\sqrt{2}$  (а); двумерная сетка в ОЦК решетке, соответствующие узлам ⊕ атомные ряды сдвинуты вдоль оси  $Ox$  на  $1/3$  периода ( $\sqrt{3} a/2$ ) в положительном направлении, соответствующие узлам ⊖ — на  $1/3$  периода ( $\sqrt{3} a/2$ ) в отрицательном направлении (б).

$$\frac{R_N}{d} \equiv \frac{\sqrt{2} R_N}{a} =$$

$$= \left\{ \frac{\sqrt{3}}{2}, 1, \sqrt{2}, \frac{\sqrt{11}}{2}, \sqrt{3}, 2, \frac{\sqrt{19}}{2}, \sqrt{6}, 3 \frac{\sqrt{3}}{2}, 2\sqrt{2}, \dots \right\}, \quad (П.1)$$

$$Z_N = \{4, 2, 2, 4, 4, 2, 4, 4, 8, 2, \dots\} \quad (П.2)$$

Анализ показывает, что все атомные ряды, принадлежащие одному координационному цилиндру, имеют одинаковое смещение (вдоль оси  $Ox$ ) относительно отсчетного ряда. Для характеристики этого сдвига каждому координационному цилиндру поставим в соответствие один безразмерный коэффициент  $h_N$ , который равен абсолютной величине сдвига в единицах  $d$  и принимает значение 0, если сдвиг равен 0, и значение  $1/2$ , если сдвиг равен  $d/2$ . Значения  $h_N$  даются последовательностью:

$$h_N = \{1/2, 0, 0, 1/2, 0, 0, 1/2, 0, 1/2, 0, \dots\} \quad (П.3)$$

II.2. Последовательность координационных цилиндров для ОЦК решетки

В случае ОЦК решетки последовательности значений радиусов координационных цилиндров и координационных чисел следующие:

$$\frac{R_N}{d} \equiv \frac{2R_N}{a\sqrt{3}} = \left\{ \frac{2\sqrt{2}}{3}, 2\sqrt{2/3}, \frac{4\sqrt{2}}{3}, \frac{2\sqrt{14}}{3}, 2\sqrt{2}, 4\sqrt{2/3}, \frac{2\sqrt{26}}{3}, \frac{8\sqrt{2}}{3}, \frac{2\sqrt{38}}{3}, 2\sqrt{14/3}, \dots \right\}, \quad (П.4)$$

$$Z_N = \{6, 6, 6, 12, 6, 6, 12, 6, 12, 12, \dots\} \quad (П.5)$$

Распределение сдвигов атомных рядов  $h_N$  имеет в этом случае следующие особенности. Все атомные ряды, принадлежащие одному координационному цилиндру, либо не смещены, либо смещены относительно отсчетного ряда. Если смещение имеет место, то всегда ровно половина атомных рядов, принадлежащих координационному цилиндру, имеет сдвиг  $+d/3$ , а другая половина имеет сдвиг  $-d/3$ . Отметив это обстоятельство, каждому координационному цилиндру поставим в соответствие один указатель абсолютной величины сдвига — коэффициент  $h_N$ , который принимает значение 0, если сдвиг равен нулю, и значение  $1/3$ ,

если сдвиги равны  $\pm d/3$ . Значения параметра  $h_N$  определяются следующей последовательностью:

$$h_N = \{1/3, 0, 1/3, 1/3, 0, 0, 1/3, 1/3, 1/3, 0, \dots\}. \quad (\text{П.6})$$

1. H. R. Paneth, *Phys. Rev.* **80**, 708 (1950).
2. L. Tewordt, *Phys. Rev.* **109**, 61 (1958).
3. Ж. Фридель, *Дислокации*, Мир, Москва (1967).
4. Дж. Маннинг, *Кинетика диффузии атомов в кристаллах*, Мир, Москва (1971).
5. A. Seeger, *Phys. Status. Solidi.* **38**, 235 (1970).
6. L. M. Brown, *Scr. Metall.* **8**, 1045 (1974).
7. C. H. Wao and W. Frank, *J. Nucl. Mater.* **137**, 7 (1985).
8. Ю. И. Головин, Ф. И. Тюрин, *ФТТ* **42**, 1818 (2000).
9. А. М. Косевич, *Физическая механика реальных кристаллов*, Наукова думка, Киев (1981).
10. А. М. Косевич, А. С. Ковалев, *Введение в нелинейную физическую механику*, Наукова думка, Киев (1989).
11. Дж. Л. Лем, *Введение в теорию солитонов*, Мир, Москва (1983).
12. А. С. Давыдов, *Солитоны в молекулярных системах*, Наукова думка, Киев (1988).
13. В. Д. Нацик, Е. И. Назаренко, *ФНТ* **26**, 283 (2000).
14. Я. И. Френкель, *Введение в теорию металлов*, Наука, Ленинград (1972).
15. O. M. Braun and Yu. S. Kivshar, *Phys. Rep.* **306**, № 1–2 (1998).
16. В. Д. Нацик, С. Н. Смирнов, Е. И. Назаренко, *ФНТ* **27**, 316 (2001).
17. А. М. Косевич, А. С. Ковалев, *Теория динамического краудиона в трехмерной сильно анизотропной среде*, в сб.: *Динамика дислокаций*, Наукова думка, Киев (1975).
18. A. Seeger and E. Mann, *J. Phys. Chem. Solids* **12**, 326 (1960).
19. R. A. Johnson and E. Brown, *Phys. Rev.* **127**, 446 (1962).
20. R. A. Johnson and E. Brown, *Phys. Rev.* **134**, A1329 (1964).
21. В. М. Агранович, В. В. Кирсанов, *УФН* **118**, 3 (1976).
22. В. В. Кирсанов, А. Н. Орлов, *УФН* **142**, 219 (1984).
23. *Дефекты в кристаллах и их моделирование на ЭВМ*, Ю. А. Осипьян (ред.), Наука, Ленинград (1980).
24. *Моделирование на ЭВМ дефектов в металлах*, Ю. А. Осипьян (ред.), Наука, Ленинград (1990).
25. Э. Маделунг, *Математический аппарат физики*, Физматгиз, Москва (1960).
26. *Криокристаллы*, Б. И. Веркин, А. Ф. Прихотько (ред.), Наукова думка, Киев (1983).
27. F. Milstein, *J. Appl. Phys.* **44**, 3825 (1973).

28. L. A. Girifalco and V. G. Weizer, *Phys. Rev.* **114**, 687 (1959).
29. R. M. J. Cotterill and M. Doyama, *Phys. Rev.* **145**, A465 (1966).
30. М. Борн, Х. Кунь, *Динамическая теория кристаллических решеток*, изд-во Иностранной лит., Москва (1958).
31. А. Гинье, *Рентгенография кристаллов*, Государств. изд-во физ.-мат. лит., Москва (1961).
32. *Физико-химические свойства элементов*, Г. В. Самсонов (ред.), Наукова думка, Киев (1965).
33. Ч. Киттель, *Введение в физику твердого тела*, Гл. ред. физ.-мат. лит. Наука, Москва (1975).
34. С. И. Новикова, *Тепловое расширение твердых тел*, Наука, Москва (1974).
35. J. M. Harder and D. J. Bacon, *Philos. Mag.* **A58**, 165 (1988).
36. Ю. И. Сиротин, М. П. Шаскольская, *Основы кристаллофизики*, Гл. ред. физ.-мат. лит. Наука, Москва (1975).
37. У. Пирсон, *Кристаллохимия и физика металлов и сплавов*, Ч. 1, Мир, Москва (1977).

### Crowdions in monatomic cryocrystals and metals with fcc and bcc lattices

V. D. Natsik, S. N. Smirnov, and Y. I. Nazarenko

Numerical values of the parameters of crystal field potentials and crowdions (self-energy, effective mass, and characteristic width) are obtained for Ar and Kr cryocrystals with a fcc lattice, Cu and Al metals with a fcc lattice, and  $\alpha$ - and  $\delta$ -Fe metals with a bcc lattice. The calculations are made under the assumption that the interatomic interaction in the crystals is described by the pair empirical Lennard-Jones and Morse potentials. A new algorithm based on the representation of the crystal lattice as a set of parallel atomic rows is elaborated and used to calculate the crystal field potentials. For the potential describing the interaction of a close-packed row atom with the crystal matrix an analytical expression is obtained as a trigonometric series. An explicit analytical expression for the energy parameter that characterizes the interatomic interaction inside the distinguished row is derived. It is shown that the main condition of the weak bond of the close-packed rows with the crystal matrix admitting the existence of crowdions and the use of the long-wave approximation in their description is met for all the crystals studied.