

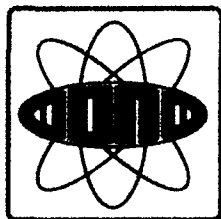


Факультет общей и прикладной физики

**ТРУДЫ
51-й НАУЧНОЙ КОНФЕРЕНЦИИ МФТИ**

**Современные проблемы
фундаментальных и прикладных наук**

**Часть II
Общая и прикладная физика**



Москва-Долгопрудный, 2008

УДК 53
ББК 22.3
Т78

Т78 Труды 51-й научной конференции МФТИ «Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук»: Часть II. Общая и прикладная физика. — М.: МФТИ, 2008. — 194 с.
ISBN 978-5-7417-0259-8

В сборник включены результаты оригинальных исследований студентов, аспирантов, преподавателей и научных сотрудников МФТИ и дружественных учебных и научных организаций. Они представляют интерес для специалистов, работающих в области общей и теоретической физики, радиофизики, астрофизики, квантовой радиофизики, физики квантовых и нелинейных явлений, физики низких температур и физики твёрдого тела. В сборник включены результаты исследований, выполненных в рамках реализации инновационной образовательной программы МФТИ «Научоёмкие технологии и экономика инноваций» и Аналитической ведомственной целевой программы «Развитие научного потенциала высшей школы» Федерального агентства по образованию.

**УДК 53
ББК 22.3**

ISBN 978-5-7417-0259-8 © Московский физико-технический институт
(государственный университет), 2008

Кузовников М.А.

Московский физико-технический институт
(государственный университет)
Институт физики твёрдого тела РАН

Колебательный спектр альфа-гидрида марганца в режиме туннелирования водорода

Введение

Растворимость водорода в низкотемпературной α модификации марганца (пространственная группа $I\bar{4}3m$, $a = 8,9403 \text{ \AA}$) при высоких давлениях увеличивается в десятки раз и достигает атомного соотношения $\text{H/Mn} \approx 0,07$ [1]. Водород образует необычную подрешётку в кубической структуре α -Mn и занимает позиции 12e внутри деформированных октаэдров из атомов марганца, расположенных парами с малым расстоянием $d = 0,7 \text{ \AA}$ в паре, причём каждую такую пару может занимать не более одного атома водорода [2] (рис. 1). В спектре неупругого рассеяния нейтронов (НРН) α -MnH_{0,07} при температурах ниже 100 К наряду с интенсивным туннельным пиком при энергии 6,3 мэВ [2] имеется ещё 4 пика сравнимой интенсивности при 73, 105, 130 и 190 мэВ [3]. Во всех ранее изучавшихся гидридах с эффектом туннелирования водорода расщепление основного колебательного состояния водорода не превышало 0,2 мэВ, а эффект наблюдался только при температурах ниже 10 К.

Результаты и обсуждение

В данной работе все пики в НРН спектре α -MnH_{0,07} были идентифицированы путём моделирования поведения атома водорода с помощью численного решения уравнения Шрёдингера в двукратном потенциале, формируемом кластером из ближайших восьми жёстко закреплённых атомов марганца (рис. 1). Координаты этих атомов, а также координаты положений равновесия атома водорода приведены в [2].

Потенциал был записан в приближении Леннарда-Джонса:

$$U(r) = \sum_i \left(-\frac{a}{|r - r_i|^6} + \frac{b}{|r - r_i|^{12}} \right),$$

где r_i — радиус-векторы атомов марганца, приведённые в [2], a и b — свободные параметры. Расчёты показали, что в широком диапазоне значений a и b в таком потенциале действительно имеются две ямы с минимумами в позициях 12e на оси Z . Это подтверждает правильность определения структурного мотива водородной подрешётки из данных по дифракции нейтронов [2]. Несколько эквивалентных сечений двухмногого потенциала показано на рис. 2.

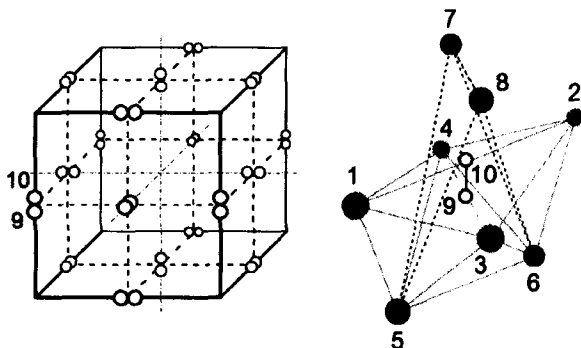


Рис. 1. Гидрид $\alpha\text{-MnH}_{0,073}$. Слева: расположение позиций 12e, частично занятых атомами H, в элементарной кубической ячейке $\alpha\text{-Mn}$ (атомы марганца не показаны). Через каждую пару позиций 12e проходит ось симметрии $\bar{4}$ с центром инверсии посередине пары. Справа: одна из пар позиций 12e (кружки 9 и 10) и её ближайшее окружение из атомов Mn в позициях $24g_1$ (серые кружки 1–4) и в позициях $24g_2$ (черные кружки 5–8). Сплошными линиями соединены позиции Mn(1)–Mn(6) атомов марганца, образующих искажённый октаэдр вокруг атома водорода в позиции H(9) [2]

В качестве первого шага для вычисления колебательного спектра атома водорода в двухмногом потенциале трёхмерная спектральная задача для уравнения Шредингера была аппроксимирована двумя одномерными. Потенциалом для колебаний вдоль оси туннелирования Z служила зависимость $U(0,0,z)$ вдоль этой оси. Двукратно вырожденный (из-за наличия оси $\bar{4}$ и двух взаимно перпендикулярных плоскостей симметрии, проходящих через эту ось) спектр колебаний в плоскости, перпендикулярной оси Z , рассчитывался в потенциале

$U(x, 0, \ell)$, где ℓ — координата центра тяжести суммы нормированных квадратов волновых функций чётного и нечётного основных состояний при $z \geq 0$. Данный метод дал бы точный спектр, если бы потенциал факторизовался по направлениям, то есть был представим в виде $U(x, y, z) = U_1(x) + U_1(y) + U_2(z)$.

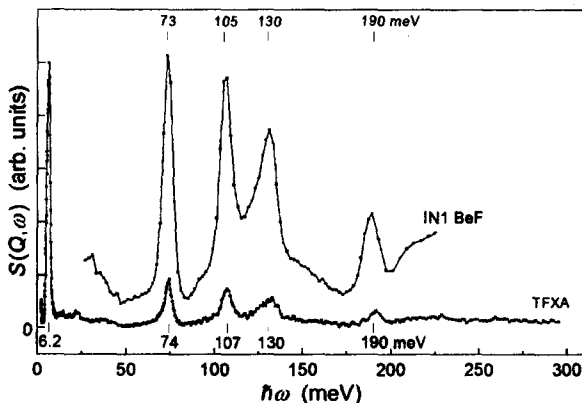


Рис. 2. НРН-спектры α - $\text{MnH}_{0.07}$, измеренные при 23 К на спектрометре TFXA, RAL и при 5 К на спектрометре IN1-BcF, ILL [3]

При заданном расстоянии 2ℓ между минимумами двуянного потенциала для параметров a и b в модели Леннарда-Джонса остаётся одна степень свободы, представляющая собой масштаб энергии. При расчётах мы фиксировали отношение a/b и подбирали масштаб энергии таким образом, чтобы расщепление основного состояния на нижнее (чётное) и верхнее (нечётное) было равно экспериментальной величине 6,3 мэВ. Варьируя отношение a/b , мы получили спектр стационарных колебательных состояний как функцию расстояния 2ℓ .

Расчёт показал, что энергия первого поперечного состояния (состояния колебаний H , ортогональных к оси Z) становится выше энергии обоих первых продольных состояний при значениях 2ℓ , меньших 0,86 Å. Поскольку экспериментальное значение 2ℓ составляет около 0,7 Å, это даёт основание полагать, что три пика при 73, 105 и 130 мэВ в НРН спектре α - $\text{MnH}_{0.07}$ (рис. 1) отвечают переходам водорода из нижнего основного состояния в три первые возбуждённые состояния, соответственно — в нижнее продольное, верхнее продольное и дважды вырожденное поперечное. Пик при 190 мэВ создаётся переходами во второе нижнее (чётное) продольное состояние.

Наш последующий трёхмерный расчёт (рис. 3) подтвердил предлагаемую интерпретацию спектра.

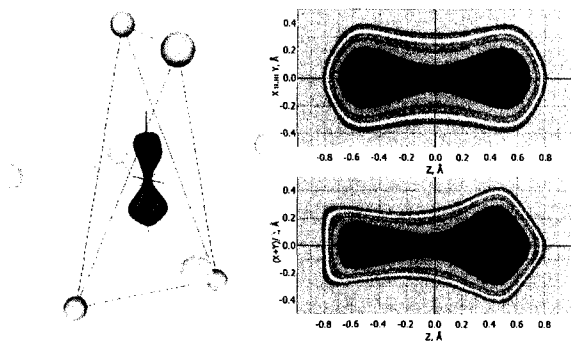


Рис. 3. Слева: эквипотенциальная поверхность двуатомного потенциала Леннарда-Джонса, окруженная кластером из 8 атомов марганца. Справа: сечения двуатомного потенциала с параметрами a и b , дающими наилучшее согласие расчёта с положением пиков в НРН-спектре $\alpha\text{-MnH}_{0.07}$ из работ [2, 3]

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Antonov V.E., et al. T-P phase diagram of the Mn-H system at pressures to 4.4 GPa and temperatures to 1000 °C // Scripta Mater. — 1996. — V. 34, N. 8. — P. 1331–1336.
2. Fedotov V.K., et al. Neutron scattering studies of the structure and lattice dynamics of a solid solution of hydrogen in α manganese // J. Phys.: Condens. Matter. — 1998. — V. 10, N. 24. — P. 5255–5266.
3. Antonov V.E., et al. Giant tunnelling effect of hydrogen and deuterium in α -manganese // J. Alloys Comp. — 2002. — V. 330–332. — P. 462–466.