

# Альфа Төмрийн Уян Харимхайн Тогтмолуудыг Фононы Спектрээс Тооцоолох нь

А. Дулмаа\*, Н. Цогбадрах, Р. Галбадрах  
МУИС, ШУС, Физикийн тэнхим

Борн–вон–Карманы онолоор эзлэхүүн төвлөсөн шоо (ЭТШ) тогтоцтой  $\alpha$ -Fe монокристаллын фононы спектрын [100]L, [100]T, [110]L ба [111]T чиглэлийн дагуу фиттинг хийж уян харимхайн тогтмолуудыг тооцоолох боломжтой болохыг харуулав.

PACS numbers: 89.30.ag, 91.65.Pj, 91.65.Qr, 42.65.Dr

## I. УДИРТГАЛ

Кристалл дээрх бөөмсийн (нейтрон, фотон) сарнилын үзэгдлүүд, кристалл доторх дууны долгионы тархалт, соронзон эрэмбэлэлт, харимхайн энергийн тооцоолол зэрэгт уян харимхайн  $C_{ij}$  тогтмолууд ач холбогдолтой байдаг [1]. Уян харимхайн тогтмолуудыг тодорхойлоход хэт авианы аргыг хэрэглэдэг боловч уг аргыг зөвхөн монокристалл дээжид хэрэглэж харимхайн тогтмолуудын утгыг иж бүрэн тодорхойлох боломжтой. Жишээлбэл, шоо эгэл үүртэй кристаллд  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{44}$  гурван тогтмол ач холбогдолтой байдаг бол эдгээрээс зөвхөн хоёрыг нь поликристалл дээжид хэт авианы аргаар тодорхойлох боломжтой байдаг. Уян харимхайн тогтмолуудыг монокристалл дээрх нейтроны болон рентген цацрагийн харимхай бус сарнилын судалгаагаар буюу фононы спектрээс дам тодорхойлж болдог. Үүнд Борн – вон - Карманы онолыг [2] түгээмэл хэрэглэдэг ба энэ нь кристалл торын динамикийн судалгааны чухал хэрэгсэл юм.

Энэ өгүүллийн зорилго нь эзлэхүүн төвлөсөн шоо (ЭТШ) тогтоц бүхий  $\alpha$ -Fe кристаллын  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{44}$  уян харимхайн тогтмолуудыг фононы спектрээс нил орчны дөхөлтийн аргаар тооцоолоход орших бөгөөд үр дүнг хэт авианы аргаар тодорхойлсон харгалзах утгуудтай харьцуулахад оршино.  $\alpha$  - Fe монокристаллын фононы спектрийг [3] бүтээлд нейтроны харимхай бус сарнилын аргаар хэмжиж Борн - вон - Карманы онолыг хэрэглэн эхний таван хөрш атомын хүчний тогтмолуудыг оролцуулан фиттинг хийж фононы төлвийн нягтыг тооцоолсон байдаг. Хүчний тогтмолуудын утгуудыг ашиглан [4,5] бүтээлийн аргачлалуудыг хэрэглэн  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{44}$  уян харимхайн тогтмолуудыг тооцоолох боломжийг [3] бүтээлийн зохиогчид ашиглаагүй байна. Орчин үед торын динамикийн судалгаанд нягтын функционалийн аргуудыг өргөн хэрэглэж байгаа бөгөөд [6]

бүтээлд  $\alpha$  ба  $\beta$  - Fe кристалл торын динамикт спиний эрэмбэлэлт болон соронзжилтын нөлөөг илрүүлэх тооцоонд Борн – вон - Карманы онол ба [4] аргачлалыг хэрэглэн уян харимхайн тогтмолуудыг үнэлнэ.

## II. ТООЦООНЫ АРГАЧЛАЛ

Борн-вон-Карманы онолын хүрээнд атом хоорондын буцаах хүч нь атомуудын харьцангуй шилжилтээс шугаман хамааралтай гэж тооцдог. Тухайн тэгш хэмийн чиглэл дагуух модын хувьд  $l$  дэх атомын ( $l$  дэх эгэл үүрийн) хөдөлгөөний тэгшитгэл дараах хэлбэртэй байна:

$$M\ddot{u}_{\alpha l} = -\sum_{l'} \Phi_{\alpha\alpha}(l, l')u_{\alpha l'}. \quad (1)$$

Үүнд  $u_{\alpha l}$  нь  $l$  дэх атомын тухайн  $\alpha$  чиглэл (туйлшралын) дагуух шилжилт, атомын масс  $M$ ,  $\Phi_{\alpha\alpha}(l, l')$  нь  $l'$  дэх атом  $\alpha$  чиглэлд нэгж зайд шилжихэд  $l$  дэх атомд  $\alpha$  чиглэлийн дагуу үйлчлэх буцаах хүч юм. Дээрх нийлбэрт  $l = l'$  гишүүн ордог тул  $\sum_l \Phi_{\alpha\alpha}(l, l') = 0$ , учир нь нэгэн төрөл шилжилтэд кристалл тогтвортой байна. (1) тэгшитгэлийн шийд нь гүйгч долгионы хэлбэртэй:

$$u_{\alpha l'} = U_{\alpha} \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_l) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_{l'} - i\omega t). \quad (2)$$

Үүнд  $\mathbf{R}_l$  нь тооллын эхлэлээс  $l$  дэх атом хүртэлх байрлалын вектор,  $\mathbf{R}_{l'}$  нь  $l$  дэх атомоос  $l'$  дэх атом хүртэл татсан вектор байна. (2) -ийг (1) –д орлуулбал

$$M\omega^2 = \sum_{l'} \Phi_{\alpha\alpha}(l, l') \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_{l'}). \quad (3)$$

Энэ тэгшитгэлийн хэлбэрийг хувиргаж бичвэл

$$M\omega^2 = \sum_{n=1}^N \Phi_n [1 - \cos(naq/2)]. \quad (4)$$

Үүнд  $a$  нь торын параметр,  $q = |\mathbf{q}|$  ба  $\Phi_n$  нь  $\Phi_{\alpha\alpha}(l, l')$  –үүдийн шугаман комбинац бөгөөд эдгээрийн хувьд  $\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_{l'}$  фаз тогтмол байна. Бид (4) томъёог хэрэглэн [3] бүтээлд  $T = 295\text{K}$  температурт хэмжсэн  $\alpha$ -Fe фононы спектрт фиттинг хийхэд кристалл торын параметрыг  $a = 2.865\text{\AA}$ , атомын массыг  $M = 55.847$  м. а. н. хэмээн тооцсон.  $\Phi_n$

\*Electronic address: [dulmaa@num.edu.mn](mailto:dulmaa@num.edu.mn)

хэмжигдэхүүн нь тухайн атом ба  $n$  ширхэг хавтгай алгасч  $q$  векторт нормаль байрласан хавтгай (хоёр) хоорондын хүчийг илэрхийлдэг. Нийлбэрт  $N$  гишүүн орох ба  $n > N$  бол  $\Phi_n = 0$ . (4) илэрхийллийн дөрвөлжин хаалт доторх ялгаврыг  $q \rightarrow 0$  хязгаарт авч үзвэл

$$1 - \cos(naq/2) \approx 1 - \left(1 - \frac{1}{2} \left(\frac{naq}{2}\right)^2\right) = \frac{1}{8} n^2 a^2 q^2.$$

Энэ тохиолдолд (4) тэгшитгэлийн хэлбэр

$$M\omega^2 = \sum_{n=1}^N \frac{1}{8} n^2 a^2 q^2 \Phi_n. \quad (5)$$

[1] номын 4-р бүлэгт тэгш хэмийн [100], [110] ба [111] чиглэл тус бүрийн дагуу тархах тууш ба хөндлөн долгионуудын хурд ба уян харимхайн тогтмолуудын хамаарлын томъёонуудын гаргалгааг хийсэн байдаг. Үүнд [100] чиг дагуу тууш долгионы хурд

$$v_s = \frac{\omega}{q} = \left(\frac{C_{11}}{\rho}\right)^{1/2} \text{ буюу } \rho\omega^2 = C_{11}q^2. \quad (6)$$

ЭТШ тогтоцын хувьд  $\rho = 2M/a^3$  учир (5) ба (6)-аас  $C_{11}$  тогтмолыг илэрхийлбэл:

$$C_{11} = \frac{1}{2a} \sum_{n=1}^N \frac{n^2}{2} \Phi_n. \quad (7)$$

Иймээс [100] чиг дагуу тууш фононы мөчрийн туршилтын  $\omega^2(q)$  хамааралд фиттинг хийж  $\Phi_n$  хүчний тогтмолуудын утгуудыг олбол (7) томъёогоор уян харимхайн тогтмол  $C_{11}$  -ийг тооцоолж болно.

Дээрхийн адилаар [100] чиг дагуу хөндлөн фононы туршилтын  $\omega^2(q)$  хамаарлаас  $C_{44}$  тогтмолыг тооцоолох томъёо

$$C_{44} = \frac{1}{2a} \sum_{n=1}^N \frac{n^2}{2} \Phi_n. \quad (8)$$

Мөн [110] дагуу хөндлөн ба тууш фононы туршилтын  $\omega^2(q)$  хамаарлаас

$$C_{11} + C_{12} + 2C_{44} = \frac{1}{2a} \sum_{n=1}^N \frac{n^2}{2} \Phi_n \quad (\text{тууш } L); \quad (9)$$

$$C_{44} = \frac{1}{4a} \sum_{n=1}^N \frac{n^2}{2} \Phi_n \quad (\text{хөндлөн } T_2); \quad (10)$$

$$C_{11} - C_{12} = \frac{1}{2a} \sum_{n=1}^N \frac{n^2}{2} \Phi_n \quad (\text{хөндлөн } T_1). \quad (11)$$

[111] дагуу хөндлөн ба тууш фононы туршилтын  $\omega^2(q)$  хамаарлаас

$$C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44} = \frac{1}{2a} \sum_{n=1}^N \frac{n^2}{2} \Phi_n \quad (\text{тууш } L); \quad (12)$$

$$C_{11} - C_{12} + C_{44} = \frac{1}{2a} \sum_{n=1}^N \frac{n^2}{2} \Phi_n \quad (\text{хөндлөн } T); \quad (13)$$

Дээрх (7)-(13) томъёо бүрт  $\Phi_n$  тогтмолын цуврал утгууд өөр өөр байх ба туршилтын фононы спектрийн мөчир бүрээс фиттинг хийж тодорхойлдог.

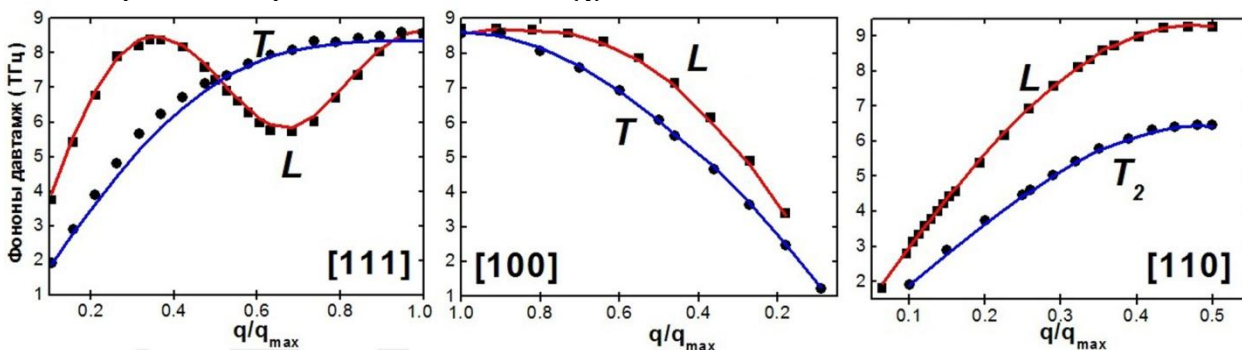
### III. ТООЦООНЫ ҮР ДҮН БА ХЭЛЭЛЦҮҮЛЭГ

Бид төмрийн фононы спектрийн тэгш хэмийн [100], [110] ба [111] чиглэл тус бүрийн дагуу  $\omega(q)$  хамаарал тус бүрийн фиттингийн хувьд (4) томъёоны нийлбэрт орсон гишүүдийн  $n$  тоог харилцан адилгүй авсан бөгөөд тооцоолсон хавтгай хоорондын хүчний  $\Phi_n$  тогтмолуудыг ашиглан (7) – (13) томъёонуудаар харимхайн тогтмолуудыг тооцоолоход үр дүн нь аль болох туршилтын утгуудтай ойр байхаар сонгосон болно. Жишээлбэл, [100] чиглэлийн дагуу фононы тууш мөчрийн фиттингээр гарсан  $\Phi_1 = 138.8$  Н/м,  $\Phi_2 = 34.3$  Н/м утгуудыг оролцуулан (7) томъёогоор бодсон  $C_{11} = 24.06 \cdot 10^{10}$  Н/м<sup>2</sup> утга хэт авианы аргын туршилтаар [7]-д 300К температурт хэмжсэн  $C_{11} = 23.31 \cdot 10^{10}$  Н/м<sup>2</sup> үр дүнтэй ойр байна. Иймээс (4) томъёонд зөвхөн эхний хоёр гишүүнийг оролцуулан тохируулгын муруйг байгуулах нь зүйд нийцэх бөгөөд 1-р зураг дээр [111], [100], [110] чиглэл дагуу  $L$  мөчрийн туршилтын ба тохируулгын хамаарлуудыг үзүүлэв.

Хүснэгт 1 дээр тэгш хэмийн [100], [110] ба [111] чиглэл тус бүрийн дагуу төмрийн фононы спектрээс тооцоолсон  $\Phi_n$  тогтмолуудын утгууд ба уян харимхайн тогтмолууд болон тэдгээрийн нийлбэрүүдийн утгуудыг туршилтын [7] үр дүнтэй харьцуулан үзүүлэв. [100] $L$ , [100] $T$ , [110] $L$  ба [111] $T$  чиглэл тус бүрийн дагуу фононы дисперст фиттинг хийхэд тус бүрт нь (4) нийлбэрийн эхний хоёр гишүүн буюу задаргааны эхний хоёр гармоник хангалттай байна. Үүнд (7) - (9) ба (13) томъёонуудад  $\Phi_1$ ,  $\Phi_2$ -ийн харгалзах утгуудыг оролцуулан тооцоолоход нь гарсан уян харимхайн тогтмолуудын утгууд ба тэдгээрийн нийлбэрүүд туршилтын харгалзах утгуудтай ойр болох нь 1-р хүснэгтээс харагдаж байна. Дээрх чиглэлүүдийн дагуу фононы спектрт фиттинг хийхэд зөвхөн хоёр гармоник хангалттай байгааг бид туршилтын чиглэл тус бүрийн дагуу  $\omega^2(q)$  хамаарлууд хялбар монотон функцийн хэлбэртэй байгаагаар тайлбарлаж болох юм. Эдгээр чиглэл дагуу тухайн атомд үйлчлэгч хүчийг зэргэлдээх хоёр хавтгайгаар тооцох боломжтойг харуулж байна.

[110] $T_1$  мөчирт фиттинг хийхэд эхний гурван гармоникийн задаргаа хангалттай байна. [111] $L$  мөчрийг илэрхийлэхэд (4) задаргааны эхний долоон гармоник шаардлагатай байгаа нь  $\omega^2(q)$

хамаарлын синусоид хэлбэрээр тайлбарлагдах ба [111] чиглэл дагуу атомууд хамгийн ойр зайтай байрласантай холбоотой байж болох юм.



**Зураг 1.**  $\alpha$ -Fe монокристаллын [111], [100], [110] чиглэл дагуух тууш L ба хөндлөн T мөчир Энд  $\blacksquare$ -туршилтын утгууд [3]. L-ийн тохируулсан муруй. T-ийн тохируулсан муруй

**Хүснэгт 1.**  $\alpha$  - Fe монокристаллын фононы спектрээс тооцоолсон хавтгай хоорондын хүчний тогтмолууд ба уян харимхайн тогтмолууд.

Чиглэл	Хүчний тогтмол (Н/м)							Харимхайнтогтмол ( $10^{10}$ Н/м <sup>2</sup> )	
	$\Phi_1$	$\Phi_2$	$\Phi_3$	$\Phi_4$	$\Phi_5$	$\Phi_6$	$\Phi_7$	Биднийтооцоо	Туршилт [3]
[100]L	138.8	34.3	-	-	-	-	-	$C_{11} = 24.06$	$C_{11} = 23.31$
[100]T	134.0	-0.5	-	-	-	-	-	$C_{44} = 11.53$	$C_{44} = 11.78$
[110]L	-53.9	184.7	-	-	-	-	-	$C_{11} + C_{12} + 2C_{44} = 59.75$	$C_{11} + C_{12} + 2C_{44} = 60.41$
[110]T <sub>2</sub>	-62.7	113.8	-13.7	-	-	-	-	$C_{44} = 11.75$	$C_{44} = 11.78$
[111]L	44.3	30.8	91.8	6.3	1.8	-	-0.52	$C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44} = 97.06$	$C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44} = 97.51$
[111]T	127.8	29.0	-	-	-	-	-	$C_{11} - C_{12} + C_{44} = 21.27$	$C_{11} - C_{12} + C_{44} = 21.58$

**IV. ДҮГНЭЛТ**

Борн–вон–Карманы онолоор ЭТШ тогтоцтой  $\alpha$ -Fe монокристаллын фононы спектрт фиттинг хийж уян харимхайн тогтмолуудыг тооцоолох боломжтой байна. Үүнд туршилтын  $\omega^2(q)$  хамаарлыг гармоник функцүүдээр задлахад [100]L, [100]T, [110]L ба [111]T дагуух мөчрүүдийг зөвхөн хоёр гишүүнээр задлахад хангалттай бол [111]L мөчрийн хувьд долоон

гишүүн орж байгаа нь уг мөчир атом хоорондын харилцан үйлчлэлийн талаар илүү их мэдээлэл агуулж буйг харуулж байна.

**V. ТАЛАРХАЛ**

Энэ судалгааг МУИС-ийн өндөр түвшний “Кристалл торын динамик, соронзон бүтэц, оптик шинж чанарууд ба эрэмбэлэлтийн судалгаа” сэдэвт (МУИС - ШУС – 2015 - 09) төслийн хүрээнд гүйцэтгэв.

[1] C. Kittel, Introduction to Solid State Physics, 4<sup>th</sup> Edition. USA. (1971).  
 [2] M. Born, and K. Huang, Dynamical Theory of Crystal Lattice, Oxford University Press, New York (1954).  
 [3] V. J. Minkewitz, G. Shirane, and R. Narans, Phys. Rev. **162**, 528 (1967).  
 [4] G. L. Squires, Arkiv Physics, 21 (1963).  
 [5] B. N. Brockhouse, T. Arase, G. Gaglioti, K. R. Rao, and A. D. B. Woods, Phys. Rev. **128**, 1099 (1962).  
 [6] I. Leonov, A. I. Poletaev, V. I. Anosimov, and D. Vollhardt, Phys. Rev. **B 85**, 020401(R) (2012).

- [7] J. A. Rayne, and B. S. Chandrasekhar, Phys. Rev. **122**, 1714 (2012).