

НОРМАЛЬНЫЕ КОЛЕБАНИЯ РЕШЕТКИ НИОБИЯ,
СВЯЗАННЫЕ С БРЭГГОВСКИМИ ПЛОСКОСТЯМИ (110)

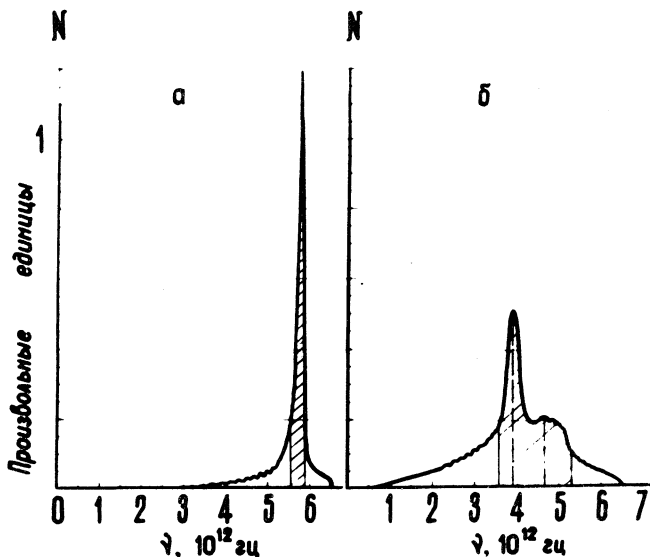
Г. П. Мотулевич

В работах Ван-Хова /1/ и Филлипса /2/ получено, что критические точки, которыми являются точки высокой симметрии, приводят к появлению максимумов в плотности нормальных колебаний кристалла. После указанных работ принято считать, что наблюдаемые экспериментально максимумы связаны с точками высокой симметрии. Нами на основании анализа экспериментальных данных по неупругому рассеянию нейтронов, полученных в работе Шарпа /3/, будет показано, что основные максимумы в плотности нормальных колебаний решетки Nb связаны не с точками высокой симметрии, а с плоскостями симметрии (110).

Шарп /3/ в отличие от предыдущих исследований /4/ получил дисперсионные зависимости $\nu(\vec{q})$ не только для симметричных направлений, но и для большого числа несимметричных направлений, что позволяет найти те значения волнового вектора \vec{q} , которые дают вклад в максимумы плотности фононов $N(\nu)$ (здесь ν — частота фонона). Функции $N(\nu)$ для квазипродольных и квазиперечных ветвей приведены на рис. 1а и 1б. Рисунки взяты из работы /3/. Квазипродольные моды имеют резкий пик плотности фононов на частоте $\nu_{\max} \approx 5,75 \cdot 10^{12}$ гц, шириной $\Delta\nu \approx 0,35 \cdot 10^{12}$ гц. Квазиперечные моды имеют 2 максимума на частотах $3,9 \cdot 10^{12}$ и $4,6 \cdot 10^{12}$ гц. Полосы, связанные с ними, значительно шире, чем для квазипродольных мод, и перекрываются между собой. В дальнейшем нас будут интересовать фононы с ν , попадающими в заштрихованные интервалы частот.

Определим фазовый объем нормальных колебаний с \vec{q} вблизи плоскости (110), частоты которых попадают в интересующие нас интервалы. На рис. 2 приведена первая зона Бриллюэна Nb (объемно-центрированная кубическая решетка), ограниченная брегговски-

ми плоскостями (110). Нас интересуют зависимости $\nu(\bar{q})$ для \bar{q} , оканчивающихся на линии ΓP , и для \bar{q} в направлениях, соединяющих точку Γ с точками линии ΓP . Они приведены на рис. 3. Верхние кривые относятся к квазипродольной, нижние - к квазипоперечной

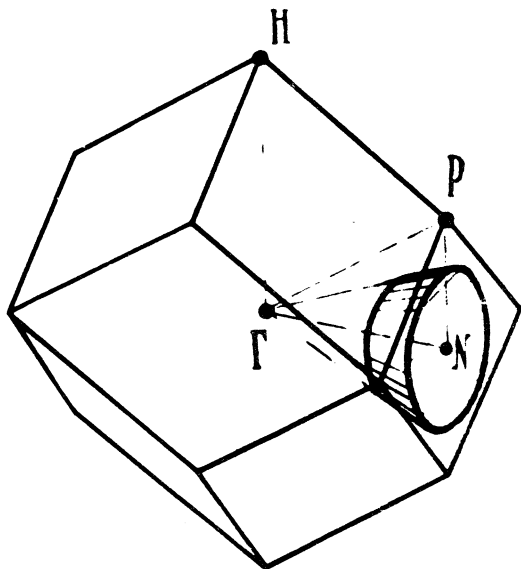


Р и с. 1. Зависимость плотности нормальных колебаний ниобия N от частоты ν . Кривые взяты из работы /3/. а) квазипродольные моды; б) квазипоперечные моды.

речным ветвям. Кривые взяты из работы /3/. Заштрихованные интервалы частот на рис. 1а и 3 совпадают между собой.

Рассмотрим квазипродольные моды. Из рис. 3а следует, что все колебания внутри круга радиуса $q_{||} \approx 0,36$ попадают в заштрихованный интервал частот. Здесь и ниже q дается в единицах $2\pi/a$, где a - постоянная решетки, $q_{||}$ и q_{\perp} - компоненты \bar{q} , параллельная и перпендикулярная Брэгговской плоскости (110). Из рис. 3б, в, и г можно определить среднюю толщину слоя для частот того же заштрихованного интервала, которая оказалась равной $h = 0,5b_{110} - q_{\perp} \approx 0,23$, где b_{110} - вектор обратной решетки. При определении среднего значения h мы учли, что число мод пропорционально $q_{||}$ и, следовательно, непосредственная окрестность

точки N дает малый вклад в общее число мод. Таким образом интересующий нас фазовый объем — это объем усеченного конуса с радиусом основания q_H , высотой h и с углом при вершине $2\varphi = 2\arctg q_H / 0,5b_{110} \approx 54^\circ$ (см. рис. 2). Так как имеется 12 физически

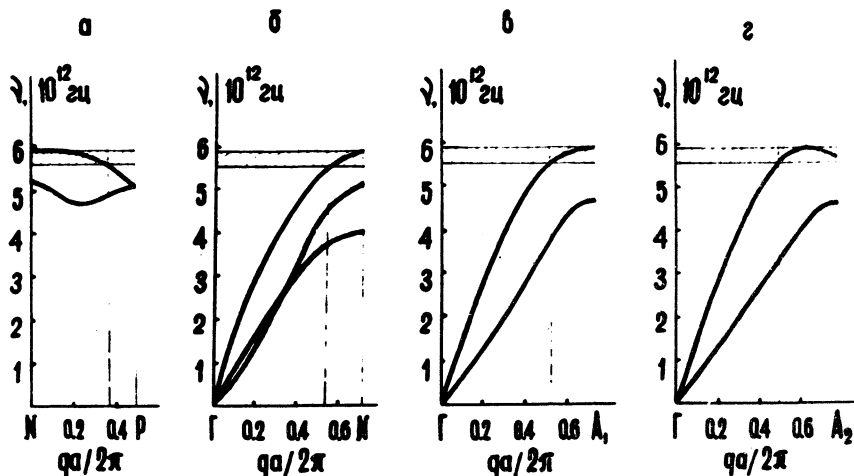


Р и с. 2. Первая зона Бриллюэна. Объем усеченного конуса — фазовый объем нормальных колебаний, связанных с брэгговской плоскостью (110), частоты которых лежат внутри интервалов, заштрихованных на рис. 1. Обозначения точек симметрии согласно работе /5/.

эквивалентных брэгговских плоскостей (110), то полный фазовый объем равен 0,78. Число атомов на ячейку a^3 равно 2. Полное число квазипродольных степеней свободы на ту же ячейку также равно 2. Площадь заштрихованного пика на рис. 1а составляет около 60% от полной площади кривой $N(\nu)$. Следовательно, около 70% всех квазипродольных фононов в максимуме $N(\nu)$ связаны с брэгговскими плоскостями (110). Если интересоваться более узким интервалом частот вблизи вершины пика, то доля колебаний, связанных с брэгговской плоскостью (110), будет еще больше, при

этом высота усеченного конуса h будет значительно меньше, т.е. в вершину пика $N(\nu)$ дают вклад колебания с $h = 0,5b_{110} - q_1 \ll \ll 0,5b_{110}$.

Аналогичная картина имеет место для квазиперечных мод.



Р и с. 3. Зависимость $\nu(\vec{q})$. Верхние кривые - квазипродольные остальные - квазиперечные моды. Кривые взяты из работы [3]. а) зависимость $\nu(\vec{q})$ для \vec{q} , оканчивающихся на прямой ΓN . б) зависимость $\nu(\vec{q})$ для \vec{q} в направлении ΓN . в) зависимость $\nu(\vec{q})$ для \vec{q} в направлении ΓA_1 , A_1 лежит на прямой ΓN . Угол между ΓA_1 и ΓN равен 15° . г) зависимость $\nu(\vec{q})$ для \vec{q} в направлении ΓA_2 , A_2 лежит на прямой ΓN . Угол между ΓA_2 и ΓN равен 25° .

Из рис. 3 следует, что все моды, лежащие в рассмотренных усеченных конусах, имеют частоты, попадающие внутрь заштрихованного интервала. Заштрихованная площадь рис. 1б составляет около 60% от общей площади. Таким образом и для квазиперечных ветвей основная часть всех фононов в максимумах $N(\nu)$ связана с брэгговскими плоскостями (110).

Поступила в редакцию
17 ноября 1971 г.

Л и т е р а т у р а

1. Van Hove. Phys. Rev., 89, 1189 (1953).
2. J. C. Phillips. Phys. Rev., 104, 1263 (1956).
3. R. J. Sharp. Solid St. Phys., ser 2, 2, 421 (1969).
4. Y. Nakagawa, A. D. B. Woods. Phys. Rev. Letters, 11, 271 (1963).
5. L. P. Bouckaert, R. Smoluchowski, E. Wigner. Phys. Rev., 50, 58 (1936).