

УДК 539.27

ФИЗИКА

Член-корреспондент АН СССР Н. Е. АЛЕКСЕЕВСКИЙ,
Е. П. КРАСНОПЕРОВ, В. Л. СЕДОВ

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ПОЗИТРОНОВ С ЦЕПОЧКАМИ АТОМОВ НИОБИЯ В Nb_3Al

Многие интерметаллические соединения типа A_3B со структурой $A-15$ (β -W) обладают аномальными физическими свойствами. Электронная структура этих соединений весьма сложна, поскольку их элементарная ячейка содержит 6 атомов A (переходного элемента) и 2 атома B (переходного или непереходного элемента). Кристаллографическая структура A_3B соединений такова, что атомы типа A образуют три семейства взаимно перпендикулярных линейных цепочек, проходящих вдоль всего кристалла. При этом расстояние между атомами внутри одной цепочки заметно меньше кратчайшего расстояния между атомами различных цепочек. В связи с этим многие исследователи делали вывод, что основные особенности этих соединений могут быть интерпретированы на основе простой модели одномерных атомных цепочек (^{1, 2}). Для изучения электронной структуры таких соединений весьма перспективным является метод аннигиляции позитронов (^{3, 4}).

Известно, что значения температуры перехода в сверхпроводящее состояние T_c , а также некоторые другие свойства рассматриваемых соединений значительно меняются при изменении степени атомного порядка (⁵⁻⁸). В связи с этим в настоящей работе исследовался эффект угловой корреляции аннигиляционного излучения (у.к.а.и.) на поликристаллических образцах Nb_3Al при различных режимах термообработки.

Первоначально измерения производились на образцах, полученных путем быстрой кристаллизации. Затем измерения повторялись на тех же образцах после отжига при $700^\circ C$ в течение 5 суток. Измерения эффекта у.к.а.и. производились методом плоскопараллельных щелей. Видимые с места положения образца размеры щелей составляли $1-100$ мрад. Измеряли функции $N(\theta)$ — скорости счета пар аннигиляционных γ -квантов как функции угла θ ($\pi - \theta$ — угол между направлениями распространения пары γ -квантов). Если отвлечься от эффектов взаимодействия позитронов с электронами и ионами, то $N(\theta = p_z/mc)$ связывается простым соотношением с плотностью распределения электронов в импульсном пространстве $F(p)$ (¹²).

Результаты измерений представлены на рис. 1. Точки 1 относятся к образцу до отжига, $T_c = 17,2^\circ C$; 2 — после отжига, $T_c = 18,4^\circ K$. Кривые на рис. 1 нормированы так, чтобы вершины их совпадали. Наибольшее различие между кривыми наблюдается вблизи $\theta = \pi\hbar/(amc)$ (a — постоянная решетки), т. е. при значении проекции импульса p_z , равном расстоянию между центром зоны (точка Γ) и точкой X на границе зоны Бриллюэна (точка X лежит в середине грани куба). Это обстоятельство наводит на мысль, что, хотя измерения производили на поликристалле, на вид кривой у.к.а.и. влияет положение поверхности Ферми относительно зонных границ.

Можно сделать следующие предположения о характере поведения кривых $N(\theta)$, представленных на рис. 1, вблизи $\theta_0 = \pi\hbar/(amc)$. Вследствие неполного атомного порядка, в литом образце имеются деформированные цепочки атомов Nb. Как известно, растянутые области кристаллической решетки в металлах несут избыточный отрицательный заряд, способный захватывать позитроны (⁹⁻¹¹). Возможно, что растянутые области цепочек атомов Nb также захватывают позитроны. Если такое явление существует, то должно иметь место увеличение относительного вклада d -электронов,

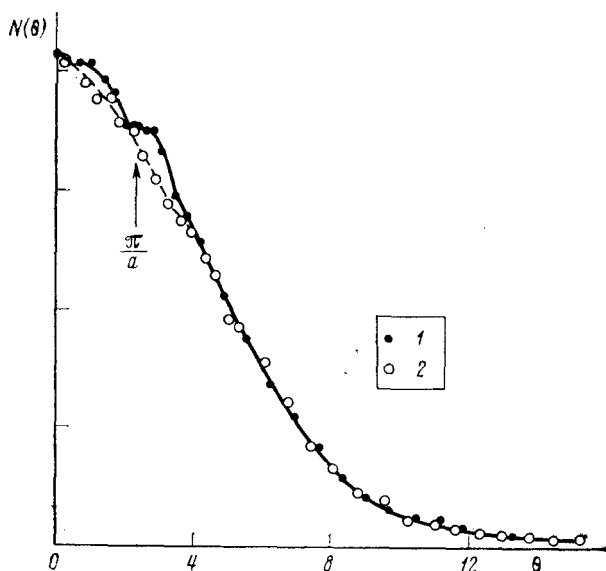


Рис. 1. Угловая корреляция аннигиляционного излучения для поликристаллического образца Nb_3Al . $N(\theta)$ в произвольных единицах. θ — угол корреляции в миллирадианах. Точки 1 относятся к литому образцу до отжига, 2 — после отжига. Более подробные объяснения в тексте

волновые функции которых локализованы вдоль цепочки, в общую величину вероятности аннигиляции позитронов с валентными электронами. В совершенном кристалле вклад этих электронов в общую вероятность аннигиляции невелик, поскольку имеется 36 валентных электронов на ячейку. Поэтому кривая для отожженного образца не проявляет заметной особенности вблизи θ_0 .

Будем представлять поликристаллический образец как совокупность большого числа n одинаковых одномерных линейных цепочек атомов, в которых электроны двигаются только параллельно их оси. Будем также предполагать, что цепочки не взаимодействуют между собой и хаотически ориентированы в пространстве. Для такой системы

$$F(p) = f(p) \frac{n}{4\pi p^2},$$

где $f(p)$ — плотность распределения электронов по импульсам для одной цепочки, p — абсолютное значение импульса.

Согласно Берко и Плейскетту (¹²), $f(p)$ обладает следующими свойствами.

1) Если уровень Ферми расположен в первой зоне ниже ее границы на величину δ , то $f(p)$ в интервале $(\pi/a - \delta; \pi/a + \delta)$ скачком обращается в нуль (здесь a — период цепочки).

2) Если p_F лежит во второй зоне на расстоянии δ от ее дна, соответствующем $p = \pm\pi/a$, то в том же интервале $f(p)$ будет иметь скачкообразный выброс.

3) При совпадении p_F с зонной границей $f(p)$ является гладкой непрерывной функцией.

Таким образом, для рассматриваемой модели $F(p)$ имеет особенности (связанные с положением уровня Ферми относительно границы зоны в одной цепочке) в сферическом слое с радиусами $p_1 = \pi/a - \delta$ и $p_2 = \pi/a + \delta$. Качественный вид кривых $N(\theta)$, соответствующих различным случаям положения уровня Ферми для такой системы, представлен на рис. 2.

Из сравнения кривых на рис. 1 и 2 видно, что форма экспериментальной кривой $N(\theta)$ для неотожженного образца соответствует случаю $p_F = \pi/a - \delta$. Таким образом, из полученных данных следует, что уровень Ферми d -электронов, ответственных за «одномерные свойства» Nb_3Al , лежит ниже границы зоны, на сравнительно небольшом от нее расстоянии ($\delta \approx 0,17\pi/a$).

Эти выводы согласуются с данными о поверхности Ферми d -электронов в V_3Si , полученных Берко и Вегером методом аннигиляции позитронов на монокристаллах⁽³⁾. Следует, однако, заметить, что по сравнению с результатами этих авторов, в настоящей работе для случая несовершенной кристаллической решетки положение уровня Ферми на кривой $N(\theta)$ проявлялось гораздо более четко.

Московский государственный университет
им. М. В. Ломоносова

Поступило
27 XII 1974

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ I. Labbe, J. Friedel, J. Phys., v. 27, 153, 303 (1966). ² M. Weger, J. Phys. Chem. Solids, v. 31, 1621 (1970); Л. П. Горьков, ЖЭТФ, т. 65, 1658 (1973). ³ S. Berko, M. Weger, Computational Solid State Physics, N. Y., 1972, p. 59. ⁴ I. Y. Dekhtyar, V. S. Mikhalev, S. G. Sakharova, Phys. Lett., v. 29A, 148 (1969). ⁵ K. Flukiger, P. Spitzli et al., ibid., v. 29A, 407 (1969). ⁶ P. R. Sahm, T. V. Pruss, ibid., v. 28A, 707 (1969). ⁷ Н. Е. Алексеевский, Н. В. Агеев, В. Ф. Шамрай, Неорганические материалы, № 12, 2156 (1966). ⁸ E. C. van Reuth, R. M. Waterstrat et al., Proc. X Intern. Conf. Low Temp. Phys., Moscow, 1966, p. 137. ⁹ A. H. Cottrell, A. H. Hunter, F. R. Nabarro, Phil. Mag., v. 44, 1064 (1953). ¹⁰ S. Berko, J. C. Erskine, Phys. Rev. Letters, v. 19, 307 (1967). ¹¹ V. L. Sedov, L. V. Solomatina, Phys. Lett., v. 41A, 313 (1972). ¹² S. Berko, J. S. Plaskett, Phys. Rev., v. 112, 1877 (1958).

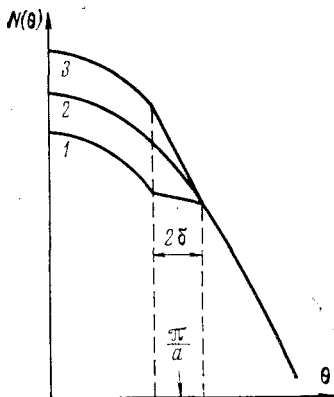


Рис. 2. Качественный вид кривых угловых корреляций для идеализированного образца, состоящего из совокупности хаотически расположенных одинаковых одномерных цепочек. Кривые 1, 2, 3 соответствуют различным случаям положения уровня Ферми относительно зонной границы для одной цепочки; $p_{F3} = \pi/a + \delta$, $p_{F2} = \pi/a$, $p_{F1} = \pi/a - \delta$