

Литература

1. Подковка В.П., Сизоненко Н.Р., Старенченко С.В., Тайлашев А.С., Козлов Э.В. Исследование кинетики роста и определение размеров антифазных доменов в упорядоченных сплавах // В сб.: Планарные дефекты в упорядоченных сплавах и интерметаллидах. – Барнаул, 1989. – С. 63–68.
2. Ландау Л.Д. К теории фазовых переходов. I, II. / Собр. тр. – М.: Наука, 1969. – Т.1. – С. 234–261.
3. Сиротин Ю.И., Шаскальская М.П. Основы кристаллофизики. – М.: Наука, 1979. – 639 с.
4. Гуфан Ю.М. Структурные фазовые переходы. – М.: Наука, 1982. – 304 с.
5. Изюмов Ю.А., Сыромятников В.Н. Фазовые переходы и симметрия кристаллов. – М.: Наука, 1984. – 248 с.
6. Guymont M. Domain structures arising from transitions between two crystals whose space groups are group-subgroup related // Phys. Rev. B. – 1978. – V. 18. – № 10. – P. 5385–5393.
7. Guymont M. Symmetry analysis of structural transitions between phases not necessarily group-subgroup related. Domain structures // Phys. Rev. B. – 1981. – V. 24. – № 5. – P. 2647–2655.
8. Tendeloo G.V., Amelinckx S. Group – theoretical considerations concerning domain formation in ordered alloys // Acta Cryst. – 1974. – V. A30. – P. 31–440.
9. Любарский Г.Я. Теория групп и ее применение в физике. – М.: Физматгиз, 1958. – 355 с.
10. Ковалев О.В. Неприводимые представления пространственных групп. – Киев: Изд-во АН УССР, 1961. – 153 с.
11. Sakai M., Mikkola D.E. The growth of antiphase domains of Cu_3Pt and Cu_3Au // Scripta Met. – 1980. – V.14. – № 6. – P. 1635–1641.
12. Wondratschek H. Twin domains and antiphase domains // Acta Cryst. – 1976. – С. A32. – Part 4. – P. 664–666.
13. Матвеева Н.М., Козлов Э.В. Упорядоченные фазы в металлических системах. – М.: Наука, 1989. – 248 с.

УДК 548.4:548.313

Т.Я. Голубенко, Э.В. Козлов

ВЛИЯНИЕ ПЛОСКОСТИ ЗАЛЕГАНИЯ НА ЭНЕРГИЮ АНТИФАЗНЫХ ГРАНИЦ В СВЕРХСТРУКТУРЕ $L1_2$

Проблема ориентационной зависимости энергии антифазной границы (АФГ) была поставлена давно, практически с самого начала изучения АФГ [1, 2]. Рентгеноструктурное и электронномикроскопическое исследования АФГ в сплавах со сверхструктурой $L1_2$ показали, что они стремятся залегать в плоскостях с определенной кристаллографической ориентацией, и тип плоскости меняется от сплава к сплаву [3–6].

Теоретическое рассмотрение энергии АФГ в рамках парного межатомного взаимодействия требует учета нескольких координационных сфер. Кристаллогеометрия АФГ такова, что аналитическая зависимость энергии АФГ от кристаллографических индексов $h k l$ в общем случае получена быть не может. Для определения зависимости энергии АФГ от кристаллографических индексов плоскости залегания требуется подсчет изменения числа одноименных и разноименных связей на каждой координационной сфере через плоскость АФГ.

Решение задачи об ориентационной зависимости энергии АФГ имеет значение, выходящее за рамки проблемы самих АФГ. Дело в том, что закономерности превращения порядок-беспорядок и температурная зависимость параметра дальнего порядка у различных сплавов со сверхструктурой $L1_2$ заметно отличаются [7], и причина этого прежде всего в различной зависимости энергии упорядочения от номера координационной сферы у разных сплавов.

В настоящее время единственный способ получения сведений о величине энергии упорядочения на нескольких координационных сферах лежит в анализе экспериментальных данных о преимущественной ориентации АФГ. Поэтому теоретическое решение задачи анизотропии энергии АФГ является актуальным.

Удельная энергия АФГ γ есть разность энергии кристалла с АФГ E_1 и без нее E_0 , приходящаяся на единицу площади:

$$\gamma = \frac{E_1 - E_0}{S} \quad (1)$$

где S – площадь АФГ. В настоящей работе рассмотрение ведется в рамках приближения парного меж-

атомного взаимодействия с учетом первых трех координационных сфер. Энергия упорядочения V_i :

$$V_i = V_{AA}^i + V_{BB}^i - 2V_{AB}^i, \quad (2)$$

где i – номер координационной сферы. Здесь используется модель жесткой решетки с энергией взаимодей-

ствия, не зависящей от степени порядка и наличия АФГ.

Попытка Флинна [8] и других авторов [9, 10] получить единое аналитическое выражение для энергии ориентированной любым образом неравновесной АФГ, несмотря на свою широкую известность, оказалась неверной. Это было показано простым пересчетом энергии АФГ.

Поэтому здесь был избран другой путь решения задачи об ориентационной зависимости энергии АФГ. Подсчетом числа правильных и неправильных связей были получены выражения для энергии ряда консервативных и неконсервативных границ, залегающих в плоскостях с низкими индексами. Первая краткая публикация настоящих авторов была в [11], позже аналогичные формулы опубликованы в работе М.Д. Старостенкова [12]. Вектор сдвига для всех АФГ $\frac{1}{2}$ [110]. В настоящей работе рассмотрение ограничено исключительно т/д неравновесными свежееобразованными АФГ (классификацию изменения атомной структуры на АФГ и в ее окрестности см. в [13–15]). Рассчитана ориентационная зависимость энергии ряда АФГ в сверхструктуре $L1_2$ как для стабильной, так и метастабильной конфигураций в пространстве межатомных взаимодействий. Плоскости залегания и формулы для энергии АФГ представлены в табл. 1. Она содержит выражения для энергии восьми АФГ консервативных и неконсервативных, залегающих в плоскостях куба, додекаэдра, октаэдра и типа (112). Подсчет числа правильных и неправильных связей проводился с помощью рисунков соответствующих АФГ. Поскольку атомная структура основных АФГ в литературе отсутствует, то для примера соответствующее пространственное расположение атомов изображено на рис. 1, 2. Здесь изображены неконсервативные октаэдрическая и додекаэдрическая границы. Консервативные границы других ориентаций имеются на рисунках в работе [8].

Данные табл. 1 были использованы для нахождения области относительной стабильности различных АФГ, т. е. таких областей, где энергия АФГ указанной ориентации меньше энергий всех других рассмотренных ориентаций. Результаты представлены на рис. 3, 4. Изображение областей стабильности АФГ дается в плоскости относительных координат $\frac{V_2}{V_1}; \frac{V_3}{V_1}$

соответственно для случаев $V_1 > 0$ и $V_1 < 0$. При сделанных приближениях полученные рис. 3, 4 относятся к любому сплавам со сверхструктурой $L1_2$.

Нулевые значения энергии АФГ рассматриваемых ориентаций дают соответствующие прямые в плоскости этих рисунков, уравнения которых приведены в табл. 2. Парное равенство энергий АФГ и соответствующие уравнения линий приведены в табл. 3.

В плоскости рисунков 3, 4 помимо области стабильности сверхструктуры $L1_2$ имеются области стабильности DO_{22} и $L1_3$, а также область распадающихся сплавов (впервые области стабильности сверхструктур опубликованы в [16]). Естественно, АФГ рассматри-

ваются в области существования сверхструктуры $L1_2$. Из рисунков видно, как для случая $V_1 > 0$, так и для $V_1 < 0$ нулевое значение энергии консервативной кубической границы лежит на границе стабильности фаз $L1_2$ и DO_{22} . В общих чертах картина, представленная на рис. 3 и 4, подтверждает материалы статьи [17], где проблема ориентационной зависимости энергии АФГ рассмотрена авторами совсем с других позиций. Конечно, здесь описание значительно детальнее. Область существования кубических сдвиговых АФГ имеет ту же форму и расположена в том же районе области существования сверхструктуры $L1_2$. Линия изотропии энергии АФГ в [17] близка к линиям равных энергий кубических сдвиговых границ с границами по додекаэдру (110) и по плоскости (112). Полной изотропии энергии АФГ в области существования сверхструктуры $L1_2$ практически нет. Равенство энергий различных АФГ наступает на разных линиях.

При $V_1 > 0$ с ростом V_3 наиболее вероятными становятся границы, расположенные в плоскости додекаэдра, причем природа их не имеет значения, они могут быть как сдвиговые, так и неконсервативные. При положительных V_2 существует узкая область, где предпочтительны границы по (112). При относительно больших значениях V_2 и отрицательных V_3 появляется область, в которой предпочтительны неконсервативные АФГ по плоскости куба.

Если $V_1 < 0$, то картина области наименьших значений энергий различно ориентированных АФГ иная. На значительной области изменения энергии упорядочения предпочтительной оказывается неконсервативная граница плоскости куба. Заметим, однако, что учет вкладов типа V_{AA}, V_{BB} [14] в энергии неконсервативных границ, а также учет объемных вкладов в энергию АФГ и ряда других, возможно, повысят энергию неконсервативных границ. И тогда для ряда сплавов вместо неконсервативных границ (100) будут предпочтительны (001). И область существования додекаэдрических АФГ при $V_1 < 0$ расширится. Однако учет этих факторов лежит за пределами модели, используемой в настоящей работе.

Из рис. 3 и 4 следует вывод, что в сверхструктуре $L1_2$ в основном должны наблюдаться АФГ, расположенные по плоскостям с низкими индексами. Практически повсеместно именно этот факт наблюдается на эксперименте [3–7]. Кроме того, надо отметить, что имеется возможность правильности построения области существования $L1_2$ сверхструктуры, выполненного в работе [16]. Линия с нулевым значением энергии АФГ ориентации (111) нигде не пересекает области существования $L1_2$ сверхструктуры. Тот факт, что схемы рис. 3 и 4 не предсказывают наиминимальные энергии для октаэдрических границ, подтверждается экспериментально [13]. Ни в одном из исследованных там сплавов такие границы не были предпочтительны.

Из сопоставления рис. 3 и 4 с экспериментальными данными о плоскостях АФГ в различных сплавах можно сделать вывод, что сплавы разнообразны по зависимости энергии упорядочения от номера координационной сферы, и дальное действие в них существенно. Кроме того, следует, что появлению в сплаве длиннопериодической структуры $L1_2(M)$ предшествует явный избыток кубических АФГ, причем для сплавов со сверхструктурой $L1_2(MM)$ они, в основном, неконсервативные. Экспериментально исследованные сплавы рассеяны на значительной части области существования $L1_2$ сверхструктуры в плоскости координат $\frac{V_2}{V_1}; \frac{V_3}{V_1}$, где каждому сплаву соответствует неко-

торая точка на рис. 3 и 4. Уменьшению относительной доли консервативных кубических границ в следующей последовательности экспериментально исследованных сплавов: $Ni_3Pt \rightarrow Cu_3Au \rightarrow Pd_3Fe \rightarrow Ni_3Fe \rightarrow Ni_3Mn \rightarrow$

Cu_3Pt соответствует удаление от нижней границы устойчивости сверхструктуры $L1_2$. Следовательно, для указанной последовательности сплавов значение V_3 будет относительно расти.

Сопоставляя литературные данные по склонности сплавов к анизотропии залегания АФГ с рис. 3 и 4, можно заключить, что в сплавах $Ni_3Mn, Pd_3Fe, Ni_3Fe, Ni_3Ge$ значение V_2 положительно и меньше, чем в сплавах $Cu_3Au, Ni_3Pt, Cu + 20 \text{ ат.}\% Pd$.

В заключение следует отметить, что несмотря на значительные ограничения теории, она позволяет поновому интерпретировать экспериментальные данные. Оказывается возможным оценить относительную роль взаимодействия на разных координационных сферах в различных сплавах со сверхструктурой $L1_2$. Тем самым удастся из данных о преимущественной кристаллографической ориентации АФГ получить сведения о межатомном взаимодействии.

Таблица 1

Формулы для расчета энергий АФГ с вектором сдвига $\frac{1}{2} [110]$

Плоскость консервативных АФГ	Плоскость неконсервативных АФГ	Энергия АФГ на единицу площади
(001)		$\frac{1}{a^2}(-V_2 + 4V_3)$
	(100)	$\frac{1}{a^2}(2V_1 - V_2 + 2V_3)$
($\bar{1}10$)	(110)	$\frac{1}{a^2\sqrt{2}}(V_1 - 2V_2 + 2V_3)$
($\bar{1}11$)	(111)	$\frac{1}{a^2\sqrt{3}}(V_1 - 3V_2 + 4V_3)$
($\bar{1}12$)	(112)	$\frac{1}{3a^2}(2V_1 - 5V_2 + 5V_3)$

Таблица 2

Уравнения линий нулевых значений энергий АФГ

Ориентация АФГ	Уравнение линии
(001)	$\frac{V_2}{V_1} - 4 \frac{V_3}{V_1} = 0$
(100)	$\frac{V_2}{V_1} - 2 \frac{V_3}{V_1} - 2 = 0$
(110)	$2 \frac{V_2}{V_1} - 2 \frac{V_3}{V_1} - 1 = 0$
(111)	$3 \frac{V_2}{V_1} - 4 \frac{V_3}{V_1} - 1 = 0$
(112)	$5 \frac{V_2}{V_1} - 5 \frac{V_3}{V_1} - 2 = 0$

Таблица 3

Уравнения линий попарного равенства энергий АФГ

Ориентации АФГ	Уравнения линий
$E(001)=E(100)$	$1 - \frac{V_3}{V_1} = 0$
$E(110)=E(001)$	$(2 - \sqrt{2}) \frac{V_2}{V_1} + 2(1 + 2\sqrt{2}) \frac{V_3}{V_1} - 1 = 0$
$E(110)=E(100)$	$(2 - \sqrt{2}) \frac{V_2}{V_1} + (2\sqrt{2} - 2) \frac{V_3}{V_1} + 2\sqrt{2} - 1 = 0$
$E(001)=E(111)$	$(3 - \sqrt{3}) \frac{V_2}{V_1} + 4(\sqrt{3} - 1) \frac{V_3}{V_1} - 1 = 0$
$E(110)=E(111)$	$(3\sqrt{2} - 2\sqrt{3}) \frac{V_2}{V_1} + (2\sqrt{3} - 4\sqrt{2}) \frac{V_3}{V_1} + \sqrt{3} - \sqrt{2} = 0$
$E(100)=E(111)$	$(3 - \sqrt{3}) \frac{V_2}{V_1} + 2(\sqrt{3} - 2) \frac{V_3}{V_1} + 2\sqrt{3} - 1 = 0$
$E(001)=E(112)$	$2 \frac{V_2}{V_1} + 7 \frac{V_3}{V_1} - 2 = 0$
$E(100)=E(112)$	$2 \frac{V_2}{V_1} + \frac{V_3}{V_1} + 4 = 0$
$E(110)=E(112)$	$(5\sqrt{2} - 6) \frac{V_2}{V_1} + (6 - 5\sqrt{2}) \frac{V_3}{V_1} + 3 - 2\sqrt{2} = 0$
$E(111)=E(112)$	$(9 - 5\sqrt{3}) \frac{V_2}{V_1} + (5\sqrt{3} - 12) \frac{V_3}{V_1} + 2\sqrt{3} - 3 = 0$

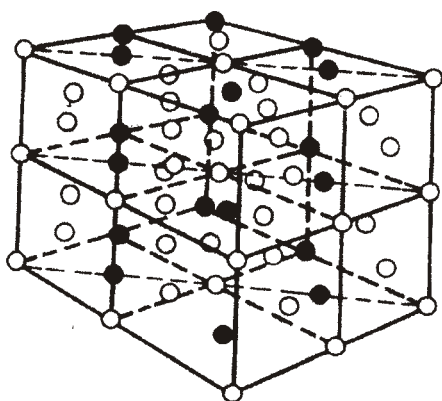


Рис.1. АФГ типа 1/2 [110] (110)

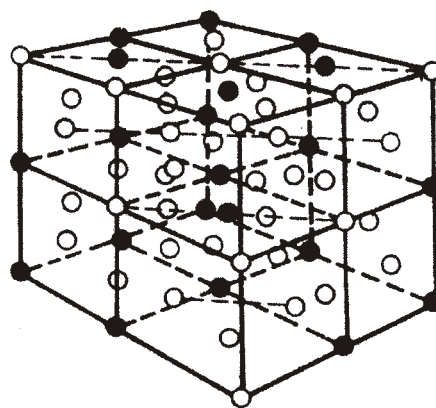


Рис.2. АФГ типа 1/2 [110] (111)

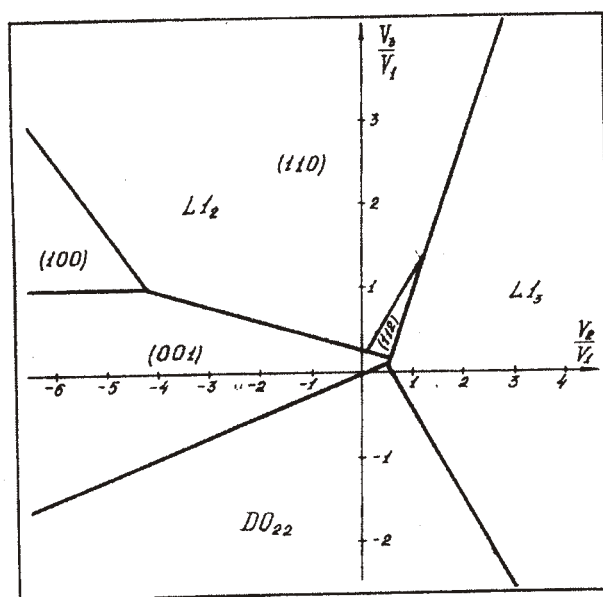


Рис. 3. Области относительной стабильности различно ориентированных АФГ для случая $V_1 > 0$

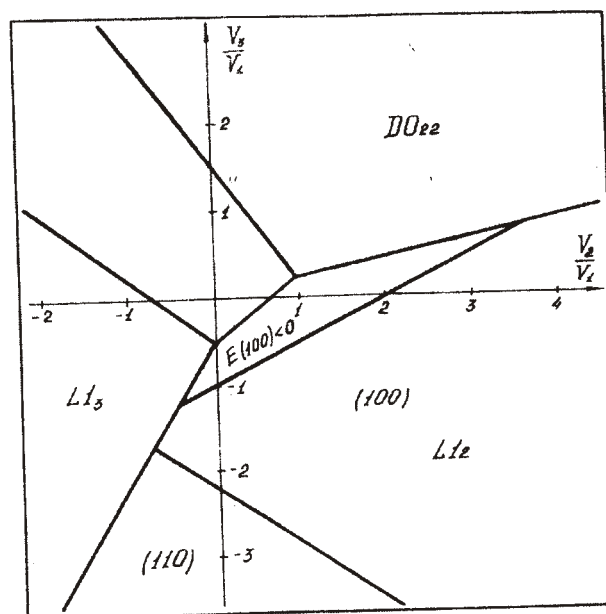


Рис. 4. Области относительной стабильности различно ориентированных АФГ для случая $V_1 < 0$

Литература

1. Sakai M., Mikkola D.E. // Met. Trans. - 1971. - V. 2. - P. 1635-1641.
2. Mekkola D.E., Cohen J.B. // Acta Met. - 1966. - V. 14. - P. 105-122.
3. Козлов Э.В., Старенченко С.В. // Изв. вузов. Физика. - 1980. - № 3. - С. 70-74.
4. Подковка В.П., Сизоненко Н.Р., Старенченко С.В., Тайлашев А.С., Козлов Э.В. Планарные дефекты в упорядоченных сплавах и интерметаллидах. - Барнаул, 1989. - С. 63-68.
5. Пушкарева Г.В., Мартынов Е.И., Подковка В.П., Конева Н.А., Козлов Э.В. // Изв. вузов. Физика. - 1977. - № 7. - С. 146-147.
6. Козлов Э.В., Тайлашев А.С. // ФММ. - 1977. - Т. 43. - № 3. - С. 510-514.

7. Матвеева Н.М., Козлов Э.В. Упорядоченные фазы в металлических системах. М.: Наука, 1989. – 248 с.
8. Flinn P.A. // Trans. Met. Soc. AIME. – 1960. – V. 218. – P. 145–157.
9. Cupschalk S.G., Brown N. // Acta Met. – 1968. – V. 16. – № 5. – P. 657–666.
10. Marcinkowski M.J., Brown N. // J. Appl. Phys. – 1962. – V. 33. – № 2. – P. 537–552.
11. Голубенко Т.Я., Козлов Э.В. // Тезисы зонального семинара по прогрессивным методам упрочнения деталей машин и инструмента. – Томск. – 1980. – С. 39.
12. Старостенков М.Д., Демьянов Б.Ф. // Металлофизика. – 1985. – № 10. – С. 128–130.
13. Козлов Э.В. // Кристаллическая структура и свойства металлических сплавов. – М.: Наука, 1978. – С. 110–118.
14. Старостенков М.Д. // Изв. вузов. Физика. – 1992. – № 2. – С. 51–56.
15. Царегородцев А.И., Горлов Н.В., Демьянов Б.Ф., Старостенков М.Д. // ФММ. – 1984. – Т. 58. – Вып. 2. – С. 336–343.
16. Штерн Д.М., Кормин Н.М., Козлов Э.В. // Изв. вузов. Физика. – 1980. – № 9. – С. 22–26.
17. Пушкарева Г.В., Мартынов В.И., Емельянов В.Н., Голубенко Т.Я., Козлов Э.В. // Изв. вузов. Физика. – 1979. – № 3. – С. 59–61.

V.A. Kilin, D.A. Lazarev, Dm.A. Lazarev, V.M. Zelichenko, M.Ya. Amusia, G. Mentzel,
K.-H. Scharfner and H. Schmoranzner

THE SINGLE-PHOTON DOUBLE-IONIZATION OF NE VALENCE SHELL

Among the first theoretical attempts to interpret the single-photon double-ionization process in many-electron atoms, Carlson (1967) has proposed the shake off model. However, he found that the simple shake off model fails in the case of double ionization of the same shell. Fundamental results for the DPI cross sections of the Ne and Ar valence shells have been obtained by Carter and Kelly (1977) within the framework of the MBPT. Only qualitative agreement with the experiments has been achieved in this work as well as by Chang et al (1971, 1975). Namely, the cross sections for single-photon double ionization of the Ne L-shell into the $2s\ 2p^5\ ^3P^o$ and $^1P^o$ and the $2s^0\ 2p^6\ ^1S^e$ states have been measured by Scharfner et al (1993) for energies from threshold up to 150 eV, using the photon-induced fluorescence spectroscopy (PIFS) method (Scharfner et al 1990 and further references therein). A comparison of the summed experimental $^3P^o$ and $^1P^o$ cross sections with the MBPT calculations by Carter and Kelly 1977 reveals a discrepancy of 50%.

The general conclusion to be drawn from both the experimental and theoretical works is that the origin of the intensity for multiple ionization, especially in the valence region, is the electron correlations involved. Furthermore, the importance of the physical approximation used, in particular the choice of the potential for calculating photoelectron wavefunctions, is under discussion (Kelly 1977). To date, no state selective theoretical results have been presented which could distinguish the states of a doubly-photoionized valence shell and contain a detailed analysis of the emitted photoelectron spectra.

Some examples of different physical mechanisms of the single-photon multiple ionization are presented in Figure 1. In fact two essentially different mechanisms of multiple photoionization (PI) can be considered. The first one is the multi-step mechanism. It is valid if the exciting-photon energy is large enough to ionize an inner atomic shell. In this case the Auger decay (Figure 1. a) or a

cascade of Auger decays, the autoionization (1. b) and the double autoionization of a resonantly-excited state (1. c), the double Auger (1. d) and the satellite Auger (1. e) decay of an inner-shell vacancy may result in ejecting electron(s) in the second step of the DPI process, in addition to the primary photoelectron. Thus, the process of multiple ionization can be considered to proceed via two or more consecutive steps, of which the first is the single PI of the atom.

Another mechanism of the multiple PI occurs if the exciting-photon energy is relatively small, so that only valence shells can be ionized. Here the multi-step mechanism of ionization is forbidden because of the energy conservation law. Nevertheless the experimental data (Carlson 1967, Wight et al 1976, Samson and Haddad 1974, Schmidt et al 1976, El Sherbini and Van der Wiel 1972, Eckhardt and Scharfner 1983, Scharfner et al 1987, 1993) show that multiple photoionization can be even quite significant in this exciting-photon energy region.

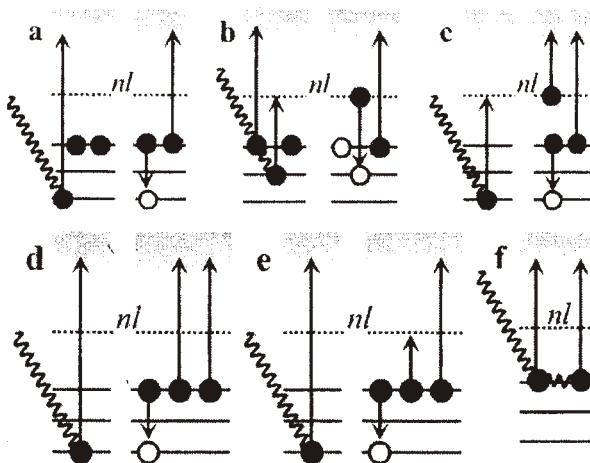


Figure 1

For instance, the production ratio Xe^{++}/Xe^+ can reach up to 40% (El Sherbini and Van der Wiel 1972). Hence,