ЖЭТФ, 1997, том 111, вып. 2, стр. 759–762

ВЛИЯНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМ НА ВЕЛИЧИНЫ ВЕРОЯТНОСТИ ЭФФЕКТА МЕССБАУЭРА И ТЕМПЕРАТУРНОГО МНОЖИТЕЛЯ ДЕБАЯ–ВАЛЛЕРА

Л. Л. Буишвили, Л. Ж. Захаров, И. Н. Кахниашвили, Г. Л. Топчишвили

Институт физики Академии наук Республики Грузия
380077, Тбилиси, Республика Грузия

Поступила в редакцию 27 августа 1996 г.

Изучено влияние добавочной плотности колебательных состояний, присущих неупорядоченным системам, на эффект Мессбауэра и температурный множитель Дебая–Валлера при температурах порядка 10 К. Показано, что влияние добавочной плотности колебательных состояний выражается в увеличении показателя температурной зависимости среднеквадратичного отклонения и должно проявляться при измерении температурного фактора и вероятности процесса без отдачи.

В последнее время интенсивно изучаются физические свойства неупорядоченных систем: стеклообразных полупроводников, диэлектриков и металлических стекол. Было обнаружено, что при температурах $T < 1$ К многие свойства неупорядоченных систем не описываются в рамках теории Дебая или какой-либо из ее модификаций. Поэтому для описания этих свойств Андерсон и Филлипс ввели модель туннельных двухуровневых систем [1]. Двухуровневая система представляет собой атом, который может находиться в двух почти эквивалентных состояниях. Переход из одного состояния в другое осуществляется при помощи туннелирования. Основной особенностью этих возбуждений является то, что плотность состояний у них слабо зависит от энергии и достигает величин порядка 10^{46} Дж$^{-1}\cdot$м$^{-3}$.

В работе [2] был рассчитан эффект Мессбауэра для ядер, находящихся в образце с двухуровневыми системами, и было показано, что при температурах ниже 10 К вклад двухуровневых систем является определяющим.

Кроме температурного интервала $T < 1$ К представляет интерес интервал $10 < T < 30$ К. При этих температурах эксперименты с использованием некогерентного рассеяния нейтронов и комбинационного рассеяния света позволили найти свойства, характерные для спектра низкоэнергетических колебательных состояний неупорядоченных систем, одинаковые как для стеклообразных полупроводников и диэлектриков, так и для металлических стекол [3].

При проведении перечисленных выше экспериментов была обнаружена добавочная плотность колебательных состояний в диапазоне 3–15 К, природа которой пока не вполне ясна. Однако установлено, что колебательные возбуждения, ответственные за избыточную плотность колебательных состояний в стеклах, локализованы в областях, содержащих от нескольких десятков до сотен атомов. Кроме того, анализ спектров показывает, что эти возбуждения подчиняются статистике Бозе, вследствие чего избыточную плотность колебательных состояний называют бозонным пиком [3].

Бозонный пик имеет вид

$$\Delta f(\omega) = \Delta f_m(\omega) \exp\left[\frac{-\ln(\omega/\omega_m)}{2\sigma^2}\right],$$

где σ — параметр, равный 0.48 и характеризующий ширину бозонного пика, $\Delta f_m(\omega)$ — максимальная величина добавочной плотности колебательных состояний, а ω_m — соответствующая ей частота. Согласно экспериментальным данным, $\Delta f_m(\omega)$ в два–десять раз превышает величину плотности колебательных состояний в модели Дебая [3].

Целью данной работы является учет влияния бозонного пика при расчете вероятности процесса без отдачи. Вероятность эффекта Мессбауэра определяется по формуле [4]

$$f = \exp(-k^2\langle u^2\rangle),$$

где k — волновой вектор γ-кванта, $\langle u^2\rangle$ — среднеквадратичное отклонение от положения равновесия.

Как известно, $\langle u^2\rangle$ определяется из соотношения [4]

$$\langle u^2\rangle = \int_0^{\omega_D} f(\omega)u(\omega)d\omega = \int_0^{\omega_D} f(\omega)\frac{\hbar}{m_a N}\left[\frac{1}{\exp(\hbar\omega/k_B T)+1} + \frac{1}{2}\right]\frac{d\omega}{\omega},$$

где N — число частиц в системе, m_a — масса атома, $f(\omega)$ — плотность колебательных состояний, ω_D — частота Дебая, соответствующая температуре Дебая Θ, k_B — постоянная Больцмана.

С учетом бозонного пика

$$f(\omega) = a\left\{f_D(\omega) + 10 f_D(\omega_D)\exp\left[\frac{-\ln^2(\omega_m/\omega)}{2\sigma^2}\right]\right\},$$

где a — постоянная нормировки, которую можно, с хорошим приближением, принять равной $9N/\omega_D^3$, а $f_D(\omega)$ — плотность колебательных состояний по Дебаю, равная $a\omega^2$.

С учетом сказанного выше для $\langle u^2\rangle$ получим

$$\langle u^2\rangle = \langle u^2\rangle_D + \langle u^2\rangle_{bos},$$

где $\langle u^2\rangle_D$ — среднеквадратичное смещение в модели Дебая, а $\langle u^2\rangle_{bos}$ — смещение, обусловленное наличием добавочной плотности колебательных состояний. Известно, что в приближении $T \ll \Theta$ выражение для $\langle u^2\rangle_D$ имеет вид

$$\langle u^2\rangle_D = \frac{9\hbar^2}{m_a k_B\Theta}\left[\frac{1}{4} + \left(\frac{T}{\Theta}\right)^2\frac{\pi^2}{6}\right].$$

Для $\langle u^2\rangle_{bos}$ можем написать

$$\langle u^2\rangle_{bos} = \frac{10\cdot 9\hbar^2}{m_a k_B\Theta}\frac{\hbar\omega_m}{k_B\Theta}\times$$
$$\times\int_0^{\omega_D}\left[\frac{1}{\exp(\hbar\omega/kT)+1} + \frac{1}{2}\right]\exp\left[\frac{-\ln^2(\omega_m/\omega)}{2\sigma^2}\right]\frac{d\omega}{\omega}. \quad (1)$$

Для описания вклада добавочной плотности колебательных состояний в полную вероятность эффекта Мессбауэра рассмотрены ядра Ir^{193}, Au^{197}, Eu^{153}, которые являются примесями в твердом теле с температурой Дебая $\Theta \sim 1000$ К. Значения энергии γ-квантов и энергии отдачи взяты из работы [4] и равны соответственно 73 и $1.5 \cdot 10^{-5}$ кэВ; 77.3 и $1.6 \cdot 10^{-5}$ кэВ; 97.4 и $3.3 \cdot 10^{-5}$ кэВ. С учетом сказанного для вероятности процесса без отдачи, рассчитанного по модели Дебая, имеем

$$f_D(\mathrm{Ir}^{193}) \propto \exp\left(-0.26 - 0.17 \cdot 10^{-5} T^2\right),$$
$$f_D(\mathrm{Au}^{197}) \propto \exp\left(-0.28 - 0.18 \cdot 10^{-5} T^2\right),$$
$$f_D(\mathrm{Eu}^{153}) \propto \exp\left(-0.57 - 0.38 \cdot 10^{-5} T^2\right).$$

Для оценки вклада добавочной плотности колебательных состояний в полную вероятность процесса без отдачи было проведено численное интегрирование выражения (1) и получено

$$f_{bos}(\mathrm{Ir}^{193}) \propto \exp\left(-7.9 \cdot 10^{-2} - 0.50 \cdot 10^{-5} T^{2.5}\right),$$
$$f_{bos}(\mathrm{Au}^{197}) \propto \exp\left(-8.0 \cdot 10^{-2} - 0.51 \cdot 10^{-5} T^{2.5}\right),$$
$$f_{bos}(\mathrm{Eu}^{153}) \propto \exp\left(-6.2 \cdot 10^{-2} - 0.40 \cdot 10^{-5} T^{2.5}\right).$$

Кроме вероятности эффекта Мессбауэра величина $\langle u^2 \rangle$ входит также и в формулу температурного фактора Дебая–Валлера, который, согласно [5], имеет вид

$$I = e^{-2B},$$

где

$$B = 8\pi^2 \langle u^2 \rangle \frac{\sin\alpha}{\lambda^2},$$

λ — длина волны рентгеновского излучения, α — угол дифракции.

В качестве примера рассмотрим изменение температурной зависимости $\langle u^2 \rangle$ при наличии добавочной плотности колебательных состояний для Al^{27}. После подстановки значений параметров Al^{27} в (1) и численного интегрирования для $\langle u^2 \rangle_{bos}$ в интервале $0 < T < \hbar\omega_m / k_B$ получим

$$\langle u^2 \rangle_{bos} \approx 7 \cdot 10^{-7} T^{2.5} + 1.1 \cdot 10^{-2},$$

а для $\langle u^2 \rangle_D$ —

$$\langle u^2 \rangle_D \approx 7 \cdot 10^{-7} T^{1.9} + 0.9 \cdot 10^{-2}.$$

Все сказанное выше позволяет сделать вывод, что при вычислении вероятности эффекта Мессбауэра и величины множителя Дебая–Валлера в интервале около 10 К необходимо учитывать особенности низкоэнергетического спектра колебательных состояний, в частности, добавочную плотность колебательных состояний и влияние двухуровневых систем. Последнее было рассмотрено в работе [2]. Влияние же добавочной плотности колебательных состояний выражается в увеличении показателя температурной зависимости $\langle u^2 \rangle$ с 2 до 2.5–2.7 и должно проявляться при измерениях температурного фактора и вероятности эффекта Мессбауэра.

Настоящая работа была поддержана Международным научным фондом (грант № МХ К000).

Литература

1. Б. П. Смоляков, Е. П. Хаймович, УФН **136**, 317 (1982).
2. Л. Л. Буишвили, Л. Ж. Захаров, Г. Л. Топчишвили и др., ЖЭТФ **106**, 1436 (1994).
3. В. К. Малиновский, В. Н. Новиков, А. П. Соколов, УФН **163**, 119 (1993).
4. В. С. Шпинель, *Резонанс гамма-лучей в кристаллах*, Наука, Москва (1969).
5. А. Гинье, *Рентгенография кристаллов*, Физматгиз, Москва (1961).