

отталкивание в парах О-О. Таким образом, при наличии добавок СаО, Y₂O₃ и др. перенос заряда от подрешетки металла к подрешетке кислорода уменьшается, что и стабилизирует последнюю относительно конденсации моды LO.

Список литературы

- [1] Negita K. // Acta Met. 1989. V. 37. N 1. P. 313-317.
- [2] Heuer H., Chaim R., Lanteri V. // Acta Met. 1987. V. 35. P. 661-665.
- [3] Ishibashi Y., Dvorak V. // J. Phys. Soc. Jap. 1989. V. 58. N 11. P. 4211-4214.
- [4] Jansen H.J.F., Gardner J.A. // Physica B. 1988. V. 150. P. 10-18.
- [5] Morinaga H., Adachi H., Tsukada M. // J. Phys. Chem. Sol. 1983. V. 44. N 4. P. 301-306.
- [6] Zandiehnam F., Murray R.A. // Physica B. 1988. V. 150. P. 19-24.
- [7] Наумов И.И., Ольховик Г.А., Великохатный О.И., Апаров Н.Н. // Изв. РАН. Неорганические материалы. 1992. Т. 28. № 4. С. 805-811.
- [8] Medvedeva N.I., Zhukov V.P., Khodos M.Ya., Gubanov V.A. // Phys. Stat. Sol. (b). 1990. V. 60. N 2. P. 517-527.

Институт физики прочности
и материаловедения РАН
Томск

Поступило в Редакцию
9 июня 1992 г.

УДК 541.14

© Физика твердого тела, том 35, № 4, 1993
Solid State Physics, vol. 35, N 4, 1993

О СВЯЗИ МЕЖДУ ЭНЕРГИЕЙ $(\sigma + \pi)$ -ПЛАЗМОНА И УДЕЛЬНОЙ ПЛОТНОСТЬЮ ДЛЯ ТВЕРДЫХ ОБРАЗЦОВ C₆₀

Ю.М.Шульга, А.С.Лобач

Известно, что плазменная частота ω_p для свободного электронного газа определяется концентрацией электронов n

$$\omega_p = (4\pi n e^2 / m)^{1/2}, \quad (1)$$

где e и m — заряд и масса электрона соответственно [1]. Частота плазменных колебаний электронов в твердом теле отличается от соответствующей величины для свободных электронов обычно вследствие поляризации ионного остова. Для частоты плазмона, скорректированного на поляризацию остова, имеем выражение [1].

$$\omega_p' = (4\pi n e^2 / m \epsilon_{core})^{1/2}. \quad (2)$$

Значение ϵ_{core} можно рассчитать из уравнения

$$(\epsilon_{core} - 1) / (\epsilon_{core} + 2) = (4\pi / 3) \left(\sum N_i \alpha_i \right), \quad (3)$$

где N_i — плотность атомов с ионным остовом, имеющим поляризуемость α_i [2].

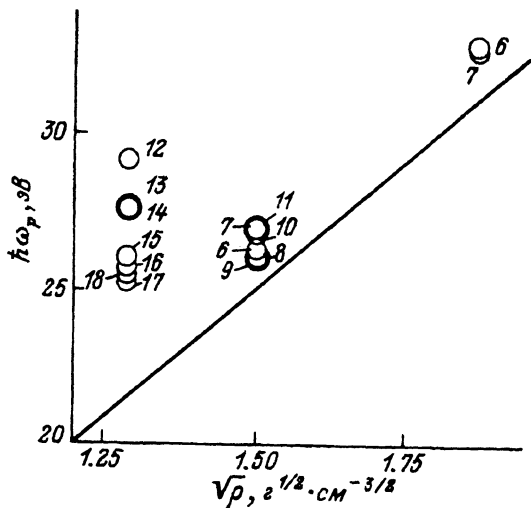


Рис. Зависимость $\hbar\omega_p(\sigma + \pi)$ от $\rho^{1/2}$ для углеродных материалов.

Цифры у точек соответствуют номеру работы (см. список литературы), в которой приводимое значение было получено. Прямая линия — расчет по формуле (7).

Отметим здесь, что поляризуемость иона C^{4+} , по Полингу, равна $1.3 \cdot 10^{-27} \text{ см}^3$ [3]. И для графита — наиболее устойчивой модификации твердого углерода — получаем

$$N_C = N_A \rho / A = 1.12 \cdot 10^{23} \text{ см}^{-3}, \quad (4)$$

N_A — число Авогадро, A — атомный вес углерода, $\rho = 2.25 \text{ г/см}^3$ [4]. Тогда, согласно (3), при плазменных колебаниях всех валентных электронов $\epsilon_{1S} = 1.0018$. Легко показать, что и для других материалов на основе углерода ϵ_{1S} незначительно отличается от единицы.

Для плазменных колебаний π -электронов ситуация иная, так как поляризуемость σ -электронов, являющихся внутренними по отношению к этим колебаниям, может быть существенной. Полагая, что плазменные колебания всех валентных электронов и отдельно π -электронов протекают в одних и тех же областях твердого тела, из (2) можно определить коэффициент, учитывающий поляризацию σ -электронов (при условии, что $\epsilon_{1S} = 1$)

$$\epsilon_\sigma = 0.25 \{ [\hbar\omega_p(\sigma + \pi)] / [\hbar\omega_p(\pi)] \}^2. \quad (5)$$

Коэффициент 0.25 в формуле (5) определяется отношением числа π -электронов к числу всех валентных электронов. В соответствии с экспериментальными данными работы [5], где в рамках одного метода были измерены энергии плазмонов для графита (26.6 и 6.6 эВ), стеклоуглерода (25.2 и 5.7), C_{60} (25.2 и 5.8) и C_{70} (24.8 и 5.7), значения ϵ_σ составляют 4.1, 3.9, 4.9 и 4.8 для графита, стеклоуглерода, C_{60} и C_{70} соответственно. Видно, что значение ϵ_σ для фуллеренов превышает значения ϵ_σ для графитоподобных материалов. Оценка поляризуемости иона C^+ , согласно (3), с учетом (4) дает величины α , равные $1.07 \cdot 10^{-24}$ и $1.64 \cdot 10^{-24} \text{ см}^3$ для графита и C_{60} соответственно. Для C_{70} и стеклоуглерода такие оценки провести невозможно, так как значения ρ для этих веществ известны недостаточно точно.

Связь между энергией плазмона $\hbar\omega_p$ и удельной плотностью ρ легко получить на основе соотношения

$$n = Z N_A \rho / A, \quad (6)$$

где Z — число валентных электронов, принимающих участие в плазменных колебаниях ($Z = 4$ для $(\sigma + \pi)$ -плазмона).

Если $\hbar\omega_p$ измерять в эВ, а ρ — в г/см³, то для материалов на основе углерода соотношение (1) с учетом (6) можно записать как

$$\hbar\omega(\sigma + \pi) = 16.637\rho^{1/2}. \quad (7)$$

На рисунке приведены зависимость $\hbar\omega(\sigma + \pi)$ от $\rho^{1/2}$ и точки, соответствующие алмазу [6,7] ($\rho = 3.511$ г/см³ [4]), графиту [6-11] и C₆₀ [12-18] ($\rho = 1.65$ г/см³ [19]). Видно, что для всех углеродных материалов имеется существенное отклонение измеренных величин $\hbar\omega(\sigma + \pi)$ от рассчитанных в приближении свободных электронов. Здесь следует отметить, что для других материалов, таких как карбиды, нитриды или силициды переходных металлов, имеется хорошее соответствие между измеренными и теоретическими величинами $\hbar\omega_p$ (см., например, [20,21]).

Можно думать, что причиной отклонения измеренных величин от теоретических заключается в том, что плотность валентных электронов (ПВЭ) в зоне плазменных колебаний заметно выше средней по объему. Для графита такое предположение кажется верным: ПВЭ должна быть высокой в базисной плоскости и низкой в межплоскостном пространстве. Введя в формулу (7) коэффициент k , учитывающий превышение ПВЭ в зоне плазменных колебаний над плотностью, усредненной по всему объему материала, мы получим $k = 1.1 - 1.2$ для графита и $k = 1.4 - 1.9$ для C₆₀. (Для алмаза формально рассчитанное значение $k = 1.1$).

Таким образом, для твердых образцов C₆₀, а также для алмаза и графита проведено сопоставление экспериментальных значений энергии $(\sigma + \pi)$ -плазмона с теоретическими, рассчитанными в приближении свободных электронов. Показано, что отклонение теоретических значений от экспериментальных является наибольшим для C₆₀. Основываясь на экспериментальных значениях энергий $(\sigma + \pi)$ - и π -плазмонов, мы продемонстрировали, что поляризуемость σ -электронов для C₆₀ в 1.5 раза выше аналогичной величины для графита.

Список литературы

- [1] Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М.: Наука. С. 283-289.
- [2] Там же. С. 477.
- [3] Pauling L. // Proc. Roy. Soc.(London). 1927. V. A114. P. 181-190.
- [4] Физический энциклопедический словарь. М.: Советская энциклопедия, 1966. Т. 5. С. 222.
- [5] Шульга Ю.М., Рубцов В.И., Моравский А.П., Лобач А.С. // Доклады АН. 1992 (в печати).
- [6] Zaluzec N.J. // Ultramicroscopy. 1982. V. 9. N 3. P. 319-323.
- [7] Martin P.J., Filipczuk S.W., Netterfield R.P. at al. // J. Mater. Sci. Lett. 1988. V. 7. N 4. P. 410-412.
- [8] Taft E.A., Philipp H.P. // Phys. Rev. 1965. V. 138. P. 197-201.
- [9] Berger S.D., McKenzie D.R., Martin P.J. // Phil. Mag. Lett. 1988. V. 57. N 6. P. 285-288.
- [10] Liang W.Y., Gundy S.L. // Phil. Mag. 1969. V. 19. N 11. P. 1031-1035.
- [11] Caputi L.S., Papaguo L. // Phys. Lett. 1983. V. A93. P. 417-418.
- [12] Tong W.M., Olbert D.A.A., You H.K. at al. // J. Chem. Phys. 1991. V. 95. N 12. P. 4709-4712.
- [13] Weaver J.H., Martin J.L., Komeda T. at al. // Phys. Rev. Lett. 1991. V. 66. N 13. P. 1741-1744.
- [14] Jost M.B., Troullier N., Poirier D.M. at al. // Phys. Rev. 1991. V. B44. N 4. P. 1966-1971.
- [15] Saito Y., Shinohara H., Ohshita A. // Japan J. Appl. Phys. 1991 V. 30. N 6. P. L1068-L1071.

- [16] Шульга Ю.М., Моравский А.П., Лобач А.С., Рубцов В.И. // Письма в ЖЭТФ. 1992. Т. 55. № 2. С. 137-140.
- [17] Hansen P.L., Fallon P.J., Kratschmer W. // Chem. Phys. Lett. 1991. V. 181. N 4. P. 367-370.
- [18] Dravid V.P., Lin S., Kappes M.M. // Chem. Phys. Lett. 1991. V. 185. N 1,2. P. 75-81.
- [19] Kratschmer W., Lamb L.D., Fostiropoulos K., Huffman D.R. // Nature. 1990. V. 347. P. 354-356.
- [20] Pfluger J.P., Fink J., Weber W. et al. // Phys. Rev. 1984. V. B30. N 3. P. 1155-1163.
- [21] Шульга Ю.М., Рубцов В.И., Дулинец Ю.Ч. и др. // Поверхность. 1989. № 12. С. 110-117.

Институт химической физики РАН
Черноголовка
Московская обл.

Поступило в Редакцию
2 ноября 1992 г.

© Физика твердого тела, том 35, № 4, 1993
Solid State Physics, vol. 35, N 4, 1993

ПАРАЛЛЕЛЬНАЯ НАКАЧКА МАГНИТНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ В УСЛОВИЯХ МОДУЛЯЦИИ ИХ СПЕКТРА

В.Л.Сафонов

Мощным инструментом исследования спиновых волн и магнитоупругих волн в магнетиках служит метод параметрического резонанса [1-3]. Переменное магнитное поле $h \cos \omega_p = t$ при достижении критической амплитуды $h_{c0} = \gamma_k / V_k$ (γ_k — скорость релаксации, V_k — коэффициент связи волн с полем накачки) вызывает экспоненциальный рост числа пар волн половинной частоты с $\omega_k = \omega_{-k} = \omega_p / 2$. Порог h_c указанного процесса возрастает, если условие резонанса нарушается [4,5] модуляцией спектра волн либо от внешнего источника, либо за счет магнитных флуктуаций, нарастающих в образце по мере приближения к точке фазового перехода.

Ранее в [6] нами был проведен расчет h_c в условиях шумовой и гармонической ($H_m \cos \omega_m$) модуляций. Однако, результаты [6] ограничены снизу областью частот, меньших γ_k , в которой пакет параметрических волн начинает "отслеживать" изменения спектра [7,8]. Поскольку реакция параметрической системы на низкочастотное воздействие представляет самостоятельный интерес, в настоящем сообщении мы обобщим выражение для h_c на эту область, кроме того, приведем формулы, необходимые для расчета свойств запорогового состояния системы в условиях шумовой модуляции.

Будем исходить из системы уравнений модифицированной S -теории [8], записанной в виде

$$\frac{d}{d\tau} \theta + b \sin \theta = \Delta(\tau) - \langle \Delta(\tau) \rangle - r_s N, \quad (1a)$$

$$\frac{d}{d\tau} I_n(N) = b \cos \theta - 1 - \eta N. \quad (16)$$