

ДИНАМИКА РЕШЕТКИ ИРИДИЯ: ЭКСПЕРИМЕНТ И РАСЧЕТ

В.В.Немошкаленко, В.Ю.Мильман, А.В.Жалко-Титаренко

*В.Н.Антонов, Ю.Л.Шитиков*¹⁾

Для описания статических и динамических характеристик решетки иридия применена псевдопотенциальная модель. Впервые экспериментально определена плотность состояний фононов иридия и проведено сравнение с результатами расчета.

1. Иридий является типичным переходным металлом с высокой плотностью состояний d -типа на уровне Ферми. Это является основной трудностью при теоретическом описании решеточных свойств иридия. Ранее были выполнены лишь две работы^{1, 2}, связанные с расчетом фононных спектров Ir. В¹ с использованием модельного выражения для динамичес-

¹⁾ Институт атомной энергии им. И.В.Курчатова

кой матрицы рассчитаны дисперсия фононов $\omega(\mathbf{q})$ и спектральная плотность $F(\omega)$, а в ² в несколько иной модели методом рекурсии определена только $F(\omega)$. Полученные в ^{1, 2} фононные спектры существенно различаются по форме и по значениям предельных частот ω_{max} .

До настоящего времени экспериментальные исследования динамики решетки Ir не проводились. Это затрудняет теоретические исследования как в области динамики решетки, так и при изучении электрон-фононного взаимодействия и кинетических свойств переходных металлов. В связи с вышеизложенным представляется актуальной задача теоретического и экспериментального изучения комплекса решеточных свойств Ir.



Рис. 1: Полные (1 – 4) и парциальные (L, T_1, T_2) плотности фононных состояний в Ir: 1 – наш эксперимент; 2, 3 – расчеты ^{2, 1}, соответственно; 4, L, T_1, T_2 – наш расчет

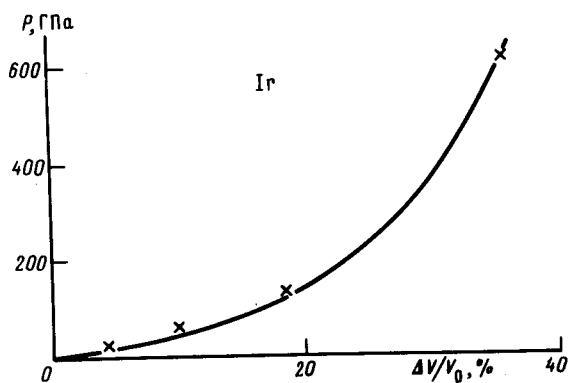


Рис. 2. $P - V$ -диаграмма иридия, сплошная кривая – наш расчет, x – эксперимент ⁶

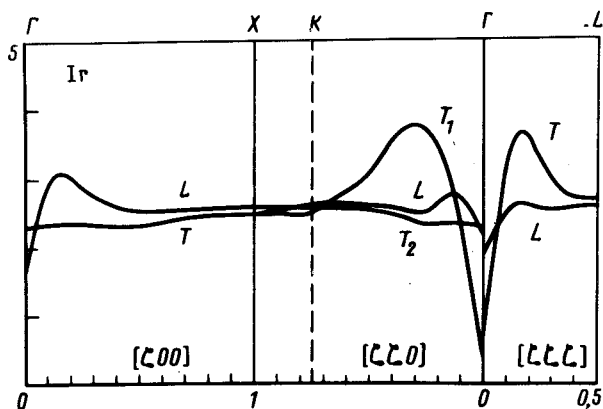


Рис. 3. Микроскопические параметры Грюнайзена иридия

2. Измерения $F(\omega)$ выполнены с использованием источника холодных нейтронов на многодетекторном времяпролетном спектрометре для поликристаллического образца. На рис. 1 представлен фононный спектр Ir, восстановленный из дважды дифференциального сечения неупругого рассеяния нейтронов с учетом многократных и многофононных процессов. Низкочастотная область спектра восстановлена на основе данных о низкотемпературной теп-

лоемкости ³. Спектр имеет выраженную двухпиковую структуру с максимумами равной интенсивности при частотах $6,4 \cdot 10^{-4}$ а.е.²⁾ и $8,5 \cdot 10^{-4}$ а.е. и достаточно резкую границу спектра при $10,5 \cdot 10^{-4}$ а.е.

3. Используемая нами для расчета $F(\omega)$ теоретическая модель описана в ⁴ и основана на представлении энергии связи металлов с валентными s - и d -электронами в виде, использующем теорию возмущений по псевдопотенциалу для s -электронов. Вклад, обусловленный взаимодействием d -электронов, моделировали короткодействующим потенциалом межатомного взаимодействия типа Борна – Майера. Заряд иона Z определялся как число валентных электронов на атом, которые можно рассматривать как почти свободные. Поэтому величина Z принята равной сумме эффективного числа заполнения s -состояний (0,46) и заряда вне МТ-сферы (1,50), найденных из зонного расчета ⁵. В настоящей работе использован локальный модельный псевдопотенциал Анималу – Хейне – Абаренкова, учет обменно-корреляционных эффектов проводился в приближении Тейлора. Модель содержит четыре подгоночных параметра, которые определялись из условия наилучшего в смысле наименьших квадратов совпадения рассчитанных и экспериментальных значений ω_{max} и упругих модулей B_{ik} при равновесном объеме.

Вычисленные статические характеристики хорошо согласуются с экспериментальными данными, отклонения значений B_{ik} не превышают 15%. Рассчитанная P – V -диаграмма совпадает с экспериментальной в пределах ошибки эксперимента вплоть до 600 ГПа (рис. 2). Это позволяет считать, что в широком интервале давлений взаимодействие основных состояний в Ir пренебрежимо мало, и перенормировка параметров модели давлением не существенна. В настоящей работе рассчитаны значения барических производных упругих модулей: $dB_{11}/dP = 6,50$, $dB_{44}/dP = 3,54$, $dB_{33}/dP = 0,39$. Анализ экспериментальной P – V -диаграммы при малых P дает $dB_{11}/dP = 6,0$ ⁷, что согласуется с полученной нами величиной. Экспериментальная информация о зависимости сдвиговых модулей от давления отсутствует.

При расчете $\omega(\mathbf{q})$ получены гладкие кривые, аномальной является только отрицательная дисперсия при малых волновых векторах для ветви T_1 [$\xi\xi 0$]. Такая же аномалия наблюдается в эксперименте для двух родственных иридию ГЦК металлов – Au и Pt. Вблизи граничной зоны Бриллюэна рассчитанные нами кривые оказываются на 10 – 15% ниже, чем в ¹. Это лучше согласуется с результатами эксперимента, хотя продольная ветвь в нашем расчете завышена вблизи граничной зоны Бриллюэна примерно на 10%. Приведенные на рис. 1 спектры 1 – 4 характеризуются значениями $\omega_{max} = (10,5; 12,2; 11,7; 11,5) \cdot 10^{-4}$ а.е. и $\langle \omega \rangle = (7,45; 8,54; 8,27; 7,32) \cdot 10^{-4}$ а.е., соответственно. Таким образом, хотя все расчеты завышают ω_{max} , используемая нами модель лучше описывает фоннный спектр иридия, чем модели $T_{1,2}$.

4. В настоящей работе впервые рассчитаны микроскопические параметры Грюнайзена $\gamma(\mathbf{q}) = -\partial \ln \omega(\mathbf{q}) / \partial \ln V$ в Ir (рис. 3). Ранее аналогичное вычисление было выполнено для меди ⁸. Расчет показал, что в Ir зависимость частот от давления значительно сильнее, чем в Cu, хотя сами спектры $\omega(\mathbf{q})$ этих металлов почти идентичны. Кроме того, в Ir в большинстве точек зоны Бриллюэна выполняется соотношение $\gamma_T \geq \gamma_L$, а в Cu, напротив, $\gamma_T < \gamma_L$, тогда как по данным туннельной спектроскопии $\gamma_T > \gamma_L$ практически для всех изученных в ⁹ объектов (для Ir нет экспериментальных данных о зависимости туннельных спектров от давления). В целом анизотропия дифференциальных характеристик фоннного спектра Ir сильнее, чем в Cu.

Таким образом, экспериментальные данные по статике и динамике решетки Ir удовлетворительно описываются в псевдопотенциальной модели энергии связи ⁴, учитывающей взаимодействие d -электронов.

2) 1 а.е. = 2 Рид = 27,2 эВ

Авторы выражают благодарность В.Г.Ваксу за многочисленные плодотворные обсуждения, и А.В.Хоткевичу за консультации и оказанную практическую помощь.

Литература

1. *Mehrotra K.N., Tambya R.G., Kapur S.K.* Rev. Roum. Phys., 1980, **25**, 157.
2. *Treglia G., Desjonquères M.-C.* J de Phys., 1985, **46**, 987.
3. *Шитиков Ю.Л., Хлопкин М.Н.* Вopr. атомной науки и техники, 1987, вып. 4/40/, 11.
4. *Немошкаленко В.В., Жалко-Титаренко А.В., Мильман В.Ю., Антонов В.Н.* УФЖ, 1985, **30**, 1372.
5. *Немошкаленко В.В., Антонов В.Н.* Методы вычислительной физики в теории твердого тела. Зонная теория металлов. Киев: Наук. думка, 1985.
6. *Альтшулер Л.В., Баканова А.А.* УФН, 1968, **96**, 193.
7. *Rose J.H., Smith J.R., Guinee F., Ferrante J.* Phys. Rev., 1984, **B29**, 2963.
8. *Немошкаленко В.В., Мильман В.Ю., Жалко-Титаренко А.В., Антонов В.Н.* Изв. вузов. Физика, 1987, **30**, 109.
9. *Свистунов В.М., Белоголовский М.А.* Туннельная спектроскопия квазичастичных возбуждений в металлах. Киев. Наук. думка, 1986.

Институт металлофизики
Академии наук Украинской ССР

Поступила в редакцию
26 ноября 1987 г.
После переработки
12 января 1988 г.