

ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ ФОНОНОВ В КАДМИИ

И. П. Ережеев, А. А. Чернышов, И. П. Садигов

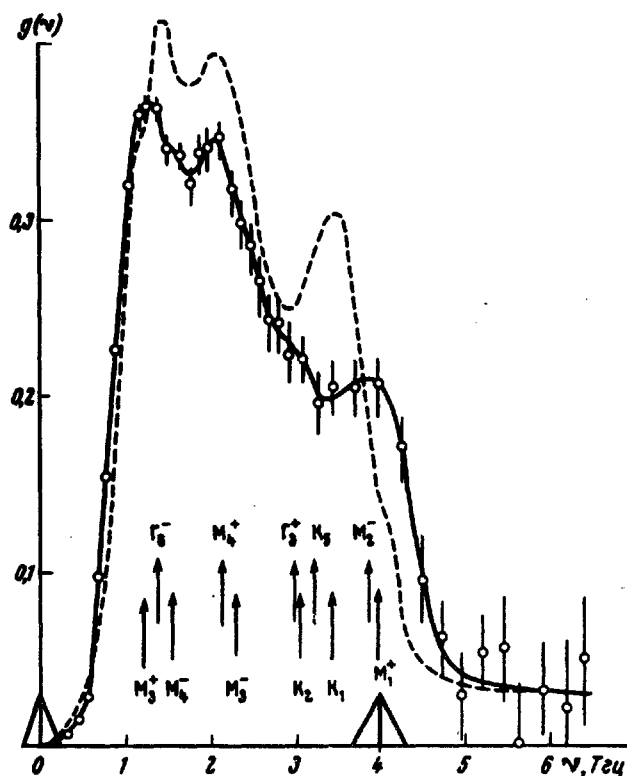
Методом неупругого рассеяния нейтронов определена плотность фононных состояний $g(\omega)$ в кадмии. Измерения выполнены на смеси изотопов Cd-110 и Cd-111. Плотность состояний получена путем интегрирования сечения рассеяния на поликристалле в широкой области переданных импульсов. Используя аналогию в $g(\omega)$ для Cd и Zn, определены частоты фононов в кадмии для некоторых симметричных точек зоны Бриллюэна.

За последние годы достигнут значительный прогресс в микроскопическом описании электронных и атомных свойств, в том числе фононного спектра, простых непреходных металлов (щелочные металлы Mg, Al). В случае более сложных металлов, с заполненными d - и f -зонами, возникают трудности принципиального характера. С одной стороны они связаны с усложнением вида исходных псевдопотенциалов, существенно нелокальных по своей природе и содержащих в ряде случаев резонансную зависимость от энергии электрона [1]. С другой — с необходимостью учета при вычислении энергии зонной структуры членов высших порядков теории возмущения [2]. Эти вопросы, выжные для микроскопической теории металлов, могут быть в значительной степени выяснены при исследовании фононных спектров Zn и Cd — сильно анизотропных, гексагональных кристаллов ($c/a = 1,856$ и $1,886$ соответственно), d -зоны которых близко расположены или, возможно, частично перекрываются с зоной проводимости [3].

В отличие от Zn, достаточно подробно изученного [4, 5], информация о фононном спектре Cd ограничивается лишь результатами [6], полученными методом диффузного рассеяния рентгеновских лучей, который имеет ограниченную точность. С помощью рассеяния нейтронов Cd ранее не исследовался из-за аномально большого поглощения в тепловой области энергий. В качестве первого этапа изучения фононов в Cd нами определена плотность состояний $g(\nu)$ методом, развитым для когерентно-рассеивающих кристаллов произвольной симметрии в [7, 8] под влиянием результатов [9]. В методе используются данные по закону рассеяния нейтронов $S_{\text{КОГ}}(\kappa, \epsilon)$, измеряемому в широкой области переданных импульсов κ и энергией ϵ . Экспериментальная техника и методика определения $S_{\text{КОГ}}(\kappa, \epsilon)$ описаны в [8, 10].

Работа выполнена на поликристаллических образцах разделенных изотопов Cd-110 и Cd-111 (~ 280 г), дополнительно обедненных по сильно поглощенному Cd-113 облучением в реакторе МР ИАЭ интегральным потоком $\sim 10^{20}$ н/см². В результате содержание Cd-113 было снижено до 10^{-4} ($\sigma_a^T \leq 2,0$ бн). Химическая чистота образцов определялась примесью более легких элементов, не превышающей $2 \cdot 10^{-4}$. Измерения проводились на "тонком" образце ($\Sigma d = 0,130$) при $T = 290^\circ\text{K}$ для значений энергии падающих нейтронов $E_0 = 18,5; 20,0$ и $21,8$ мэв с разрешением $\Delta E_0 = 0,8 + 0,9$ мэв и для 24 углов рассеяния от 24 до 116° . Эти условия обеспечили достаточно однородное и плотное распределение

векторов κ в большом объеме обратного пространства (~ 200 зон Бриллюэна) и позволили проследить переход к некогерентному приближению при расширении области интегрирования однофононных сечений $S_{\text{ког}}^1(\kappa, \epsilon)$ по κ . Процедура восстановления $g(\nu)$ и оценки возникающих погрешностей даны в [7, 8].



Фононный спектр Cd, восстановленный из $S_{\text{ког}}^1(\kappa, \epsilon)$ при $E_0 = 21,8$ мэв. Треугольниками схематически показана зависящая от ϵ функция разрешения спектрометра, штриховой линией — "приведенный" спектр Zn

Плотность состояний фононов в Cd показана на рисунке. Поскольку изотопический эффект в Cd меньше процента, можно рассматривать $g(\nu)$ как найденную для естественной смеси изотопов. Спектр Cd характеризуется узкой дебаевской областью, ограниченной $\sim 0,5$ ТГц, и большой плотностью низкочастотных состояний. Такой характер $g(\nu)$ связан с анизотропией решетки Cd: расщепление ветвей поперечных акустических колебаний в направлениях Σ и T сопровождается падением частот фононов с поляризацией вдоль оси c (ветви Σ_3 и T_3), что приводит к сильной особенности при $\nu \sim 1,3$ ТГц. Эта тенденция наблюдалась ранее в Zn [5] и, вероятно, еще более усиливается в Hg [11].

Фононный спектр Cd оказался в значительной мере подобен спектру Zn. Это видно из рисунка, на котором $g(\nu)$ Zn построена с учетом отношения ионных плазменных частот $(MV)_{\text{Cd}}^{1/2} / (MV)_{\text{Zn}}^{1/2}$ (M — масса ядра; V — объем элементарной ячейки); отмечены частоты особых точек, определенные в [4]. Максимальные отличия возникают в области частот продольно-поляризованных колебаний ($\nu > 3,0$ ТГц), наиболее чувствительных к характеру псевдопотенциала и деталям электрон-электронного взаимодействия. Вблизи границы спектра в Cd наблюдается значительный рост плотности состояний при относительно неплохом совпа-

Направление	Δ		T			
	Ветвь, точка	Δ_2, LO Γ_3^+	Δ_6, TO Γ_6^-	T_1, LO K_1	$T_1, LA; T_4, TO \perp$ K_5	$T_4, TA \perp$ K_2
Частота в Т:ч	$3,0 \pm 0,2$ 2,9	$1,4 \pm 0,15$ 1,5	$3,6 \pm 0,25$ —	$3,25 \pm 0,2$ —	$3,1 \pm 0,2$ —	$1,1 \pm 0,1$ 1,3
Направление	Σ					
Ветвь, точка	Σ_1, LO M_1^+	Σ_1, LA M_2^-	$\Sigma_4, TO \perp$ M_3^-	$\Sigma_4, TA \perp$ M_4^+	$\Sigma_3, TO \parallel$ M_4^-	$\Sigma_3, TA \parallel$ M_3^+
Частота в Т:ч	$4,1 \pm 0,25$ 6,4	$3,9 \pm 0,25$ 5,1	$2,4 \pm 0,2$ 2,5	$2,2 \pm 0,2$ 2,4	$1,6 \pm 0,15$ 1,8	$1,3 \pm 0,15$ 1,3

(\parallel — поляризация фононов вдоль оси c , \perp — в плоскости (0001)).

дении положения последней особенности с "приведенными" граничными частотами продольных Σ -ветвей Z_n (т. M_1^+ и M_2^-). Это может быть связано с различием в поведении T -ветвей вблизи границы зоны, в частности, с относительным увеличением частоты продольных оптических фононов в точке K_1 . Из этих соображений идентифицированы основные особенности $g(\nu)$ Cd и оценены частоты фононов в следующих точках зоны (см. таблицу).

Значения частот в т. M_1^+ и M_2^- сильно отличаются от данных работы [6], которые представлены в нижней строке таблицы. Найденные частоты могут быть использованы для определения параметров модельного потенциала [1] и в схеме расчета фононного спектра [12].

Функция $g(\nu)$, приведенная на рисунке, хорошо описывает термодинамические свойства Cd: вычисленные теплоемкость, средний квадрат смещения атомов и соответствующие дебаевские температуры совпадают с данными калориметрических и рентгеновских измерений в широкой области температур [5].

Авторы благодарны В.С.Золотареву и сотрудникам Госфонда изотопов СССР за представленную возможность использовать образцы разделенных изотопов Cd, Л.А.Фончарову за помощь в облучении образцов, Н.А.Черноплекову за обсуждение результатов.

Институт атомной энергии
им. И.В.Курчатова

Поступила в редакцию
17 июля 1973 г.

Литература

- [1] R.W.Shaw, M.Appapilai. Phys. Lett., 36A, 365, 1971.
- [2] Е.Ф.Бровман, Ю.Каган. ЖЭТФ, 52, 557, 1967; 57, 1329, 1969.
- [3] G.E.Juras, B.Segall, C.B.Sommers. Sol. St. Comm., 10, 427, 1972.
- [4] D.L.McDonald, M.M.Elcombe, A.W.Pryor. J. Phys. C., 2, 1857, 1969.
- [5] И.П.Еремеев, И.П.Садиков, А.А.Чернышов. Препринт ИАЭ-2228, М., 1972.
- [6] G. Toussaint, G.Champier. Phys. Stat. Sol., (b), 54, 165, 1972.
- [7] И.П.Еремеев. Препринт ИАЭ-2221, М., 1972.
- [8] И.П.Еремеев, И.П.Садиков, А.А.Чернышов. ФТТ, 15, 1953, 1973.
- [9] В.С.Оскотский. ФТТ, 9, 550, 1967.
- [10] И.П.Еремеев, В.И.Мостовой, И.П.Садиков, М.Н.Северов, А.А.Чернышов. "Neutron Thermalization and Reactor Spectra" 1, 343, IAEA, Vienna 1968. Перевод "Спектры медленных нейтронов", 57, Атомиздат, М., 1971.
- [11] W.H.Hubin, D.M.Ginsberg. Phys. Rev., 188, 716, 1969.
- [12] Е.Ф.Бровман, Ю.Каган, А.Холас. ЖЭТФ, 61, 737, 1971.