

УДК 539.172.3 : 539.2 : 539.89

АНИЗОТРОПИЯ ЭФФЕКТА МЕССБАУЭРА В β -Sn ПОД ДАВЛЕНИЕМ И ДИНАМИКА РЕШЕТКИ

А. А. Опаленко, А. А. Корнилова

Вероятность эффекта Мессбауэра в металлическом олове исследована при гидростатическом давлении до 40 кбар для двух кристаллографических направлений [001] и [100]. Обнаружена барическая зависимость анизотропии эффекта Мессбауэра: отношение f_{001}/f_{100} изменяется от значения 0.65 при $P=1$ атм до 0.90 при $P=40$ кбар. Зависимость f от давления объясняется моделью динамики решетки олова, предложенной Бровманом и Каганом.

Исследование динамических свойств решетки β -Sn привлекает внимание теоретиков и экспериментаторов. Бровман и Каган [1, 2] рассчитали фоновый спектр олова и показали, что наличие двух атомов в элементарной ячейке приводит к появлению оптических частот, которые сильно перекрываются с акустическими. Алексеевский и Кирьянов [3] провели детальное сравнение теории с измерением анизотропии эффекта Мессбауэра в монокристаллах β -Sn при температурах 4—290 К. Как известно, температурный ход анизотропии эффекта Мессбауэра является интегральной характеристикой фононного спектра и зависит как от частоты фононов, так и от векторов поляризации. Экспериментальные данные полностью подтвердили выбранную динамическую модель.

Барическая зависимость вероятности эффекта Мессбауэра в поликристаллах олова была измерена Панюшкиным и Яковлевым [4] до давления 110 кбар. В последнее время эти результаты уточнены до давления 200 кбар Капитановым и др. [5]. Удовлетворительного теоретического объяснения эти результаты пока не получили.

Цель настоящей работы — измерение вероятности эффекта Мессбауэра при давлении на монокристаллических образцах олова и попытка применения теории Бровмана—Кагана для объяснения результатов, поскольку измерение анизотропии эффекта Мессбауэра является независимым и весьма критическим методом для проверки правильности существующих динамических моделей.

1. Методика и результаты

Нами была использована камера высокого гидростатического давления с наковальнями из поликристаллического кубического нитрида бора [6]. В качестве рабочей жидкости мы использовали глицерин. Усилие к камере передается с помощью фиксирующего зажима. Давление измеряется в процессе исследования по линейной зависимости электросопротивления манганина от давления, для чего в камеру помещен кусочек манганиновой проволоки диаметром 0.03 мм ($R=10$ Ом).

Эта методика [6] обеспечивает неизменную с давлением геометрию прохождения γ -излучения через камеру с образцом-поглотителем. Источник крепится на штоке вибратора. Он был изготовлен из соединения $\text{Ca}^{119\text{m}}\text{SnO}_3$ путем осаждения тонкого слоя порошка на подложку диаметром 2.5 мм. γ -кванты распространяются вдоль оси камеры давления, нормально к плоскости образца.

Образцы β -Sn были приготовлены из монокристаллического блока с помощью электроискровой резки и электрополировки. Поглотители представляли собой пластинки диаметром 2 мм, ориентированные в плоскости (001) и (100) с толщинами 30 мкм для (100) и 75 мкм для (001). Для каждой ориентации были проделаны две серии мессбауэровских измерений: одна — до 20 кбар с тонкими наковальнями (2 мм), другая — до 40 кбар с более толстыми наковальнями (4 мм). Время измерения спектра при фиксированном давлении около 70 ч.

Мессбауэровский спектр β -Sn представляет собой одиночную линию с площадью кривой резонансного поглощения [7]

$$S = \pi x f C_a e^{-C_a I^2 \beta_a} [I_0(C_a/2\beta_a) + I_1(C_a/2\beta_a)], \quad (1)$$

где величина (xf) определяется источником, детектором и степенью ослабления γ -квантов в образце; $\beta_a \Gamma_a / \Gamma$ — ширина линии поглощения в долях естественной ширины; I_0, I_1 — функции Бесселя нулевого и первого порядков от мнимого аргумента. Для олова оцениваем $\beta_a = 1.2$ на основании рис. 4 работы [8], учитывая, что величина квадрупольного расщепления составляет 0.23 мм/с [9].

Эффективная толщина поглотителя определяется по известной площади из таблицы функции $S(C_a)$ или по приближенным формулам [10]

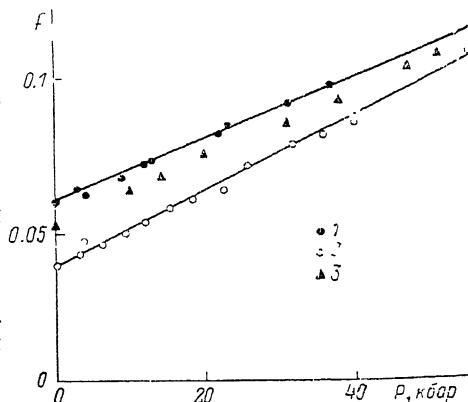


Рис. 1. Барическая зависимость вероятности эффекта Мессбауэра в β -Sn для монокристаллов (100) (1) и (001) (2).

Сплошные линии — теория.

$$C_a = A + \frac{1}{4} A^2 + \frac{1}{16} A^3 + \frac{5}{384} A^4 + \dots, \quad A = S_0 \left(x f \pi \frac{\Gamma}{2} \right), \quad (2)$$

где S_0 — экспериментальная, нормированная на пьедестал площадь кривой поглощения. Сначала для каждого образца при $P=1$ атм с известными $f_{001} = 0.039 \pm 0.002$, $f_{100} = 0.060 \pm 0.002$ [3] находим значение (xf) из сравнения S_0 с S , рассчитанной по формуле (1). Затем для каждого образца при давлении P находим A и C_a по формулам (2) и значение вероятности резонансного поглощения $f_p = C_a / n_a \sigma_0$, где n_a — число атомов ^{119}Sn на 1 см² образца, σ_0 — сечение резонансного поглощения.

Полученные данные для монокристаллов олова представлены на рис. 1, 1, 2. Здесь же нанесены значения f из работы [5] для поликристаллов (3), которые полностью согласуются с нашими данными при усреднении по формуле $f = (f_{100} f_{001})^{1/2}$.

2. Анизотропия эффекта Мессбауэра и динамика решетки

Найдено, что величины f_{001} и f_{100} монотонно возрастают с давлением, причем f_{001} возрастает на 125 %, а f_{100} — только на 65 % при давлении до 40 кбар. Таким образом, величина анизотропии f_{001}/f_{100} изменяется от 0.65 ± 0.02 при $P=0$ до 0.90 ± 0.02 при $P=40$ кбар.

Какая теория сможет объяснить этот результат?

Дебаевское приближение полностью неприменимо к таким сложным решеткам. Квазигармоническая модель без привлечения вида фононного спектра объясняет эксперимент только при радикальном предположении о нестабильности параметра Грюнайзена γ [4]. Авторы используют высоко-температурное приближение, предложенное в работе [11]

$$f = \exp[-Z(V)], \quad Z(V) = (V/V_0)^{2\gamma} Z(V_0),$$

и, чтобы согласовать свои результаты с теорией, принимают, что при повышении давления от 0 до 92 кбар (точка структурного фазового перехода) величина γ , постепенно уменьшаясь, становится близкой к нулю. Так как нормальным поведением является возрастание частот с давлением, то, по мнению авторов, это стремление $\gamma \rightarrow 0$ указывает на присутствие в фоновом спектре частот ω_β с $\gamma_\beta < 0$, которые, следовательно, понижаются с давлением, причем эта нестабильность частот прогрессирует с приближением к фазовому переходу.

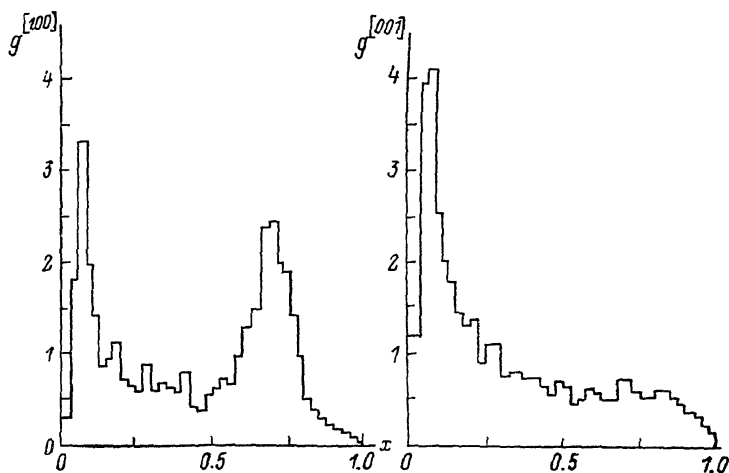


Рис. 2. Спектральная плотность квадрата смещения атомов в решетке 3-Sn для направлений [001] и [100].

Применим модель Бровмана—Кагана. Возьмем квазигармоническое приближение

$$f = \exp \left[- E_R \int_0^\infty (1/\hbar\omega) \operatorname{cth}(\hbar\omega/2kT) g(\omega) d\omega \right],$$

где объемная зависимость частоты определяется выражением Грюнайзена $\omega = \omega_0 (V/V_0)^{-\gamma}$. Введем новую переменную $x = \omega^2/\omega_{0m}^2$, где ω_{0m} — максимальная частота спектра кристалла. Тогда

$$f = \exp \left[- \frac{E_R}{\hbar\omega_{0m}} \int_0^1 \frac{g(x)}{\sqrt{x}(V/V_0)^{-\gamma}} \operatorname{cth} \left(\frac{\hbar\omega_{0m} \sqrt{x} (V/V_0)^{-\gamma}}{2kT} \right) dx \right]. \quad (3)$$

Для $\beta = \text{Sn}$ $\omega_{0m} = 2.6578 \cdot 10^{13}$ [12], энергия отдачи $E_R = 2.556 \cdot 10^{-3}$ эВ, $\gamma = 2.22$. Спектральная плотность квадрата смещения атома $g(\omega)$ вычислена в работе [1] для направлений [001] и [100] и приведена на рис. 2 (взята из [13]). Объемная сжимаемость олова измерена рентгенографически [14].

Просчитав на ЭВМ значение f по формуле (3) для каждого давления с конкретным видом $g(x)$ из рис. 2, получим результаты, нанесенные на рис. 1 в виде сплошных линий. Результаты нормированы на известные значения f для $P = 1$ атм.

На основании изложенного могут быть сделаны следующие выводы.

1. Определена анизотропия эффекта Мессбауэра в монокристаллах олова под давлением. Она имеет тенденцию к резкому уменьшению и, возможно, обращается в нуль при давлениях выше достигнутых в данном эксперименте.

2. Показано, что различный ход барической зависимости вероятности эффекта Мессбауэра f_{001} и f_{100} является следствием отличия динамических матриц для разных направлений в кристалле, а именно значительным

вкладом оптических частот в фоновый спектр олова для направления [100].

3. Модель динамики движения атомов олова, предложенная Бровманом и Каганом, полностью объясняет барическую зависимость анизотропии эффекта Мессбауэра.

В заключение авторы выражают свою признательность Е. В. Капитанову за содействие в освоении методики гидростатического давления, В. И. Николаеву за полезные обсуждения и Р. Н. Кузьмину за интерес к работе.

Л и т е р а т у р а

- [1] Бровман Е. Г., Каган Ю. М. // ФТТ. 1966. Т. 8. № 5. С. 1402—1416.
- [2] Бровман Е. Г., Каган Ю. М. // ЖЭТФ. 1967. т. 52. № 2. С. 557—574.
- [3] Алексеевский Н. Е., Кирьянов А. П. // Письма в ЖЭТФ. 1969. Т. 9. № 2. С. 92—95.
- [4] Панюшкин В. Н., Яковлев Е. Н. // ЖЭТФ. 1972. Т. 62. № 4. С. 1433—1441.
- [5] Капитанов Е. В., Кочетов С. А., Татьяна Е. В. // ЖЭТФ. 1986. Т. 91. № 6. С. 2150—2158.
- [6] Капитанов Е. В., Яковлев Е. Н. // ПТЭ. 1978. № 6. С. 149—151.
- [7] Фам Зуи Хиен, Шпинель В. С. // ЖЭТФ. 1963. Т. 44. № 2. С. 393—397.
- [8] Быков Г. А., Фам Зуи Хиен. // ЖЭТФ. 1962. Т. 43. № 3. С. 909—918.
- [9] Siger W. // Нур. Int. 1976. V. 2. P. 254—256.
- [10] Housley R. M., Grant R. W., Gonser U. // Phys. Rev. 1969. V. 178. N 2. P. 514—522.
- [11] Dloha J. // Чехослов. физ. журн. 1964. V. B14. P. 570—579.
- [12] Котов Б. А., Окунева Й. М., Плаченева Э. А. // ФТТ. 1968. Т. 10. № 2. С. 513—517.
- [13] Николаев В. И., Русаков В. С. // Ультрадисперсные частицы и их ансамбли. Киев. 1982. С. 37—41.
- [14] Barnett J. D., Bean V. E., Hall H. T. // J. Appl. Phys. 1966. V. 37. P. 875—878.

Московский государственный
университет им. М. В. Ломоносова
Москва

Поступило в Редакцию
23 декабря 1987 г.
В окончательной редакции
29 августа 1988 г.