Письма в ЖЭТФ, том 76, вып. 5, с. 377 – 379 © 2002 г. 10 сентября

Подавление туннельных мод водорода в α-Mn упругими напряжениями

В. Е. Антонов, В. П. Глазков[+1)]*, Д. П. Козленко*[*]*, Б. Н. Савенко*[*]*, В. А. Соменков*[+]*, В.К.Федотов*

Институт физики твердого тела РАН, 142432 Черноголовка, Московская обл., Россия

[+]*РНЦ "Курчатовский институт", 123182 Москва, Россия*

[*]*Лаборатория нейтронной физики ОИЯИ, 141980 Дубна, Россия*

Поступила в редакцию 6 августа 2002 г.

Методом неупругого некогерентного рассеяния нейтронов исследовано поведение туннельной моды водорода в $MnH_{0.04}$ и $MnH_{0.07}$ при высоких давлениях в сапфировых наковальнях. Установлено, что пик неупругого рассеяния, соответствующий туннелированию водорода в двухъямном потенциале, полностью исчезает уже при давлениях 0.8 ГПа в квазигидростатическом режиме и сохраняется без видимых изменений в условиях чистой гидростатики. Аналогичное, но более слабое подавление туннельной моды имеет место при измельчении свежеприготовленного образца. Обнаруженный эффект подавления туннельных мод неоднородными упругими напряжениями объясняется сбоем уровней в соседних ямах статическими смещениями.

PACS: 61.12.–q, 62.50.+p, 63.20.Dj

Недавно в серии работ [1 – 3], выполненных с помощью нейтронной дифракции и неупругого рассеяния нейтронов на образцах твердых растворов водорода в α-Mn, был установлен эффект туннелирования водорода при сравнительно высоких температурах (около 90 K). Эффект выражался в появлении в спектрах неупругого рассеяния нейтронов зависящего от температуры сильного и узкого пика при энергии 6.3 мэВ, который трактовался как расщепление основного вибрационного состояния, благодаря туннелированию атомов водорода между соседними близкорасположенными (12 e) позициями. Энергия туннельных мод примерно в 30 раз превышала таковую для других квантовых систем [4, 5]. Природа этого эффекта заключалась, по-видимому, в том, что, в отличие от других растворов водорода в металлах с простыми решетками Браве, при внедрении его в сложные решетки (типа α- и β-Mn) позиции, в которые попадают атомы водорода, оказываются гораздо ближе друг к другу, чем в других случаях. В частности, как показано в [2], с помощью нейтронной дифракции атомы водорода в α-Mn занимают хаотически (12-e) позиции в пространственной группе I-43m, расстояние между которыми мало (0.680 Å) и гораздо меньше типичных расстояний между атомами водорода в ОЦК металлах (2.2 Å). Было естественно предполагать, что уменьшение объема, приводящее к уменьшению расстояний между возможными позициями атомов водорода и изменению формы двухъямного потенциала, может существенным образом влиять на эффект туннелирования. В связи с этим в данной работе с помощью неупругого некогерентного рассеяния было изучено влияние высоких давлений на эффект туннелирования в твердых растворах водорода в α-Mn.

Образцы $MnH_{0.07}$ и $MnH_{0.04}$ были приготовлены по методике, описанной ранее [6]. Порошок α-Mn насыщали водородом, полученным разложением гидрида алюминия, в камере высокого давления при давлении водорода 0.85 ГПа при температуре 623 K в течение 4 ч с последующим быстрым охлаждением до комнатной температуры. Содержание водорода определяли методом горячей экстракции в калиброванный объем. Эксперименты по неупругому рассеянию проводили в диапазоне температур 15-100 K на спектрометре ДН-12 в ЛНФ ОИЯИ на реакторе ИБР-2 в режиме неупругого рассеяния нейтронов [7]. Для этой цели между образцами и кольцевым детектором, состоящим из 16 He^3 счетчиков типа СНМ-31, помещали кольцевой анализатор из пиролитического графита, так что угол рассеяния $2\theta = 90°$, а анализируемая энергия составляла 14.9 мэВ. Для создания высоких давлений использовали ячейки с сапфировыми наковальнями [8]. Объем образца составлял ~ 2 мм^3, диапазон давлений до 20 кбар в квазигидростатическом режиме. Для создания чисто гидростатических давлений использовали жидкость флюоринерт. Для охлаждения образца в камере высоко-

1)e-mail: glazkov@isssph.kiae.ru

го давления использовали специальный криорефрежератор.

Из измерений спектров неупругого рассеяния нейтронов, полученных на свежеприготовленных образцах (рис.1), было установлено, что при понижении температуры ниже 100 К на картине неупругого рассеяния появляется резкий резонансный пик при энергии 6.4 мэВ в согласии с результатами ранних работ [3], соответствующий туннельному движению атомов водорода в двухъямном потенциале. После измельчения свежеприготовленных образцов сухим или мокрым (в спирте) способом амплитуда пика существенно уменьшается (рис.1b). При приложении квазигидростатических давлений в сапфировых наковальнях пик драматическим способом исчезает уже при давлениях 8 кбар, отсутствует при более высоких давлениях (17 кбар) и не восстанавливается при снятии давлений (рис.2a). Эффект имеет место в $MnH_{0.04}$ и $MnH_{0.07}$ и, следовательно, не зависит (или слабо зависит) от концентрации водорода.

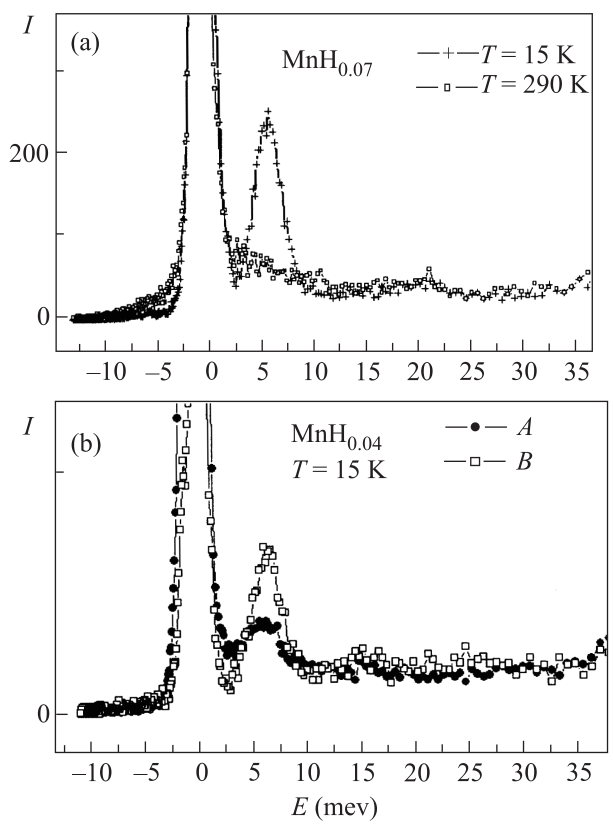

Рис.1. (a) Спектры неупругого рассеяния нейтронов, полученные на спектрометре ДН-12 при различных температурах. (b) Спектры неупругого рассеяния нейтронов: A – от свежеприготовленного образца, B – от образца, измельченного растиранием

Полученные результаты позволяют предположить, что эффект подавления туннельных состояний обусловлен остаточными упругими напряжениями (или дефектами), возникающими в образце в результате негидростатического сжатия или при растирании, и слабо связан с однородным сжатием образца. Для проверки этого предположения были проведены эксперименты в гидростатических условиях (свежеприготовленные образцы в наковальнях, заполненных флюоринентом). В этом случае (рис.2b) не наблюдали существенных изменений пика неупругого рассеяния по сравнению с исходным (ни в отношении интенсивности, ни в отношении ширины и положения).

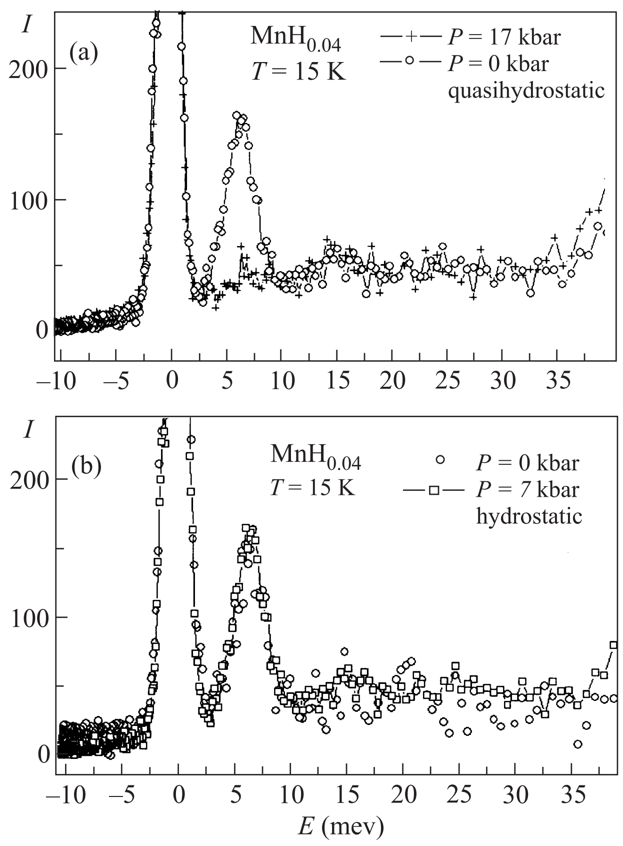

Рис.2 (a) Спектры неупругого рассеяния нейтронов при различных давлениях в сапфировых наковальнях в условиях квазигидростатики. (b) Спектры неупругого рассеяния нейтронов при различных давлениях в условиях гидростатики

Таким образом, изменения интенсивности туннельного пика обусловлены не самим давлением, а локальными упругими напряжениями в образце, связанными с неоднородностью давления или введенными при измельчении.

Вероятность туннелирования в кристалле без дефектов определяется как

$$W \approx \Delta^2/\omega,$$

где Δ – ширина туннельной зоны, а ω – характерная частота динамических смещений за счет взаимодействия с колебаниями решетки [9,10]. Вероятность туннелирования в кристалле, деформированном упругими напряжениями, должна существенно уменьшаться из-за сбоя уровней δ:

$$W \approx \Delta^2 \frac{\omega}{\omega^2 + \delta^2}.$$

В кристалле без локальных напряжений сбой уровней возникает за счет динамических смещений и определяет температурную зависимость вероятности туннелирования. В нашем случае сбой определяется не динамическими, а статическими смещениями, причем большая величина сбоя связана с гораздо большими значениями упругих модулей металлической матрицы по сравнению с квантовыми кристаллами [11]. По-видимому, аналогичные эффекты подавления туннелирования локальными упругими напряжениями должны иметь место и в других квантовых системах, хотя и в меньшей степени из-за меньшей величины упругих модулей.

Авторы признательны Л. А. Максимову за полезные дискуссии и ценные замечания, Ю. М. Кагану и Е. Г. Понятовскому за обсуждение результатов.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты # 00-02-17077, # 99-02-17299) и гранта "Ведущие научные школы" (# 00-15-96712).

---

1. V. E. Antonov, T. E. Antonova, N. A. Chirin et al., Scripta Mater. **34**, 1331 (1996).
2. V. K. Fedotov, V. E. Antonov, K. Comell et al., J. Phys.: Cond. Matter **10**, 5255, (1998).
3. A. I. Kolesnikov, V. E. Antonov, S. M. Bennington et al., Physica **B263–264**, 421 (1999).
4. T. Springer, in: *Dynamics of Solids and Liquids by Neutron Scattering*, Springer-Verlag, Berlin–Heidelberg–New York, 1977, p. 380.
5. H. Wipf, in: *Hydrogen in Metals III*, Ed. H. Wipf, Springer, Berlin, 1997, p. 51.
6. E. G. Ponyatovsky, V. E. Antonov, and I. T. Belash, in: *Problems in Solid State Physics*, Eds. A. M. Prohorov and A. S. Prohorov, Mir, Moscow, 1984, p. 109.
7. V. L. Aksenov, A. M. Balagurov, S. L. Platonov et al., High Press. Res. **14**, 181 (1995).
8. V. P. Glazkov and I. N. Goncharenko, Sov. Phys. and Tech. of High Pressure **1**, 56 (1991).
9. Ю. М. Каган, Л. А. Максимов, ЖЭТФ **79**, 1363 (1980).
10. Ю. М. Каган, Л. А. Максимов, Н. Ф. Прокофьев, Письма в ЖЭТФ **36**, 204 (1982).
11. А. Ф. Андреев, Успехи физических наук **118**, 251 (1976).