

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СПЛАВОВ НИКЕЛЬ—ЖЕЛЕЗО В ОБЛАСТИ МЕЖДУЗОННЫХ ПЕРЕХОДОВ

Н. Я. Горбань, В. С. Стащук, А. В. Шурин и
А. А. Шишловский

При комнатной температуре проведены исследования оптических свойств никеля, железа и сплавов никель—железо с концентрациями железа 10, 20, 30 и 40 ат.% в интервале энергий 1.1—4.9 эв. По измеренным показателю преломления n и показателю поглощения κ вычислены отражательная способность R и высокочастотная световая проводимость σ и построены графики зависимостей $R(\hbar\omega)$, $\sigma(\hbar\omega)$. Исходя из некоторых предположений и экспериментальных кривых дисперсионных зависимостей высокочастотной проводимости, дана трактовка оптических свойств сплавов никель—железо в рамках модели жесткой полосы.

Физико-химические особенности и характеристики сплавов никель—железо исследовались неоднократно. Однако в литературе и до настоящего времени практически нет сведений об их оптических свойствах. Исключение составляет, по-видимому, сплав типа инвар, оптические свойства которого исследовались [1] при фазовом переходе первого рода. Для этого сплава при переходе $\alpha \rightarrow \gamma$, согласно [1], не было обнаружено кардинальных изменений оптических свойств. Наиболее существенный результат исследований заключался в увеличении (примерно в 1.7 раза) концентрации $3d$ -подобных электронов.

Большое значение сведений об оптических свойствах веществ при решении многих вопросов теории твердого тела побуждает к изучению оптических характеристик чистых металлов и сплавов.

Эта статья посвящена исследованию оптических свойств сплавов никель—железо с 10, 20, 30 и 40 ат.% последнего, а также чистых никеля и железа при комнатной температуре в интервале энергий 1.1—4.9 эв. Результаты этих исследований, рассматриваемые совместно с данными теоретических расчетов зонной структуры ферромагнитного никеля [2-5], используются для выбора определенной модели сплавов.

Набор сплавов приготавливался в атмосфере азота из никеля чистоты 99.99% и железа чистоты 99.9%. После выплавки все образцы были подвергнуты в течение нескольких часов гомогенизирующему отжигу при температуре 1100° С. Отражающие зеркальные поверхности «массивных» образцов изготовлялись шлифовкой и полировкой при помощи алмазных паст. На последнем этапе приготовления образцы подвергались отжигу в вакууме $5 \cdot 10^{-6}$ мм рт. ст. при температуре 450° С в течение трех часов.

Оптические постоянные n и κ измерялись методом Битти [6] при углах падения 70 и 75°. Погрешность измерения n и κ не превышала 1.5—2.0%.

Результаты измерений n и κ чистого никеля и сплавов никель—железо с содержанием железа 10, 20, 30 и 40 ат.% приведены в таблице. Значения n и κ чистого никеля неплохо, за исключением области 2.1—2.6 эв, совпадают с [7, 8], а чистого железа несколько хуже согласуются с [9]. Наши значения κ железа практически совпадают, а n несколько завышены по сравнению с [9] во всей исследованной области спектра.

Оптические постоянные n и x никеля и сплавов Ni—Fe в области 1.1—4.9 эв.

$\lambda, \text{Å}$	Ni		10% Fe		20% Fe		30% Fe		40% Fe	
	n	x	n	x	n	x	n	x	n	x
2537	1.43	2.52	1.31	2.10	1.17	2.19	1.23	2.09	1.27	2.08
2652	1.61	2.48	1.38	2.17	1.24	2.25	1.30	2.12	1.29	2.13
2699	1.63	2.45	1.42	2.23	1.28	2.25	1.30	2.14	1.34	2.20
2753	1.66	2.35	1.39	2.20	1.29	2.27	1.31	2.16	1.35	2.18
2804	1.72	2.29	1.45	2.21	1.31	2.27	1.35	2.17	1.36	2.19
2894	1.73	2.29	1.41	2.17	1.36	2.27	1.34	2.18	1.40	2.22
2967	1.74	2.30	1.44	2.20	1.37	2.29	1.37	2.20	1.40	2.25
3022	1.70	2.29	1.45	2.20	1.35	2.32	1.37	2.25	1.41	2.27
3126	1.70	2.22	1.44	2.21	1.36	2.34	1.37	2.26	1.41	2.36
3341	1.66	2.31	1.45	2.29	1.37	2.42	1.40	2.36	1.46	2.44
3650	1.59	2.39	1.45	2.46	1.40	2.60	1.41	2.54	1.52	2.62
4047	1.58	2.64	1.44	2.67	1.49	2.86	1.49	2.77	1.58	2.82
4358	1.60	2.69	1.55	2.90	1.53	3.02	1.53	2.94	1.68	3.02
4550	1.67	2.93	1.53	3.03	1.65	3.06	1.64	3.07	1.71	2.99
4700	1.72	3.04	1.55	3.11	1.69	3.16	1.68	3.14	1.75	3.05
4800	1.73	3.09	1.59	3.21	1.74	3.24	1.73	3.21	1.75	3.07
4900	1.75	3.16	1.62	3.24	1.75	3.25	1.68	3.19	1.80	3.11
5000	1.80	3.18	1.63	3.28	1.77	3.30	1.77	3.25	1.79	3.14
5100	1.76	3.20	1.69	3.25	1.83	3.37	1.80	3.33	1.83	3.20
5200	1.79	3.25	1.69	3.36	1.85	3.39	1.87	3.36	1.88	3.23
5300	1.84	3.29	1.76	3.44	1.88	3.42	1.84	3.38	1.90	3.26
5450	1.88	3.41	1.76	3.53	1.90	3.50	1.87	3.44	1.93	3.30
5600	1.88	3.47	1.77	3.55	1.94	3.59	1.92	3.52	1.99	3.36
5750	1.93	3.51	1.83	3.61	1.95	3.63	1.95	3.57	2.03	3.44
5900	1.95	3.59	1.87	3.72	2.03	3.71	2.01	3.63	2.08	3.49
6100	1.97	3.66	1.95	3.83	2.04	3.75	2.03	3.69	2.13	3.54
6300	2.01	3.85	1.96	3.91	2.14	3.87	2.08	3.75	2.14	3.60
6450	2.10	3.94	2.00	4.04	2.17	3.94	2.09	3.89	2.20	3.67
6600	2.15	4.06	2.07	4.05	2.22	4.00	2.14	3.97	2.23	3.72
6750	2.15	4.07	2.10	4.10	2.24	4.00	2.17	4.01	2.27	3.77
6900	2.24	4.07	2.13	4.18	2.28	4.10	2.21	4.06	2.33	3.84
7050	2.24	4.23	2.20	4.23	2.33	4.13	2.26	4.12	2.39	3.88
7200	2.27	4.31	2.27	4.31	2.35	4.21	2.27	4.20	2.41	3.93
7350	2.32	4.35	2.28	4.40	2.46	4.28	2.33	4.30	2.44	4.00
7500	2.32	4.41	2.32	4.40	2.51	4.35	2.40	4.37	2.49	4.05
7650	2.37	4.42	2.32	4.48	2.57	4.40	2.41	4.40	2.54	4.14
7800	2.42	4.48	2.36	4.51	2.60	4.44	2.48	4.46	2.55	4.16
7950	2.41	4.60	2.40	4.56	2.64	4.49	2.54	4.51	2.58	4.20
8100	2.44	4.60	2.43	4.62	2.66	4.56	2.58	4.51	2.63	4.27
8300	2.48	4.65	2.47	4.70	2.73	4.60	2.58	4.61	2.72	4.34
8500	2.51	4.73	2.50	4.73	2.73	4.62	2.58	4.67	2.73	4.36
8800	2.56	4.83	2.56	4.82	2.72	4.70	2.65	4.70	2.78	4.40
9100	2.55	4.88	2.58	4.89	2.76	4.78	2.65	4.75	2.81	4.48
9400	2.62	5.00	2.66	4.96	2.78	4.84	2.70	4.85	2.84	4.50
9700	2.68	5.02	2.67	5.03	2.88	4.91	2.73	4.90	2.90	4.58
10000	2.69	5.13	2.69	5.09	2.96	5.01	2.85	5.00	2.93	4.60
10300	2.68	5.14	2.72	5.12	2.98	5.07	2.85	5.05	2.96	4.67
10600	2.69	5.20	2.73	5.20	3.06	5.17	2.88	5.08	3.03	4.75
11000	2.78	5.30	2.76	5.30	3.06	5.20	2.93	5.17	3.04	4.85

Оптические постоянные n и x являются исходными для таких величин, которые играют важную роль при рассмотрении поглощения света металлами и сплавами. Поглощение света как чистыми металлами, так и сплавами может иметь место при переходах двух типов — внутризонных и междузонных. Даже качественная оценка вклада в поглощение света металлом каждого из упомянутых выше механизмов поглощения представляет несомненный теоретический и практический интерес.

В нашем случае для количественного определения роли свободных носителей (внутризонных переходов) в процессе поглощения света сплавами никель—железо и чистыми компонентами были использованы зависимости отражательной способности R при нормальном падении от энергии фотонов.

Результаты вычислений R для чистых никеля и железа, а также сплавов никель—железо с 20 и 40 ат. % железа представлены графически на рис. 1. Анализ соответствующих кривых показывает, что вклад свободных носителей в поглощение света железом и никелем в различных участках спектра не только различный, но и изменяется по сложному закону. Полученные данные указывают на то, что при энергиях фотонов 1–2 эв внутризонные переходы в поглощение никелем вносят больший вклад, чем в поглощение железом. В случае сплавов наблюдается увеличение вклада внутризонных переходов по сравнению с железом.

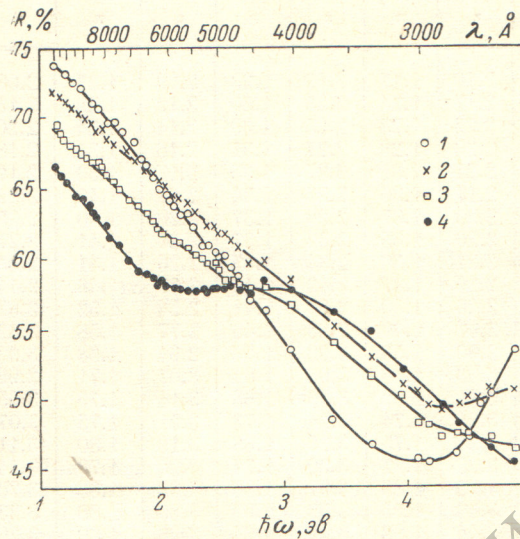


Рис. 1. Отражательная способность $R(\hbar\omega)$ никеля, железа и их сплавов.
1 — Ni, 2 — 80% Ni—20% Fe, 3 — 60% Ni—40% Fe, 4 — Fe.

построены графики соответствующих дисперсионных зависимостей.

Дисперсионные кривые проводимости никеля, сплавов никель—железо с концентрациями последнего 10, 20, 30, 40 ат. % и чистого железа в области 1.1—2.85 эв приведены на рис. 2. Масштаб слева относится к никелю и железу, а справа — к сплаву 60% Ni—40% Fe. Чтобы кривые не налагались, каждая кривая сплава смещена относительно предыдущей вверх на $\Delta\sigma = 2 \cdot 10^{-14}$ сек.⁻¹

На дисперсионной кривой высокочастотной проводимости никеля в области 1.1—2.85 эв (помимо интенсивного максимума при 1.4—1.5 эв) наблюдаются две сравнительно слабые аномалии при 2.1—2.2 и 2.5—2.6 эв. Для дисперсионной зависимости высокочастотной проводимости железа в области 1.1—2.85 эв характерным является широкий максимум при 2.3—2.5 эв.

Дисперсионные зависимости высокочастотной проводимости сплавов в области спектра 1.1—2.85 эв (кривые 2—5 на рис. 3) описываются сравнительно плавными кривыми со слабой аномалией при 2.5—2.6 эв и максимумом около 1.4—1.5 эв.

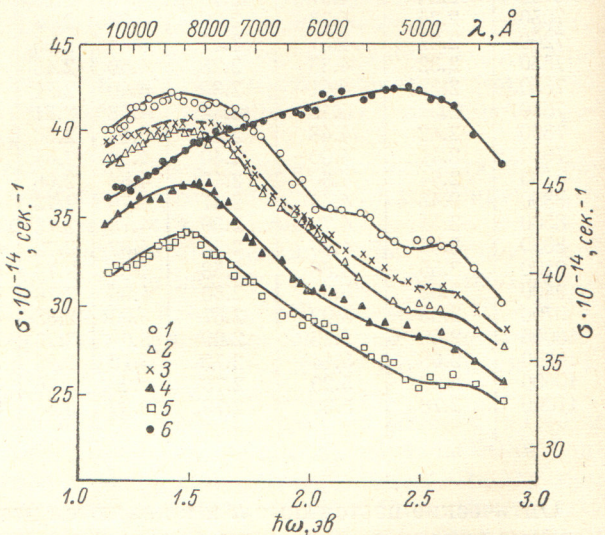


Рис. 2. Дисперсионные зависимости высокочастотной проводимости $\sigma(\hbar\omega)$ никеля, железа и их сплавов в области 1.1—2.85 эв.

1 — Ni, 2 — 90% Ni—10% Fe, 3 — 80% Ni—20% Fe, 4 — 70% Ni—30% Fe, 5 — 60% Ni—40% Fe, 6 — Fe.

Совместное рассмотрение дисперсионных зависимостей высокочастотной проводимости никеля и сплавов никель—железо с концентрациями последнего до 40 ат. % включительно позволяет считать, что форма дисперсионных кривых сплавов напоминает мало видоизмененную кривую никеля. Существенное различие между ними состоит в том, что на всех кривых для сплавов никель—железо не наблюдается слабая аномалия, которая на дисперсионной кривой высокочастотной проводимости никеля расположена при 2.1—2.2 эв.

Дисперсионные кривые высокочастотной световой проводимости в интервале энергий 2.85—4.9 эв для никеля, железа и сплавов никель—железо с 10, 20, 30 и 40 ат. % железа приведены на рис. 3.

В этой области спектра при 4.7 эв расположен интенсивный максимум высокочастотной проводимости никеля. При добавлении к никелю железа наблюдается

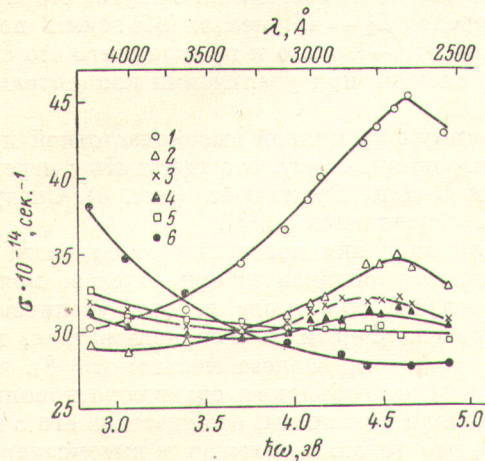


Рис. 3. Дисперсионные зависимости высокочастотной проводимости $\sigma(h\omega)$ никеля, железа и их сплавов в области 2.85—4.9 эв.

1 — Ni, 2 — 90% Ni—10% Fe, 3 — 80% Ni—20% Fe, 4 — 70% Ni—30% Fe, 5 — 60% Ni—40% Fe, 6 — Fe.

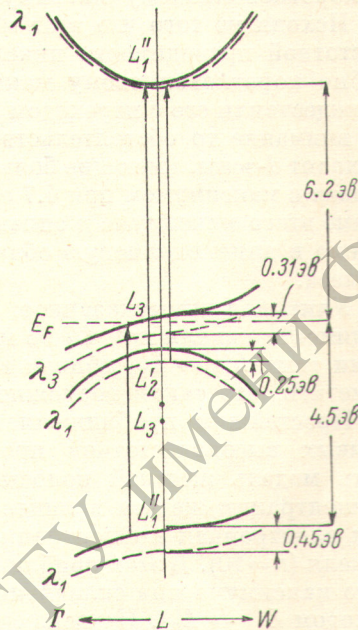


Рис. 4. Энергетические зоны ферромагнитного никеля в окрестности точки L зоны Бриллюэна.

Сплошными линиями показаны подзоны левых (\downarrow), а штриховыми — правых (\uparrow) спинов. Стрелками показаны некоторые из возможных переходов.

не только уменьшение значения σ в максимуме, но и смещение максимума в длинноволновую область спектра, достигающее для сплава 90% Ni—10% Fe величины 0.15 эв. По мере увеличения концентрации железа в сплавах положение и величина этого максимума изменяется не так резко, как при малых добавках железа. Практически он уже не наблюдается на дисперсионной кривой высокочастотной проводимости сплава 60% Ni—40% Fe. Различие формы и положения дисперсионных кривых сплавов никель—железо в области коротковолнового максимума проводимости никеля обусловлены изменениями электронного спектра.

Особенности, обнаруженные на кривой высокочастотной проводимости никеля, в большинстве случаев отождествляются с прямыми межзонными переходами в окрестности сингулярных точек кривой межзонной плотности состояний [8, 10]. Совместное рассмотрение дисперсионных кривых высокочастотной проводимости никеля и его сплавов дает дополнительную информацию при выяснении природы оптического спектра никеля и одновременно выборе определенной модели для конкретного сплава.

В настоящее время природа некоторых собственных частот никеля уже выяснена [4, 5, 8, 10, 11]. Это, в частности, относится к собственной

частоте при 1.3—1.4 эв, впервые обнаруженной Робертсом [7] и впоследствии отождествленной с переходами $W_{1\downarrow} \rightarrow W_{1\downarrow}'$ в окрестности точки W зоны Бриллюэна [4, 10]. Необходимо отметить, что эти переходы, строго говоря, должны быть запрещены в силу правила четности. Коротковолновый максимум при 4.7 эв наблюдался в [8, 10] и был отождествлен с переходами типа $L_2' \rightarrow L_1''$ [10]. Наконец, аномалия при 2.5—2.6 эв наблюдалась магнетооптическим методом при гелиевой температуре и была отождествлена с переходом $X_{5\uparrow} \rightarrow X_{4\uparrow}'$ [11].

По нашему мнению, некоторые из вышеуказанных переходов для никеля требуют дополнительных обоснований. Это прежде всего относится к коротковолновому максимуму при 4.7 эв.

Исходя из того что этот максимум на дисперсионной кривой высокочастотной проводимости никеля ведет себя, по мнению авторов [10], подобно коротковолновому максимуму на аналогичной кривой меди, они отождествили его с переходом $L_2' \rightarrow L_1''$. Однако при этом не было принято во внимание то обстоятельство, что в случае никеля на уровень Ферми выходят d -зоны, имеющие большую плотность состояний. С другой стороны, связав с максимумом при 4.7 эв переход $L_2' \rightarrow L_1''$, нельзя объяснить поведение этого максимума в сплавах никель—железо и прежде всего его смещение в длинноволновую область спектра при увеличении концентрации железа.

Учитывая вышесказанное, максимум на кривой высокочастотной проводимости никеля при 4.7 эв можно, по-видимому, отождествить с переходами типа $L_{1\downarrow}' \rightarrow L_{3\downarrow}$ вблизи точки L зоны Бриллюэна (рис. 4). Следует отметить, что такая возможность обсуждалась в [10].

Простейшим приближением для описания поведения особенности на кривых высокочастотной проводимости сплавов никель—железо может быть модель жесткой полосы. Согласно этой модели, при увеличении концентрации железа в никеле уровень Ферми должен понижаться, так как электронная концентрация $n = n_{3d} + n_{4s}$ железа меньше ($n = 8$), чем никеля ($n = 10$). В этом приближении можно объяснить сдвиг коротковолнового максимума при сплавлении никеля с железом, отождествив его с переходом $L_{1\downarrow}' \rightarrow L_{3\downarrow}$. Не исключено, что небольшой вклад в высокоэнергетический максимум могут вносить и переходы типа $L_2' \rightarrow L_1''$ [10] (рис. 4).

Слабую аномалию при 2.1—2.2 эв мы отождествили с переходами типа $X_{2\downarrow} \rightarrow X_{4\downarrow}'$ вблизи точки X зоны Бриллюэна. Только такого типа переходы могут объяснить исчезновение этой аномалии в сплавах никель—железо при концентрациях железа больше 10%. Действительно, состояния вблизи $X_{2\downarrow}$ расположены немного ниже уровня Ферми [2, 3], а в [4] даже касаются уровня Ферми. Поэтому при незначительных смещениях уровня Ферми интенсивность переходов типа $X_{2\downarrow} \rightarrow X_{4\downarrow}'$ должна резко падать. Последнее наблюдается уже при добавлении 10% Fe.

Модель жесткой полосы в случае сплавов никель—железо позволяет объяснить также поведение низкоэнергетического максимума при 1.3—1.4 эв. Поскольку максимум при 1.3—1.4 эв отождествлен с переходом $W_{1\downarrow} \rightarrow W_{1\downarrow}'$ [4, 10] и состояния вблизи $W_{1\downarrow}$ находятся намного ниже уровня Ферми [2-4], то положение этого максимума, согласно принятой модели, не должно изменяться при сплавлении никеля с железом.

Наконец, аномалию при 2.5—2.6 эв Кринчик и Гуцин отождествили, как мы отмечали, с переходом $X_{5\uparrow} \rightarrow X_{4\uparrow}'$ [11]. Это не противоречит поведению аномалии при 2.5—2.6 эв в сплавах, согласно модели жесткой полосы. Однако необходимо отметить, что вклад в эту аномалию могут вносить и переходы типа $X_{2\uparrow} \rightarrow X_{4\uparrow}'$, которым соответствует такой же энергетический зазор, как и переходам типа $X_{5\uparrow} \rightarrow X_{4\uparrow}'$ [4].

Литература

- [1] И. И. Сасовская, М. М. Носков, А. З. Меньшиков. ФММ, 27, 272, 1969.
- [2] L. Hodges, H. Ehrenreich, D. N. Lang. Phys. Rev., 152, 505, 1966.
- [3] J. W. D. Connolly. Phys. Rev., 159, 415, 1967.

- [4] J. Hanus, J. Feinleib, W. J. Scouler. J. Appl. Phys., 39, 1272, 1968.
[5] F. J. Zonberg. Phys. Rev., 81, 244, 1970.
[6] J. R. Beattie. Phil. Mag., 46, 235, 1955.
[7] S. Roberts. Phys. Rev., 114, 104, 1959.
[8] H. Ehrenreich, H. R. Philipp, D. J. Olechna. Phys. Rev., 131, 2469, 1963.
[9] Г. А. Болотин, М. М. Кириллова, В. М. Маевский. ФММ, 27, 224, 1969.
[10] M. Shiga, G. P. Pells. Solid State Phys., 2, 1847, 1969.
[11] Г. С. Криничик, В. С. Гущин. ЖЭТФ, 56, 1833, 1969.

Поступило в Редакцию 6 марта 1972 г.

РЕПОЗИТОРИЙ ГГУ ИМЕНИ Ф. СКОРИНЬ