

ОСОБЛИВОСТІ ДИНАМІКИ ГРАТКИ У НАДПРОВІДНИКУ Nb_3Sn ПРИ $T=4,2K$

Показано, що аномально низьке значення дебаївської характеристичної температури у надпровіднику Nb_3Sn при $T=4,2K$ пов'язане з впливом електрон-фононних та сильних ангармонійних взаємодій на функцію спектрального розподілу коливань ґратки $g(\omega)$.

It is shown, that anomalous small values Debye characteristic temperature at 4,2 K in super-conductor Nb_3Sn is concerned with the influence of electron-phonon and strong anharmonic interaction on the spectral distribution function of lattice vibration $g(\omega)$.

Дебаївська характеристична температура Θ_D та її ефективні значення є важливим параметром при вивченні багатьох фізичних властивостей твердих тіл і зокрема динаміки їх кристалічних ґраток. Так, для розрахунків динамічних характеристик інколи досить апроксимувати функцію розподілу частот коливань ґратки $g(\omega)$ дебаївською параболою, тобто для цього повинен бути відомим лише один параметр теорії – дебаївська характеристична температура Θ_D .

Важлива інформація про динаміку кристалічної ґратки можливо отримати з даних температурної залежності розсіяння рентгенівських променів і теплових нейтронів на коливаннях атомів, або при визначенні ймовірності ефекту Мессбауера. Отримана із цих даних величина M – фактора Дебая-Уоллера і його залежності $M(T)$, яка відображає зміну середньоквадратичних зміщень $\langle u^2 \rangle$, надає можливість визначити ефективні величини Θ_D , які є зручним параметром для оцінки жорсткості зв'язку у кубічних і аксіальних кристалах [1].

З огляду на це, викликає особливий інтерес аномально низьке значення величини $\Theta_D=56$ К при $T=4,2$ К для сполуки Nb_3Sn [2], яка є класичним надпровідником із структурою $A-15$ (β – вольфрам) і достатньо високою температурою переходу у надпровідний стан $T_C=18$ К. Завдяки цьому, а також практичному використанні при створенні надпровідних магнітів високих полів, дана сполука стала об'єктом широкого спектру теоретичних та експериментальних досліджень, результати яких приведені в оглядах [3,4].

В даній роботі запропонована інтерпретація

аномалії температурної залежності інтенсивності рентгенівських інтерференцій у Nb_3Sn та обґрунтування вище згаданого аномально низького значення величини Θ_D для Nb_3Sn при $T=4,2$ К.

Авторами праці [2] при вивченні температурної залежності ізомерного зсуву у сполуці Nb_3Sn було виявлено аномально низьку ймовірність ефекту Мессбауера при $T=4,2$ К, у порівнянні з такою ж при $T=298$ К, причому середньоквадратичні зміщення $\langle u^2 \rangle$ атомів є дуже великими як і M – фактор, що робить неможливим застосування гармонійного наближення при вивченні динаміки ґратки Nb_3Sn . Разом з тим, як відмічено у [2], при кімнатних температурах функція розподілу частот коливань атомів добре описується дебаївською параболою для акустичних мод, а значення $\Theta_D=290\pm 50$ К.

З метою пояснення цього факту, дещо пізніше, було виконано роботу [5], у якій проводилося експериментальне дослідження залежності $M(T)$ рентгенівським методом. Однак пояснити аномально низьке значення величини Θ_D при $T=4,2$ К не вдалося. На кривій температурної залежності інтенсивності рентгенівських відбивань (14 1 0) (рис.1) в інтервалі $45\div 300$ К спостерігався чітко виражений максимум при температурі $T_i=60$ К.

Проте автор праці [5] не надав цьому значення, відмітивши "дещо несподіваний хід інтенсивності нижче 100 К". Така поведінка температурної залежності інтенсивності $I(T)$ правильних брегівських відбивань суперечить теорії Дебая-Уолера [6].

З нашої точки зору така аномалія для відбивання (14 1 0) у Nb_3Sn пов'язана з впливом електрон-фононних і сильних ангармонійних взаємо-

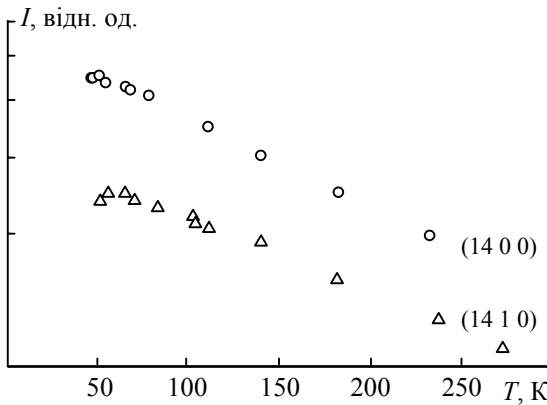


Рис. 1. Температурна залежність інтенсивності рентгенівських інтерференцій у Nb₃Sn [5].

дій на форму функції спектрального розподілу частот коливань $g(\omega)$ саме у тому частотному інтервалі (порядку $(0,1-0,5)\omega_{\max}$) до якого особливо чутливий M -фактор і, відповідно, визначена за ним, величина рентгенівської характеристичної температури. Це означає, що основний внесок у M -фактор і Θ_p дають головним чином низькочастотні акустичні фонони, для яких, згідно з даними про розсіяння повільних нейтронів [4], спостерігається їх розм'якшення до $0,5 \bar{q}_{\max}$ у зоні Брілюена при зниженні температури від кімнатної до 46 К. У цьому випадку для них слід очікувати аномальної поведінки. Зокрема, ангармонійні взаємодії у ґратці Nb₃Sn відповідають за розм'якшення поперечних низькочастотних фононів з хвильовим вектором $\bar{q} \parallel [110]$ і поляризацією $\bar{s} \parallel [1\bar{1}0]$ за аналогією до відомої концепції розм'якшення деяких оптичних мод ("мод Кокрена" за термінологією [7]) у сегнетоелектриках типу порядок-непорядок.

Для динаміки кристалічних ґраток головним є гармонійний доданок у розкладі потенціалу за степенями зміщень, а відповідні ангармонійні доданки – малими збуреннями. Проте у деякій області хвильових векторів \bar{q} для конкретних структур (A-15, C-15, та ін.) величини квадратів частот $\tilde{\omega}^2(\bar{q}, j)$, обчислених у гармонійному наближенні, можуть виявитися малими і тоді при цих \bar{q} малі ангармонійні доданки будуть істотними для динаміки їх кристалічних ґраток [7].

Враховуючи вплив ангармонійності на зміну інтенсивностей рентгенівських інтерференцій, а також відповідальність її за анізотропію M -фактора, навіть у випадку кубічних кристалів можна сподіватися, що розм'якшення акустичних фононів у Nb₃Sn з $\bar{q} \parallel [110]$ буде позначатися не тільки

на інтенсивностях відбивань типу $(hh0)$, але й на відбиваннях $(hk0)$, що спостерігалось у [5] експериментально. Іншими словами, зменшення інтенсивностей відбивань $(14 1 0)$ при пониженні температури від 60 К у Nb₃Sn зумовлене аномальним зменшенням величини Θ_p внаслідок високої чутливості її до функції $g(\omega)$, саме на тій низькочастотній ділянці де розм'якшення відповідних акустичних мод досить істотне.

Оскільки на сьогодні не існує теорії температурної залежності M -фактора Дебая-Уолера, стосовно структур типу A_3B проведемо оцінку деяких ангармонійних ефектів, використавши експериментальні дані роботи [5].

Температурна залежність інтенсивностей брегівських відбивань згідно [6] визначається так:

$$\ln \frac{I_1}{I_0} = -2M,$$

$$\text{де } M = \frac{6\hbar^2 T}{\langle m \rangle k\theta_p^2} \left[\Phi(x) + \frac{x}{4} \right] \frac{\sin^2 \theta}{\lambda^2}, \quad x = \frac{\theta}{T}, \quad (1)$$

$\langle M^{-1} \rangle = \frac{4}{3m_{\text{Nb}} + m_{\text{Sn}}}$ – приведена маса, $\Phi(x)$ – функція Дебая, θ – кут дифракції, λ – довжина хвилі випромінювання.

Приймаючи до уваги, що $\theta_p = \theta_p(T)$ не тільки внаслідок теплового розширення, але, головним чином, за рахунок фонон-фононних та електрон-фононних взаємодій, запишемо умову екстремуму для (1), нехтуючи зміною $\sin^2(\theta/\lambda)$ з температурою. Отримуємо:

$$\frac{d}{dt} \left(\ln \frac{I_T}{I_0} \frac{\lambda^2}{\sin^2 \theta} \right) = \frac{6\hbar^2}{\langle m \rangle k\theta_p^2(T_i)} \left(1 - 2 \frac{d \ln \theta}{dt} \cdot T - \frac{\theta^2}{36T^2} \right)_{T=T_i} = 0, \quad (2)$$

$$\text{де враховано, що } \left[\Phi(x) + \frac{x}{4} \right] = 1 + \frac{x^2}{36} = 1 + \frac{\theta^2}{36T^2}$$

при $T \geq \theta/(2\pi)$. Після підстановки $d \ln \theta_p/dT = -2\gamma_i \beta_i$ [8], де γ_i – модифікований параметр Грюнайнайна, β_i – коефіцієнт об'ємного теплового розширення, згідно (2) отримуємо співвідношення для визначення γ_i :

$$\gamma_i = \frac{\theta_p(T_i) - 36T_i^2}{144\beta_i \cdot T_i^3}. \quad (3)$$

Підставляючи у (3) значення $\theta_{\text{пр}} = 248$ К [4], $\beta_i = 12 \cdot 10^{-6} \text{K}^{-1}$ [9], $T_i = 60$ К і згідно рису.1, отрима-

емо $\gamma_i = -182$ як аномально високе від'ємне значення, що відрізняється майже на два порядки від звичайного значення $\gamma_i \approx 2$.

Фізичний зміст γ_i можна зрозуміти, виходячи з того, що величина параметра Грюнайзена, яка визначається рентген-дифрактометрично при $T < \theta_p$, виражається логарифмічною похідною від першого від'ємного моменту функції $g(\omega)$ [10]

$$\gamma(n) = -\frac{1}{n} \frac{d \ln \langle \omega^n \rangle}{d \ln V}, \quad (4)$$

$$\text{де } n = -1, \text{ а } \langle \omega^n \rangle = \frac{\int_0^\infty \omega^n g(\omega) d\omega}{\int_0^\infty g(\omega) d\omega}.$$

У випадку Nb_3Sn електрон-фононні взаємодії можна врахувати, зробивши заміну $\langle \omega^n \rangle \rightarrow \langle \langle \omega^n \rangle \rangle$, де

$$\langle \langle \omega^n \rangle \rangle = \frac{\int_0^\infty \alpha^2(\omega) \omega^n g(\omega) d\omega}{\int_0^\infty \alpha^2(\omega) g(\omega) d\omega}, \quad (5)$$

α^2 – функція електрон-фононної взаємодії, що фігурує у теорії надпровідності і визначається за експериментальними даними з тунелювання у надпровідному стані, а величина $\langle \langle \omega^{-1} \rangle \rangle$, наприклад, використовується у модифікованій Мак-Міланом формулі теорії БКШ для температури T_c [3].

Оцінена таким чином величина γ_i буде

$$\gamma_i(-1) = -\frac{d \ln \langle \langle \omega^{-1} \rangle \rangle}{d \ln V} < 0,$$

що визначає зростання θ_p при підвищенні температури в області $T < T_i$. Слід відмітити, що, отримавши з (3), значення $\gamma_i = -182$ у три рази більше за абсолютним значенням $\gamma = -60$, обчисленим у [4] із урахуванням електрон-фононних взаємодій при $T = 30$ К для ізоструктурної з Nb_3Sn надпровідної сполуки V_3Si .

Далі, інтегруючи співвідношення $d \ln \theta_p / dT = -2\gamma_i \beta_i$ в межах від $T_0 = 4,2$ К до $T = 298$ К і, вважаючи $\gamma_i = -182$ та $\beta = 16 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ (середнє значення в межах $4 \div 298$ К [9]) сталими, а $\theta_p = 304$ К при $T = 298$ К [5], отримаємо

$$\theta_p(4,2 \text{ K}) = \frac{\theta_p(298 \text{ K})}{\exp[-2\gamma_i \beta(T - T_0)]} = 53,6 \text{ K},$$

що досить близько до величини $\theta_D = 56$ К, визначеної в [2].

Отже, викладена напівфеноменологічна інтерпретація аномальної температурної залежності рентгенівських інтерференцій у Nb_3Sn є прийнятною для пояснення аномально низького значення θ_D при $T = 4,2$ К. Останнє свідчить про те, що внаслідок гігантських ангармонізмів при $T \leq T_i$ у Nb_3Sn практично відсутня область, в якій справедлива апроксимація функції розподілу частот $g(\omega)$ дебаївською параболою. Приймаючи до уваги той факт, що θ_p може розглядатися як міра жорсткості зв'язку у ґратці, що коливається ($f \approx m\theta_p^2$) [1], температура $T_i = 60$ К може бути інтерпретована як температура максимальної динамічної стабільності Nb_3Sn на відміну від $T_m = 43$ К [3] – температури максимальної нестабільності за якої спостерігається мартенситне перетворення.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Лотоцький В.Б., Михальченко В.П. Оцінка сил між-атомного зв'язку в аксіальних кристалах // Науковий вісник ЧНУ. Вип. 201: Фізика. Електроніка. – Чернівці: 2004. - С.101-103.
2. Shier J.S., Taylor R.D. Temperature dependent isomer shift and anharmonic binding of Sn^{119} in Nb_3Sn from Mossbauer-effect measurements // Phys. Rev. – 1968. – 174, No.2. – P.346.
3. Вонсовский С.В., Изюмов Ю.А., Курмаев Э.З. Сверхпроводимость переходных металлов их сплавов и соединений. – М.: Наука, 1997.
4. Тестарди Л., Вегер М., Гольдберг И. Сверхпроводящие соединения со структурой β -вольфрама. – М.: Мир, 1977.
5. Vieland L.J. X-ray Study of Debye-Waller Factor of Nb_3Sn // Phys. Rev. B. – 1971. – 3, No.6. – P.1804.
6. Кривоглаз М.А. Теория рассеяния рентгеновских лучей и тепловых нейтронов реальными кристаллами. – М.: Наука, 1967.
7. Вакс В.Г. Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков. – М.: Наука, 1974.
8. Михальченко В.П., Кушта Г.П. Визначення сталої Грюнайзена 12%-ного хромистого фериту рентгенографічним методом // УФЖ. – 1963. – №8. – С.779.
9. Pearson W. A handbook of lattice spacings and structures of metals and alloys. – New-York-London: Pergamon Press, v. 1. – 1958, v. 2 – 1968.
10. Barron T.H.K. Leadbetter A.J. Morisson J.A. Salter L.S. Inelastic scattering of neutrons in solids and liquids. – Vienna: Intern. Atomic Agency, 1963. Vol. 2.