

Исследование акустических и оптических колебательных мод в металлическом стекле $Zr_{40}Be_{60}$

Г. Сырых⁺¹⁾, А. Ореккини^{*×2)}, А. де Франческо^{×2)}, А. Лалони^{×2)}, А. Столяров[°]

⁺ Научно-исследовательский центр “Курчатовский Институт”, 123182 Москва, Россия

^{*} Университет Перуджа, Отделение физики и геологии, I-06123 Перуджа, Италия

[×] Институт Лауэ-Ланжевена, BP 156-38042 Гренобль, Франция

[°] Институт ядерных исследований РАН, 117312 Москва, Россия

Поступила в редакцию 9 марта 2016 г.

На малоугловом спектрометре BRISP было проведено измерение дисперсии колебательных мод при малых значениях переданного импульса в металлическом стекле $Zr_{40}Be_{60}$, состоящем из различающихся по массе частиц. Было показано, что поведение оптической моды в металлическом стекле аналогично поведению оптических мод в других системах с несоразмерными атомами (жидкость LiPb, плотные смеси благородных газов $He_{65}Ne_{353}$).

DOI: 10.7868/S0370274X17080033

Введение. Несмотря на интенсивный интерес к металлическим стеклам с точки зрения различных технических применений, многие детали атомной структуры и динамики остаются неизученными. Металлические стекла, по крайней мере, являются двухкомпонентными системами, а это значит, что в них должны распространяться акустические и оптические колебательные моды.

Акустические дисперсионные соотношения в широком интервале волновых векторов (\mathbf{q}) – энергий (E) были исследованы во многих металлических стеклах методами неупругого рассеяния нейтронов и синхротронного излучения [1–4].

В работе [5] теоретически описана дисперсия коллективного возбуждения в $Mg_{70}Zn_{30}$ с комбинацией акустических и оптических мод. В работе [6] утверждается, что из сравнения $S(E, q)$ явно следует: коллективное возбуждение в $Ni_{33}Zr_{67}$ происходит от сочетания трех “оптических” мод в кристаллической фазе. Следует отметить, что не наблюдались четкие оптические моды в этих аморфных образцах.

Наш эксперимент на спектрометре IN4 [7] на металлических стеклах Zr-Be, состоящих из частиц различной массы ($m_{Zr}/m_{Be} = 10$), показывает две различные колебательные моды за границей первой зоны псевдо-Бриллюэна. Исследование представляет интерес для наблюдения оптической моды в метал-

лическом стекле Zr-Be при малых значениях q . Причиной этого является коллективная динамика жидкостей, состоящих из частиц разнородных масс, которая была активной темой в течение последних десятилетий. Для целого класса систем с несоразмерными атомами, таких как газовая смесь редких элементов [8], металлический сплав Li_4Pb [9] или вода в жидком состоянии [10] наблюдаются две распространяющиеся “кинетические моды” в интервале промежуточных волновых векторов. Высокочастотная мода известна как быстрый звуковой феномен [8], она была интерпретирована как результат флуктуаций плотности только легких частиц, на фоне более тяжелых атомов. Кроме того, высказана гипотеза о существовании режима низкочастотного (медленного звука) из-за флуктуаций плотности только тяжелых частиц [11]. В результате последующих исследований сплава Li_4Pb [12] и смеси $He_{65}Ne_{35}$ [13] высказана гипотеза о неакустическом происхождении высокочастотной моды. В работе [14] показано, что высокочастотная мода может внезапно исчезать при $q \rightarrow 0$. Было проведено компьютерное моделирование динамики решетки кристаллического образца $Li_{22}Pb_5$ [15]. Рассчитанный спектр показывает несколько полос, соответствующих режимам, в которых выполняют движения только легкие атомы. Результаты подтверждают гипотезу, выдвинутую в работе [16], относительно возможности обнаружения “кинетических мод”, даже если жидкость находится ниже точки замерзания.

¹⁾ e-mail: dyproso@mail.ru

²⁾ A. Orecchini, Adessio de Franchesco, A. Laloni.

Хорошим выбором для дальнейшего изучения двух колебательных мод в металлическом стекле $Zr_{40}Be_{60}$ является спектрометр BRISP (ILL, Гренобль, Франция) с самой высокой энергией первичного нейтронного пучка.

Эксперимент и обработка данных. Спектрометр BRISP [17] был оснащен пиролитическим графитовым (004) монохроматором с фиксированной длиной волны 1.03 \AA , соответствующей первичной энергии 77.1 мэВ . Разрешение спектрометра имеет форму Гаусса с полушириной 2.7 мэВ . Образец в виде ленты спрессован в плоские ячейки, что обеспечивает 82% пропускания падающих нейтронов. Ячейки размером $50 \times 35 \times 5 \text{ мм}$ были разделены на 12 частей тонкой кадмиевой стенкой и помещены в вакуумную часть прибора.

На рис. 1 представлена динамическая область, охватываемая спектрометром BRISP с максимальной энергией первичных нейтронов.

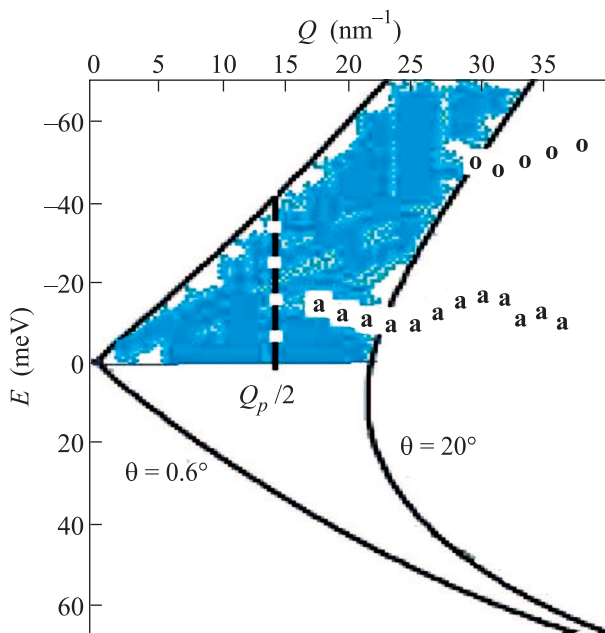


Рис. 1. (Цветной онлайн) Динамическая область спектрометра BRISP

Сплошные линии соответствуют минимальному и максимальному углам рассеяния. В эксперименте использована область с приобретением энергии (цветная часть). Схематически показано дисперсионное соотношение акустических (а) и оптических (о) мод, полученных на спектрометре IN4. Граница первой зоны псевдо-Бриллюэна показана прерывистой вертикальной линией. Спектрометр BRISP позволяет расширить динамическую область исследования дисперсионного соотношения

в металлических стеклах Zr - Be в область малых переданных импульсов.

На рис. 2 показан полный времяпролётный спектр, в котором наблюдаются две области неупругого нейтронного рассеяния на образце $Zr_{40}Be_{60}$.

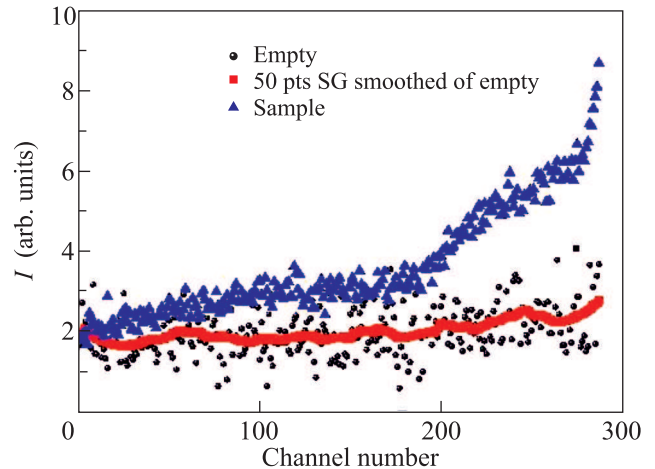


Рис. 2. (Цветной онлайн) Полный времяпролётный спектр образца (\blacktriangle) – время измерений 152 ч , статистическая точность – 1% . Спектр пустой кассеты (\bullet) – время измерений 44 ч , статистическая точность – 40% . Спектр, усредненный по 50 точкам методом Савицкого–Голаея, практически не зависит от номера канала (\blacksquare)

Получаем, что для расчета динамического структурного фактора $S(E, q)$ можно использовать 40 первых каналов линейного фона. В этом случае нет необходимости рассчитывать $S(E, q)$ для пустой кассеты.

На рис. 3 показаны сечения $S(E, q)$ полных спектров металлического стекла $Zr_{40}Be_{60}$ при фиксированных значениях q .

Вследствие отсутствия информации об области потери энергии падающих нейтронов затруднительно аппроксимировать неупругую часть спектра затухающими гармоническими колебаниями, а упругую часть – распределением Гаусса.

Альтернативный метод представления результатов корреляционной функции продольного потока:

$$C_l(E, q) = (E/q)^2 S(E, q).$$

На рис. 4 и рис. 5 изображены сечения $C_l(E, q)$ низко- и высокоэнергетических зон для выбранных значений q . Показано, что динамический фактор $C_l(E, q)$ металлического стекла $Zr_{40}Be_{60}$ состоит из низко- и высокоэнергетических зон, наблюдаемых отдельно или совместно в зависимости от значения переданного импульса. Наблюдается четкая зависимость максимума спектра от момента переданного

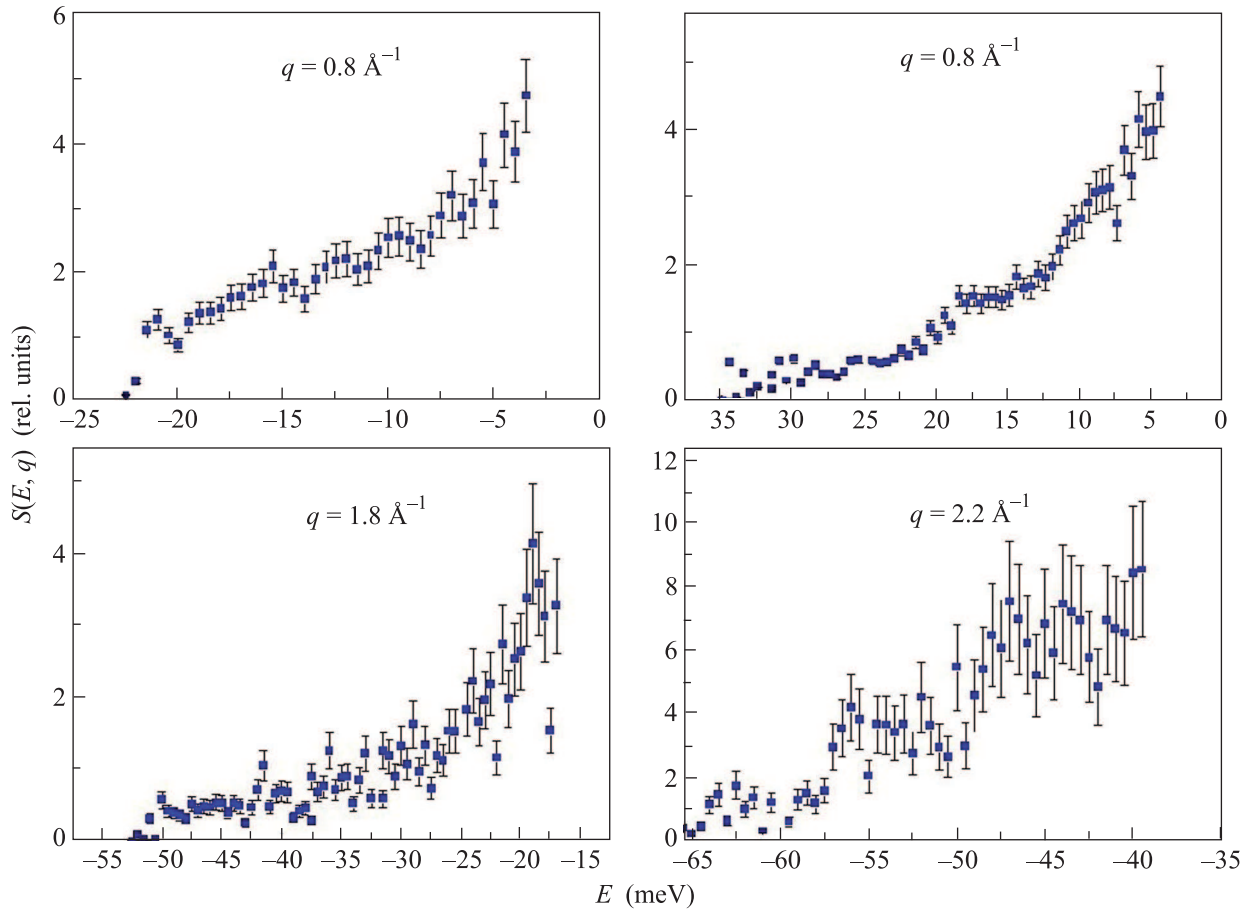


Рис. 3. (Цветной онлайн) Сечения $S(E, q)$ полных спектров металлического стекла $Zr_{40}Be_{60}$ при фиксированных значениях $q = 0.8; 1.2; 1.8$ и 2.4 \AA^{-1}

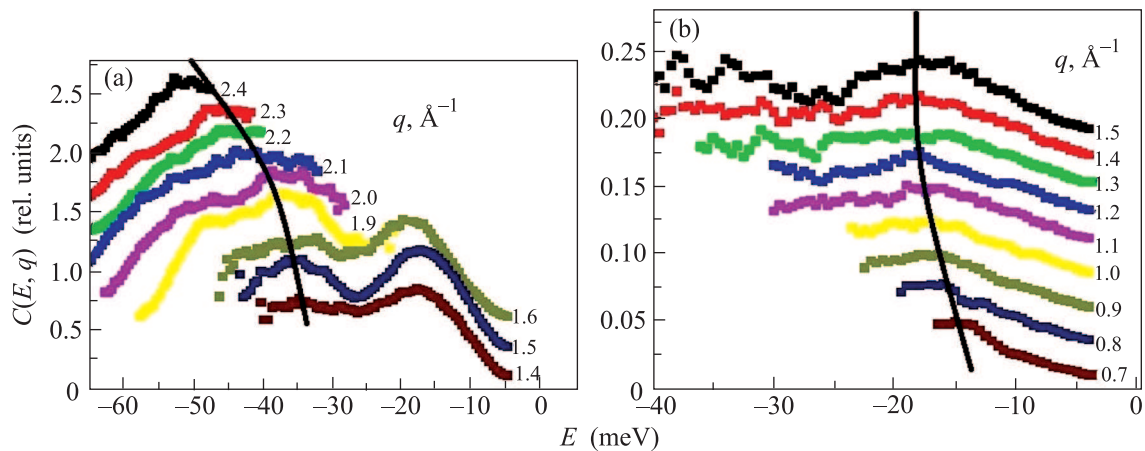


Рис. 4. (Цветной онлайн) Сечения $C_l(E, q)$ спектра при высоких (а) и низких энергиях (б) Спектры смещены по вертикали для ясности. Сплошные линии, соединяющие максимумы спектров, проведены “на глаз”

импульса как для низкой, так и для высокоэнергетической областей. Максимумы $C_l(E, q)$ спектров были использованы для построений дисперсионных соотношений для низко- и высокоэнергетических частотных возбуждений (см. рис. 5).

С увеличением момента переданного импульса дисперсионное соотношение низкочастотной моды проходит через максимум ($q_p/2$), а затем через минимум (q_p), где q_p – положение первого пика статического структурного фактора $S(q)$. Такое поведение

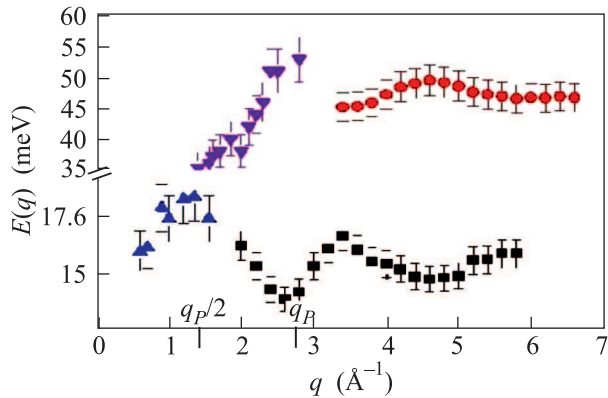


Рис. 5. (Цветной онлайн) Дисперсионное соотношение, построенное по максимумам $C_l(E, q)$. Результаты, полученные на спектрометре BRISP: \blacktriangle – низкоэнергетическая мода (E_{low}), \blacktriangledown – высокоэнергетическая мода (E_{high}). Результаты, полученные на спектрометре IN4: \blacksquare – E_{low} , \bullet – E_{high}

установлено для акустических мод в разупорядоченных системах [5, 6].

Более поразительное поведение было обнаружено для высокоэнергетической моды. Энергия этих возбуждений резко уменьшается по направлению к $q_p/2$ (максимуму дисперсионного соотношения акустической моды). Дисперсия высокоэнергетической моды находится в противофазе во всей исследованной на спектрометрах BRISP и IN4 области q . Фактически полученная зависимость E_{low} и E_{high} от q аналогична поведению акустических и оптических фононов в высокосимметричных кристаллах.

В заключение: при использовании спектрометра BRISP мы смогли получить уникальную информацию о дисперсионном соотношении в металлическом стекле $Zr_{40}Ve_{60}$, состоящем из частиц различной массы.

Таким образом, данная работа доказывает, что поведение высокоэнергетической моды независимо от типа разупорядоченной системы, состоящей из частиц различной массы.

Г. Сырых благодарит сотрудников Института Лауэ-Ланжевена (ILL) за гостеприимство и предоставленную возможность проведения эксперимента. Работа частично поддержана РНФ (# 16-12-10065).

1. J.-B. Suck, H. Rudin, H.-J. Güntherodt, and H. Beck, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 49 (1983).
2. M. Calvo, U. Dahlborg, C. Svensson-Huldt, M. Arai, A. D. Taylor, W. S. Howells, and R. G. Delaplane, *J. Non-Cryst. Solids* **156–158**, 53 (1993).
3. T. Otomo, M. Arai, Y. Inamura, J.-B. Suck, S. M. Bennington, and K. Suzuki, *J. Non-Cryst. Solids* **232–234**, 613 (1998).
4. T. Scopigno, A. Gessini, F. Bencivenga, and R. Verbeni, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 135501 (2006).
5. J. Hafner, *J. Phys. C* **16**, 5773 (1983).
6. T. Otomo, M. Arai, J.-B. Suck, and S. M. Bennington, *J. Non-Cryst. Solids* **312–314**, 599 (2002).
7. G. F. Syrykh, A. S. Ivanov, N. A. Klimenko, Yu. V. Lisichkin, H. Mutka, and J. A. Stride, *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 104241 (2008).
8. W. Montfrooij, P. Westerhuijs, V. O. de Haan, and I. M. de Schepper, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 544 (1989).
9. J. Bosse, G. Jacucci, M. Ronchetti, and W. Schirmacher, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 3277 (1986).
10. F. Sciortino and S. Sastry, *J. Chem. Phys.* **100**, 3881 (1994).
11. R. P. C. Schram, G. H. Wegdam, and A. Bot, *Phys. Rev. A* **44**, 8062 (1991).
12. M. Alvarez, F. J. Bermejo, P. Verkerk, and B. Roessli, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 2141 (1998).
13. E. Enciso, N. G. Almarza, P. Domínguez, M. A. González, and F. J. Bermejo, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 4233 (1995).
14. T. Bryk and I. Mryglod, *J. Phys.: Condens. Matter* **14**, L445 (2002).
15. R. Fernandez-Perea, F. J. Bermejo, J. L. Martínez, E. Enciso, and P. Verkerk, *Phys. Rev. E* **59**, 3212 (1999).
16. A. Campa and E. G. D. Cohen, *Phys. Rev. A* **41**, 5451 (1990).
17. D. Aisa, S. Aisa, E. Babucci et al. (Collaboration), *J. Non-Cryst. Solids* **352**, 5130 (2006).