

97-297



ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

P14-97-297

Г.Ф.Сырых*, М.Г.Землянов*, С.Н.Ишмаев*, Г.Чимид

ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИКИ
МЕТАЛЛИЧЕСКОГО СТЕКЛА $\text{Ni}_{64}\text{Zr}_{36}$ МЕТОДОМ
НЕЙТРОННОГО ИЗОТОПИЧЕСКОГО КОНТРАСТА

Направлено в журнал «Физика твердого тела»

*РНЦ «Курчатовский институт», 123182, Москва, Россия

1997

1. Введение

На спектрометре КДСОГ-М проведены измерения спектров неупругого рассеяния нейтронов на образцах металлического стекла $Ni_{64}Zr_{36}$ с различным изотопическим составом. Образцы были приготовлены на основе естественной смеси изотопов Ni (полное сечение рассеяния нейтронов $\sigma=18$ барн) и изотопа ^{60}Ni ($\sigma=1.08$ барн). Это позволило получить парциальные спектры колебаний атомов Ni и Zr. Установлено ослабление межатомного взаимодействия Ni с окружающими атомами, но менее существенное, чем предсказано численными расчетами.

Детальное описание атомной структуры и динамики неупорядоченных систем является основой для понимания многих физических свойств, характеризующих аморфное состояние: перехода стекло - жидкость (который по своей природе связан с колебаниями атомов) [1], низкотемпературной теплоемкости [2], теплопроводности [3], электропроводности [4] и сверхпроводимости [5] металлических стекол и т.д. Важную роль при этом играет экспериментальная верификация имеющихся теоретических подходов.

Металлические стекла являются, по крайней мере, двухкомпонентными системами. Поэтому наиболее подробная информация о структуре и динамике содержится в парциальных функциях радиального распределения атомов $\rho_{ij}(r)$ и парциальных колебательных спектральных функциях $f_{ij}(k, \omega)$ (i и j принимают значения от 1 до p , p - число элементов в системе). Метод упругого и неупругого рассеяния тепловых нейтронов с применением изотопического контраста [6] позволяет измерять парциальные структурные факторы $S_{ij}(k)$ и парциальные динамические структурные факторы $S_{ij}(k, \omega)$ и восстанавливать функции $\rho_{ij}(r)$ и $f_{ij}(k, \omega)$. Экспериментальное определение факторов $S_{ij}(k)$ было успешно проведено для ряда металлических стекол [7,8]. Однако эксперименты по определению факторов $S_{ij}(k, \omega)$ пока не проводились из-за высокой стоимости изотопно обогащенных образцов.

Очень важной, хотя и менее детальной, информацией является парциальная плотность колебательных состояний $g_i(\omega)$. В методическом плане получение этих данных является более простой задачей. В данной работе представлены результаты экспериментального определения функций $g_{Ni}(\omega)$ и $g_{Zr}(\omega)$ в металлическом стекле $Ni_{64}Zr_{36}$.

2. Приготовление образцов и проведение измерений

Были приготовлены два химически идентичных образца $Ni_{64}Zr_{36}$, но различного изотопного состава: первый образец приготовлен из естественной смеси изотопов Ni, а второй - из изотопа ^{60}Ni . Металлические стекла получены методом быстрой закалки из расплава на вращающемся медном диске в инертной атмосфере Ar. Линейная скорость на поверхности диска была 40 м/с. Образцы получены в виде лент шириной ~2 мм, толщиной ~30 мкм. Вес "изотопного" образца составил 7.2 грамма, "естественного" - 30 грамм. Аморфное состояние образцов подтверждено рентгенографическим методом.

Известно [9], что сечение неупругого некогерентного рассеяния нейтронов на многокомпонентном образце пропорционально сумме парциальных плотностей колебательных состояний отдельных элементов $g_i(\omega)$

$$\sigma(\omega) = \sum (c\sigma/m)_i \exp(-2W_i) g_i(\omega),$$

где c , σ и m - концентрация, полное сечение рассеяния нейтронов и масса атома i соответственно; $\exp(-2W_i)$ - фактор Дебая - Валлера.

Зависимость рассеивающей способности нейтронов атомными ядрами от изотопического состава ($\sigma=18.0$ и 1.08 барн для естественного Ni и изотопа ^{60}Ni соответственно) позволяет из измерений на двух образцах безмодельно восстановить функции $g_{Ni}(\omega)$ и $g_{Zr}(\omega)$.

Спектры $\sigma(\omega)$ измерены на спектрометре КДСОГ-М, установленном на реакторе ИБР-2 [10]. Измерения выполнены при комнатной температуре для углов рассеяния θ , равных 80, 100, 120 и 140 градусов. Спектры обрабатывались в некогерентном приближении [11]. Измерение фона проводилось на пустой кассете. Учет факторов Дебая - Валлера и многократного рассеяния в гауссовом приближении выполнялись итерационным методом.

На рис.1 показаны времяпролетные спектры рассеянных нейтронов на системе $Ni_{64}Zr_{36}$ с различным изотопным составом (фон и многократное

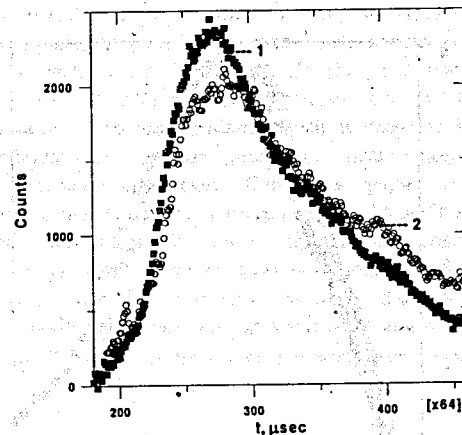


Рис.1. Времяпролетные спектры рассеянных нейтронов на образцах металлических стекол: 1 - ест. $Ni_{64}Zr_{36}$ и 2 - $^{60}Ni_{64}Zr_{36}$

рассеяние учтены). Для образца, приготовленного на основе естественного Ni, преобладает рассеяние на атомах Ni (соотношение весовых факторов $(c\sigma/m)_{Ni}/(c\sigma/m)_{Zr} = 0.89/0.11$). А для образца с изотопом ^{60}Ni рассеяние в основном идет на атомах Zr, т.к. то же самое соотношение равно $0.32/0.68$.

Качественное различие в спектрах рассеянных нейтронов отражает разный характер колебательных спектров для атомов Ni и Zr.

3. Результаты и обсуждение

Из полученных спектров рассеянных нейтронов были восстановлены парциальные плотности колебательных состояний (ППКС) для атомов Ni и Zr (рис.2). Видно, что ППКС для более тяжелого атома Zr (соотношение масс $m_{Zr}/m_{Ni} = 1.52$) сконцентрирована в большей мере в области низких частот. Однако в окрестности максимальной частоты спектра вклад атомов Ni и Zr соизмерим. Были рассчитаны вторые частотные моменты по парциальным спектрам: $\langle \omega^2 \rangle = \int_0^\infty \omega^2 g_i(\omega) d\omega / \int_0^\infty g_i(\omega) d\omega$. Из-за конечного разрешения

спектрометра спектры ниже 3 мэВ аппроксимировались зависимостью Дебая (на величину $\langle \omega^2 \rangle$ эта часть спектра заметного влияния не оказывает). Вторые частотные моменты связаны со средней силовой константой взаимодействия (В) данного элемента со всеми окружающими атомами: $\langle \omega^2 \rangle_i = V/m_i$. Оказалось, что обратное соотношение вторых частотных моментов по спектрам атомов Zr и Ni равно 1.12, т.е. меньше, чем соотношение масс, равное 1.52, что свидетельствует о более слабом межатомном взаимодействии для атомов Ni по сравнению с атомами Zr.

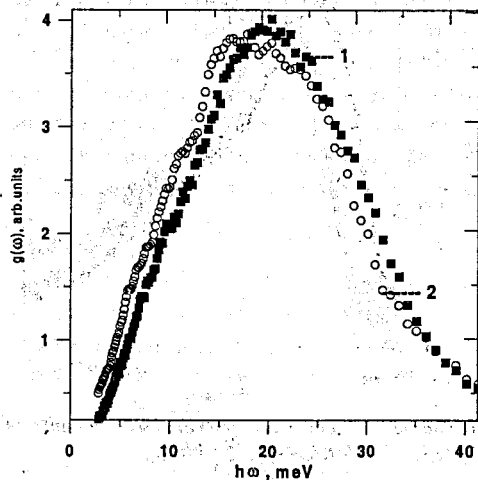


Рис.2. Парциальные плотности колебательных состояний атомов Ni и Zr в металлическом стекле Ni₆₄Zr₃₆: 1 - g_{Ni}(ω) и 2 - g_{Zr}(ω)

В работе [12] методом компьютерного моделирования вычислены парциальные динамические структурные факторы и спектры ППКС в

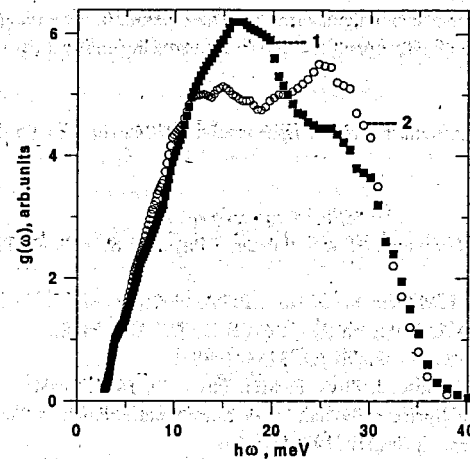
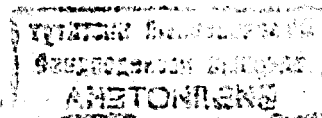


Рис.3. Расчетные парциальные плотности колебательных состояний атомов Ni и Zr в металлическом стекле Ni₆₅Zr₃₅: 1 - g_{Ni}(ω) и 2 - g_{Zr}(ω) (из работы [12])

металлической системе Ni_{1-x}Zr_x. Использовались парные потенциалы межатомного взаимодействия, полученные из квантово-механических расчетов [13]. Из них следовало, что взаимодействие Ni-Ni значительно ослаблено по сравнению с взаимодействиями Ni-Zr и Zr-Zr. На рис.3 показаны расчетные спектры ППКС атомов Ni и Zr для металлического стекла Ni₆₅Zr₃₅, взятые из работы [12]. Отметим, что экспериментальный и расчетный энергетический интервалы колебательных спектров (различием химического состава можно пренебречь) практически совпадают. Однако в форме спектров имеются различия. Расчетные колебательные спектры атомов Ni и Zr в низкочастотной области и вблизи максимальной частоты практически совпадают. Различие наблюдается в средней части спектров: максимум колебательной плотности для атомов Ni находится при более низких частотах, чем для атомов Zr. Это приводит к тому, что соотношение вторых частотных моментов $\langle \omega^2 \rangle_{Ni} / \langle \omega^2 \rangle_{Zr}$ оказывается равным 0.97, т.е. меньше экспериментального значения - 1.12.

4. Заключение

Таким образом, методом неупругого рассеяния нейтронов с применением изотопического контраста измерены парциальные плотности колебательных состояний в металлическом стекле Ni₆₄Zr₃₆. Колебательный спектр тяжелых атомов Zr смещен в область более низких значений частот по сравнению со спектром атомов Ni. Тем не менее оценка средних констант взаимодействия для различных элементов свидетельствует о более слабой связи атомов Ni со всеми окружающими атомами. Компьютерное моделирование атомной динамики в металлическом стекле Ni₆₅Zr₃₅ дает хорошее совпадение



частотного интервала с экспериментально измеренным. Однако предсказывает более радикальное ослабление константы взаимодействия для атомов Ni.

Работа выполнена в рамках программы РФФИ (проект 95-02-04690).

Список литературы.

- [1]. U.Bengtzelius, W.Gotze and A.Sjolander, J.Phys. C: Solid State Phys. 17, 5915 (1984).
- [2]. U.Mizutani and T.Mizoguchi, J. Phys. F: Metal. Phys. 11, 7, 1385 (1981).
- [3]. I.R.Matey and A.C.Anderson Pys. Rev. B16, 8, 3406 (1978).
- [4]. J.Hafner. J. Non-Cryst. Solids 69, 3253, (1985).
- [5]. J.Jackle and K.Frobose. J. Phys. F: Met. Phys. 10, 1471, (1980).
- [6]. S.Lovesey and T.Springer. Dynamics of Solids and Liquids by Neutron Scattering (Berlin: Springer) (1977), 812 с.
- [7]. S.Lefebvre, A.Quiry, J.Bigot, Y.Calvayrac and R.Bellissent. J. Phys. F: Met. Phys. 15, L99 (1985).
- [8]. E.Svab and S.N.Ishmaev. Exp. Tech. Phys. 36, 89, (1988).
- [9]. Н.А.Черноплеков, М.Г.Землянов, Е.Г.Бровман и А.Г.Чечерин. ФТТ 5, 1, 112 (1963).
- [10]. Т.Балука, А.В.Белушкин, С.И.Брагин, Т.Залески, М.З.Ишмухаметов, И.Натканец, В.Олеярчик и Я.Павелчик. Препринт P13-84-242, ОИЯИ, Дубна, (1984), 15 с.
- [11]. В.С.Оскотский. ФТТ 9, 240 (1967).
- [12]. J.Hafner and M.Krajci. J. Phys.: Condens. Matter 6, 4631, (1994).
- [13]. Ch.Hausleitner and J.Hafner. Phys. Rev. B45, 1, 115, (1992).