

ОПТИЧЕСКОЕ ОБНАРУЖЕНИЕ ПРИМЕСНЫХ ЗОН В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ БИНАРНЫХ СПЛАВАХ НА ОСНОВЕ НИКЕЛЯ

Г. С. Крикчик, Р. С. Зайцева

Длительное время теория бинарных сплавов основывалась на простейшем представлении ригидной зоны [1], т. е. на гипотезе о полной потере индивидуальности электронами проводимости компонент сплава в общей недеформируемой зоне. Начиная с работ Лифшица [2], стала развиваться иная точка зрения о формировании энергетических зон компонент сплава при существенном сохранении их индивидуальных характеристик. Эренрайх с сотрудниками [3] показали возможность количественных расчетов кривой плотности состояний неупорядоченных сплавов на основе метода когерентного потенциала. Метод когерентного потенциала был применен для расчета плотности электронных состояний в реальных металлических парамагнитных [3] и ферромагнитных [4] бинарных сплавах. Одним из важнейших физических следствий указанных работ является возможность возникновения узких примесных зон с относительно высокой плотностью состояний вблизи границы основной зоны. Форма и положение границ примесной зоны зависят от степени перекрытия чистых металлов, от положения сингулярностей в исходных зонах и от концентрации примеси, в частности, типичным случаем является резкое увеличение плотности примесных состояний выше границы основной зоны.

В данной работе показано, что, если постулировать механизм не-прямых оптических переходов из основной зоны в примесную, то можно оптическим методом обнаружить появление примесной зоны в бинарных сплавах, оценить ее положение и ширину, а также предложить способ восстановления кривой плотности состояний основного металла, отображенной в примесной зоне.

Методом Битти были измерены оптические характеристики поликристаллических образцов сплавов 99%Ni – 1%Co, 97%Ni – 3%Co, 95%Ni – 5%Co, 99%Ni – 1%Mo, 98%Ni – 2%Fe в интервале 0,5 – 2,0 эв при комнатной температуре.

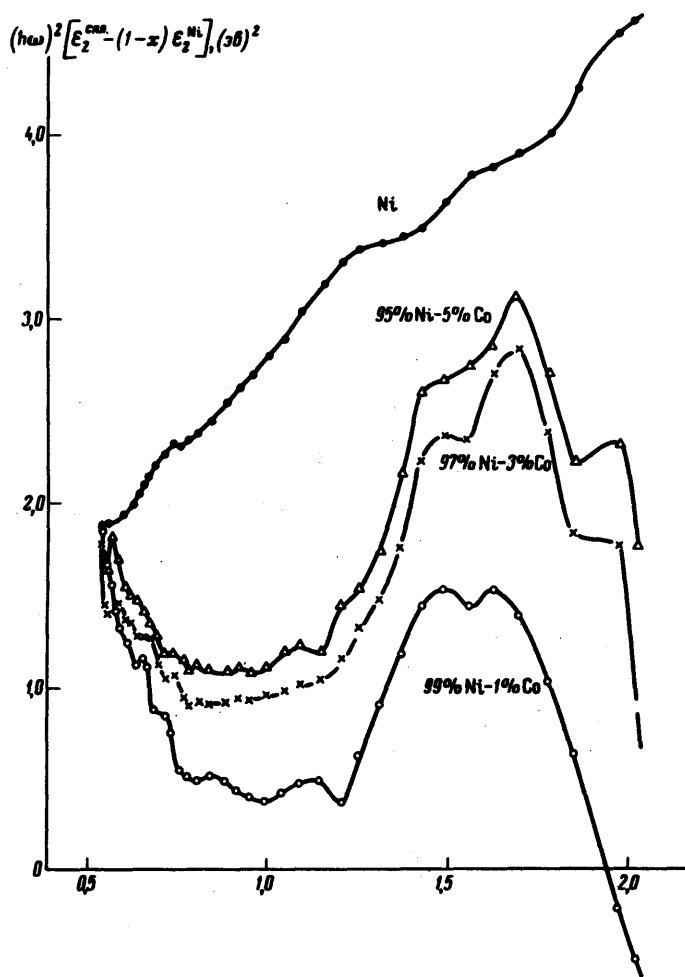


Рис. 1

На рис. 1 и 2 приведены для этих сплавов кривые частотной зависимости функции $(\hbar\omega)^2 \epsilon_2$ пропорциональной межзонной плотности состояний (ϵ_2 – мнимая часть диэлектрической проницаемости, x – концентрация примеси). На рис. 3 пунктиром показана схема расположения примесной зоны в сплавах Ni – Co относительно кривой плотности состояний никеля, взятой из [5], которая позволяет дать удовлетворительную интерпретацию полученных результатов. Вид кривой плотности состояний примесной зоны вблизи границы основной зоны качественно соответствует результатам расчетов, проведенных в [2, 3] т. е. характеризуется резким нарастанием плотности состояний выше края основной зоны и бесструктурным фоном с малой плотностью состояний в области основной зоны. Положение высокоэнергетического края при-

месной зоны выбрано нами на основании следующих соображений: первый максимум межзонной плотности состояний должен соответствовать переходу из состояний вблизи уровня Ферми (C) в примесную зону. Длинноволновый край этих переходов соответствует интервалу ($C + D$) и составляет примерно $0,3 - 0,4 \text{ эв}$.

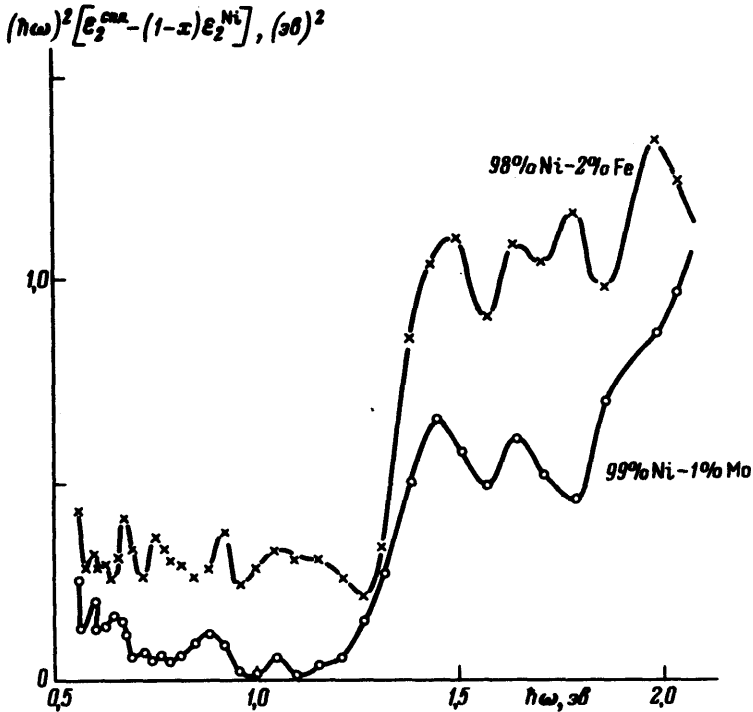


Рис. 2

(Воспроизведенная на рис. 3 кривая плотности состояний соответствует только одной (IV) из рассмотренных в [5] Цорнбергом моделей). Поэтому можно предположить, что наблюдаемый на рис. 1 спад межзонной плотности состояний в области $0,70 - 0,75 \text{ эв}$ соответствует коротковолновой границе этого максимума ($C + E$). Отсюда определяем, что ширина примесной зоны составляет приблизительно $0,3 - 0,4 \text{ эв}$. С этой точки зрения наличие второго максимума межзонной плотности состояний в области $1,3 - 1,8 \text{ эв}$ соответствует переходам из максимума B в примесную зону. Ширина этого максимума $0,5 - 0,6 \text{ эв}$ соответствует сумме ширин максимума B ($\approx 0,2 \text{ эв}$) и примесной зоны ($\approx 0,4 \text{ эв}$).

Кривые межзонной плотности состояний для сплавов $Ni - Fe$ и $Ni - Mo$ (рис. 2) также могут быть поняты на основании схемы рис. 3. Основная особенность в области $1,2 - 1,4 \text{ эв}$, обусловленная переходами $B \rightarrow D$ и определяемая не характером примесной зоны, а относительным положением максимума B и края основной зоны, четко наблюдается для обоих сплавов. Некоторые характерные отличия кривых для сплавов $Ni - Fe$ и $Ni - Mo$ в области $0,5 - 0,7 \text{ эв}$ и $1,8 - 2,0 \text{ эв}$ могут объясняться либо большей шириной примесной зоны,

либо более сильным влиянием примесей Fe и Mo на форму основной зоны. Кроме того, для сплавов Ni – Mo в области 1,8 – 2,0 эв может наблюдаться вклад переходов из обменно смещенного (на величину порядка 0,4 эв [5, 6]) максимума В другой спиновой подзоны никеля в обменно нерасщепленную примесную зону.

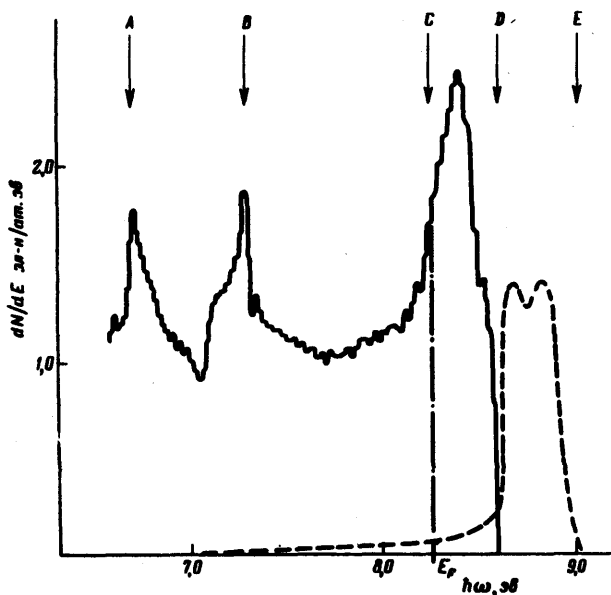


Рис. 3

Таким образом, в данной статье даны прямые экспериментальные доказательства появления в бинарном неупорядоченном сплаве с малой концентрацией примеси относительно узкой примесной зоны, локализованной вблизи края основной зоны. Кроме того, наблюдение межзонной плотности оптических переходов в примесную зону представляет хороший метод изучения кривой плотности состояний основного металла, который пригоден как для ферромагнитных так и для неферромагнитных сплавов.

Московский
государственный университет
им. М.В.Ломоносова

Поступила в редакцию
5 апреля 1972 г.

Литература

- [1] N.F.Mott, H.Jones. The Theory and Properties of Metals and Alloys. (Clarendon Press, Oxsford, England, 1936).
- [2] И.М.Лифшиц. УФН, 83, 617, 1964; ЖЭТФ, 53, 743, 1967.
- [3] V.Velicky, S.Kirkpatrick, H.Ehrenreich. Phys. Rev., 175, 747, 1968; В1, 3250, 1970.
- [4] H.Hasegawa, J.Kanamory. J. Phys. Soc. Japan., 31, 382, 1971.
- [5] E.I.Lornberg. Phys. Rev., В1, 244, 1970.
- [6] Г.С.Кринчик, Е.А.Ганьшина, В.С.Гущин. ЖЭТФ, 60, 209, 1971.