

3. *The time dependent specific heat of dielectric glasses* / M. T. Lopenon, R. C. Dynes, V. Narayanamurti, J. P. Garino. — *Physica B*, 1982, 109-110, N 3, p. 1873—1879.
4. *Maeda K., Takeuchi S.* Inhomogeneities in a model amorphous metal-spatial correlation of atomic level parameters. — *J. Phys. F*, 1982, 12, N 12, p. 2767—2781.
5. *Rivier N., Duffy D. M.* Line defects and tunneling modes in glasses. — *J. de Phys.*, 1982, 43, N 2, p. 293—306.
6. *Donovan P. E., Stobbs W. M.* On dilatation and plastic flow in metallic glasses. — *Phil. Mag. A*, 1983, 47, N 4, p. 537—546.
7. *Chen H. S.* Glassy metals. — *Rep. Progr. Phys.*, 1980, 43, N 2, p. 353—432.
8. *Davis L. A., Hasegawa R.* Metallic glasses: formation, structure and properties. — In: *Metallurgical Treatises* / Ed. by J. K. Tien, J. F. Elliott. New York: The metallurgical Society of AIME, 1981, p. 301—320.
9. *Davis L. A.* Mechanics of metallic glasses. — In: *Rapidly Quenched Metals*. — In: *Proc. 2nd Intern. Conf. Cambridge: MIT press*, 1976, p. 369—391.
10. *Глезер А. М., Молотилов Б. В., Утевская О. Л.* К методике электронномикроскопического изучения структуры аморфных металлических материалов. — *Завод. лаборатория*, 1981, 47, № 10, с. 22—24.
11. *Egami T., Maeda K., Vitek V.* Structural defects in amorphous solids. A computer simulation study. — *Phil. Mag. A*, 1980, 41, N 6, p. 883—901.
12. *Spraepel F.* Defects in amorphous metals. — In: *Physique des défauts. Les Houches, Ecole d'été physique théor. Sess. 35, (28 Juillet—29 Août, 1980)*. Amsterdam, 1981, p. 133—174.
13. *Duhaj P., Hanc F.* Electron microscopy and electron diffraction study of crystallization of metastable phase in amorphous Fe-B alloys. — *Phys. status solidi (a)*, 1983, 76, N 2, p. 467—477.
14. *Гольдшмидт Х. Дж.* Сплавы внедрения. — М.: Мир, 1971, вып.1. — 424 с.
15. *Connell G. A. N., Temkin R. J.* Modelling the structure of amorphous tetrahedrally coordinated semiconductors. I. — *Phys. Rev. B*, 1974, 9, N 12, p. 5323—5326.

Физико-технический институт
низких температур АН УССР,
г. Харьков

Получено 12.12.83

УДК 539.292

В. В. ХОТКЕВИЧ, В. Б. ПЛУЖНИКОВ, И. В. СВЕЧКАРЕВ,
Г. Е. ГРЕЧНЕВ, Дж. Р. АНДЕРСОН, У. ПИКЕТТ

ЭЛЕКТРОННЫЙ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР И ЭФФЕКТ ДЕ ГААЗА — ВАН АЛЬФЕНА В УПОРЯДОЧЕННОМ СОЕДИНЕНИИ Cd_3Mg

В упорядоченном интерметаллическом соединении Cd_3Mg при температурах 1,5—4,2 К наблюдаются осцилляции де Гааза — ван Альфена в поле до 70 кГс. Изучена угловая зависимость частот осцилляций, лежащих в интервале от 2,1 до 6,0 МГц. Для некоторых характерных направлений ориентации магнитного поля относительно осей кристалла измерены эффективные массы носителей и температура Дингла. На основе модельных псевдопотенциалов Анималу — Хейне выполнен расчет зонной структуры Cd_3Mg . Построена модель поверхности Ферми Cd_3Mg и предложена интерпретация осцилляций, наблюдавшихся в эксперименте.

Задача установления причин стабилизации структурно-упорядоченного состояния в сплаве и выявления роли электронной подсистемы в этом процессе делает перспективным детальное изучение зонной структуры упорядоченных интерметаллических соединений. Особый класс составляют те из них, в которых процесс упорядочения протекает в твердой фазе. В этом случае имеется принципиальная возможность исследования влияния степени порядка на электронные характеристики сплава. Лишь недавно появились первые работы, посвященные экспериментальному изучению электронного энергетического спектра подобных соединений [1, 2].

Интерес к системе изовалентных сплавов Cd—Mg обусловливается существованием в ней ряда интерметаллических фаз, образующихся в твер-

дой фазе при упорядочении атомов. Нами исследовалось соединение Cd_3Mg , имеющее ГПУ кристаллическую структуру типа Ni_3Sn (DO_{19}) [3]. Элементарная ячейка кристалла содержит восемь атомов. Упорядочение приводит к возрастанию в четыре раза объема элементарной ячейки Cd_3Mg по сравнению с неупорядоченной фазой за счет двукратного увеличения периода решетки в базисной плоскости.

На монокристаллах Cd_3Mg при температурах 1,5—4,2 К в полях до 70 кГс наблюдались квантовые осцилляции магнитной восприимчивости — эффект де Гааза — ван Альфена (дГ — вА). Сам факт наблюдения осцилляционного эффекта свидетельствует о достаточном совершенстве монокристалла при низкой температуре. Применялась методика низкочастотной модуляции поля и выделения гармоник модулирующего сигнала.

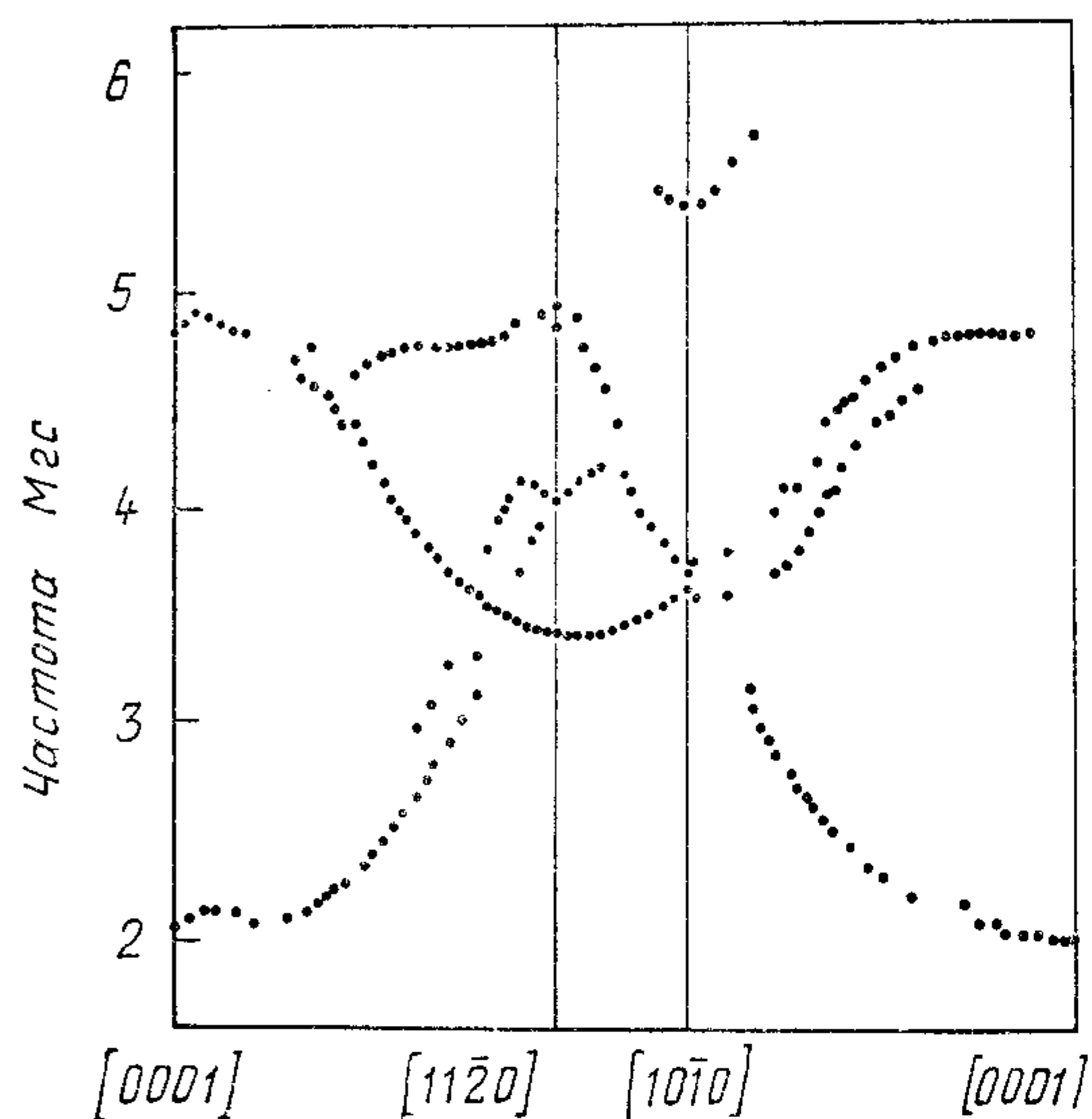


Рис. 1. Угловая зависимость частоты дГ — вА в Cd_3Mg .

Результаты исследования дГ — вА в Cd_3Mg представлены на рис. 1. Здесь дана угловая зависимость частоты осцилляций дГ — вА при вращении вектора магнитного поля в симметричных плоскостях обратной решетки. Частоты дГ — вА лежат в интервале от 2,1 до 6,0 МГц. Следует отметить, что частотный спектр осцилляций довольно сложен. Одновременно в эксперименте наблюдается до четырех сечений поверхности Ферми (ПФ), дающих вклад в результирующий сигнал. Для анализа осцилляций нами применялась машинная обработка данных, включавшая преобразование Фурье. Ошибка в определении частоты дГ — вА при этом не превышала одного — двух процентов.

Температуры Дингла, измеренные для осцилляций (2,1 и 4,8 МГц при $\mathbf{H} \parallel \langle 0001 \rangle$ и 3,5 МГц при $\mathbf{H} \parallel \langle 11\bar{2}0 \rangle$) с наибольшими наблюдавшимися амплитудами, оказываются весьма велики (8, 10 и 14 К соответственно). Последнее обстоятельство позволило нам провести измерения эффективных масс носителей заряда только для указанных сечений ПФ. Отношения эффективных масс к свободно-электронной равны 0,13; 0,16 и 0,13 соответственно.

Наблюдавшиеся осцилляции дГ — вА не обнаруживают нерегулярности в полевой зависимости амплитуд вблизи $\langle 0001 \rangle$, $\langle 10\bar{1}0 \rangle$ и $\langle 11\bar{2}0 \rangle$. Можно полагать, что для данных ориентаций магнитного поля эффекты магнитного пробоя не имеют места по крайней мере до 70 кГс.

С целью интерпретации данных дГ — вА нами проведен расчет зонной структуры Cd_3Mg с использованием модельных экранированных псевдопотенциалов Анималу и Хейне [4] для кадмия и магния. Постоянные решетки Cd_3Mg были взяты из [3]. Непосредственно диагонализируемая матрица псевдогамильтониана имела размерность 100×100 , дополнительные матричные элементы, соответствующие размерности матрицы 250×250 , были учтены во втором порядке теории возмущений. Граничные значения энергии, отвечающие обрезанию разложения псевдоволновой функции по плоским волнам, в данном случае равные 3,0 и 5,5 ридб соответственно, были найдены из условия сходимости собственных значений энергии с точностью 1 мридб. Энергетический спектр Cd_3Mg для ряда ли-

ний в зоне Бриллюэна приведен на рис. 2. Методом, аналогичным предложенному в [5], был проведен расчет зависимости числа электронных состояний от энергии $n(E)$ в Cd_3Mg . Условие нормировки $n(E_F) = 2$ на атом дает значение $E_F = 0,5483$ ридб, что близко к свободно-электронному $E_{F0} = 0,5557$ ридб.

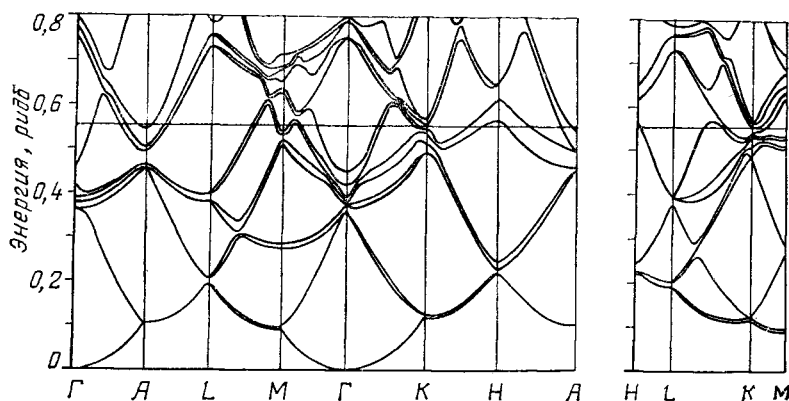


Рис. 2. Зонная структура Cd_3Mg в направлениях высокой симметрии зоны Бриллюэна.

Энергетический спектр электронов в Cd_3Mg довольно сложен и в значительной степени отличается от спектров двухвалентных ГПУ металлов благодаря наличию ряда сверхструктурных брэгговских плоскостей, появляющихся вследствие упорядочения. Поэтому в Cd_3Mg мы не находим характерных для двухвалентных гексагональных металлов участков ПФ — типа «монстра» во второй зоне, «линзы» в третьей зоне и др. Отдельные листы ПФ Cd_3Mg , согласно проведенному нами расчету, располагаются в зонах

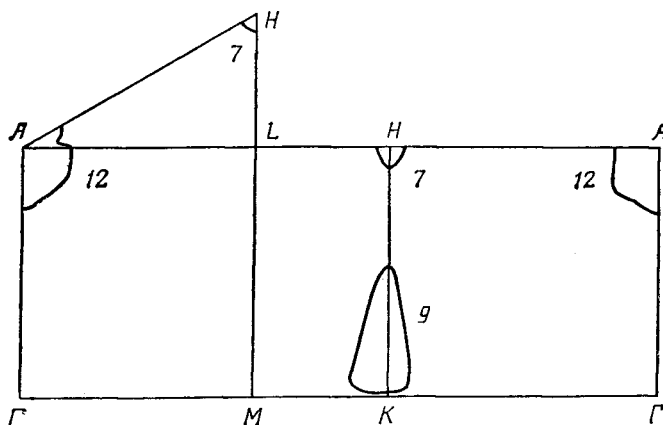


Рис. 3. Сечения симметричными плоскостями некоторых участков ПФ Cd_3Mg для зон 7, 9 и 12.

с 7-й по 14-ю включительно. Имеется весьма широкий набор как закрытых, так и открытых участков ПФ. Так, в 7-й зоне в окрестности точки H зоны Бриллюэна расположены небольшие участки ПФ дырочного типа, в 8-й зоне — электронная ПФ, центрированная в Γ , и электронная многосвязная «корона», имеющая «рукава», простирающиеся вдоль линии KM . В 9-й зоне имеется электронный участок ПФ с центром в точке Γ , несколько меньший по объему, чем в 8-й зоне, и асимметричные «сигары» на ребрах KH . Кроме того, в 9-й зоне в точке A центрируется звездообразная электронная ПФ, «лучи» которой направлены вдоль AH . Для зон 10—14 характерно наличие электронных ПФ вблизи A , постепенно уменьшающихся в объеме по мере роста номера зоны.

Из-за высокой температуры Дингла мы не наблюдали осцилляции от довольно больших сечений ПФ (например, электронных, центрированных в Γ). Сравнительно низкочастотные осцилляции, зарегистрированные нами (рис. 1), по типу угловой зависимости [6] могут связываться с «сигарами» на вертикальных ребрах KH зоны Бриллюэна и с электронными участками ПФ в 12-й зоне (рис. 3).

Настоящий расчет, основанный на модельных псевдопотенциалах [4], дает, скорее, качественную картину электронного спектра Cd_3Mg . Для количественного описания угловой зависимости $d\Gamma$ — ω необходимо построение более надежных моделей энергетического спектра этого соединения. Кроме того, представляет интерес поиск низкочастотных осцилляций $d\Gamma$ — ω с частотой менее 2 $M\text{эс}$. Вследствие высокой чувствительности малых сечений ПФ к виду эффективного кристаллического потенциала возможно его дальнейшее уточнение и детализация ПФ Cd_3Mg .

V. V. KHOTKEVICH, V. B. PLUZHNIKOV, I. V. SVECHKAREV,
G. E. GRECHNEV, J. R. ANDERSON, and W. E. PICKETT

ELECTRON ENERGY SPECTRUM AND DE HAAS — VAN ALPHEN EFFECT IN ORDERED COMPOUND Cd_3Mg

(Short note)

De Haas — van Alphen oscillations are observed in the ordered intermetallic compound Cd_3Mg at 1.5 to 4.2 K in the field up to 70 kG . The angular dependence of frequency oscillations in the range of 2.1 to 6.0 MG is studied. Effective masses of carriers and the Dingle temperature are measured for some characteristic orientations of the magnetic field with respect to the crystal axes. The band structure of Cd_3Mg is calculated on the basis of the model Animalu — Heine pseudopotentials. The model Fermi surface of Cd_3Mg is constructed and the interpretation of the oscillations observed experimentally is proposed.

LIST OF SYMBOLS

H , magnetic field vector; $n(E)$, number of states per atom; E , energy; E_F , Fermi energy; E_{F0} , free electron Fermi energy.

FIGURE CAPTIONS

Fig. 1. Angular dependence of the de Haas — van Alphen frequency in Cd_3Mg .
Fig. 2. Band structure of Cd_3Mg in high symmetry directions of the Brillouin zone.
Fig. 3. Sections of some areas of the Fermi surface by symmetric planes in Cd_3Mg for bands 7, 9 and 12.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Эффект де Гааза — ван Альфена в упорядоченном соединении Cd_3Mg / Дж. Р. Андерсон, В. Б. Плужников, И. В. Свечкарев, В. В. Хоткевич. — В кн.: 21-е Всесоюз. совещ. по физике низких температур: Тез. докл. Харьков, 1980, ч. 3, с. 100—101.
2. Deimel P. P., Higgins R. J. De Haas — van Alphen measurements of the Fermi surface in ordered Cu_3Au . — Phys. Rev. B, 1982, 25, N 12, p. 7117—7125.
3. Pearson W. B. A handbook of lattice spacings and structures of metals and alloys. — New York: Pergamon press, 1967. — 1290 p.
4. Animalu A. O. E., Heine V. The screened model potential for 25 elements. — Phil. Mag., 1965, 12, N 120, p. 1249—1270.
5. Chen A.-B. Simple Brillouin-zone scheme for spectral properties of solids. — Phys. Rev. B, 1977, 16, N 8, p. 3291—3304.
6. Watts B. R. The Fermi surface of beryllium. — Proc. Roy. Soc. A, 1964, 282, N 1391, p. 521—546.