

# ЯДЕРНОЕ СПИН-РЕШЕТОЧНОЕ ВРЕМЯ РЕЛАКСАЦИИ $T_1$ И "ЧИСТАЯ" ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ НА ПОВЕРХНОСТИ ФЕРМИ $N(0)$ В $\text{Nb}-\text{Ti}$ СПЛАВАХ

В. С. Похатилев, И. М. Пузей

Методом импульсного ЯМР на ядрах  $\text{Nb}^{93}$  измерено спин-решеточное время релаксации  $T_1$  в  $\text{Nb}-\text{Ti}$  сплавах. Из данных по  $T_1$  рассчитана "чистая" плотность состояний на поверхности Ферми  $N(0)$  в зависимости от содержания  $\text{Ti}$ . Обнаружено, что  $N(0)$  имеет максимум при  $\sim 25$  ат. %  $\text{Ti}$ .

В последние годы достигнут значительный прогресс в теории ядерной спин-решеточной релаксации переходных металлов [1]. Из теории спин-решеточной релаксации следует, что  $T_1$  прямо пропорционально  $N^2(0)$  — квадрату "чистой" (*bare*) плотности состояний на поверхности Ферми (плотности состояний для газа невзаимодействующих электронов). Как показано в [2] в спин-решеточную релаксацию входит именно  $N(0)$ , а не плотность состояний, определенная из данных по электронной теплоемкости  $N_\gamma(0)$ , которая по сравнению с  $N(0)$ , увеличена электрон-фононным и кулоновским взаимодействиями. Таким образом, опыты по спин-решеточной релаксации дают возможность определить  $N(0)$ , а сравнение  $N(0)$  и  $N_\gamma(0)$  — параметры электрон-фононного и электрон-электронного взаимодействий. В данной работе мы измерили  $T_1$  в  $\text{Nb}-\text{Ti}$  сплавах и определили  $N(0)$  и ее зависимость от содержания титана в сплавах.

Исследуемые сплавы выплавлены индукционным методом. Слитки гомогенизировались при  $1500^\circ\text{C}$  в течение 10 часов, а затем закаливались в воде от  $1100^\circ\text{C}$ . Состав исследуемых сплавов контролировался химическим анализом. Образцы для исследования — порошки размером не более 40 мк. (Спин-решеточное время определялось при 77К в поле 18,7 кэ на импульсном спектрометре ЯМР "Брюкер". Применялись различные комбинации и последовательности импульсов ( $180^\circ\tau 90^\circ$ ;  $90^\circ\tau 90^\circ$ ;  $90^\circ\tau 90^\circ + 180^\circ$  и др.). Все они дали значения  $T_1$ , совпадающие в пределах 7%.

На рис. 1 приведена концентрационная зависимость  $(T_1 T)^{-1}(c)$  (где  $T$  — температура опыта,  $c$  — концентрация титана в ат. %).  $T_1$ , измеренное нами в ниобии, точно совпадает с данными других авторов [3]. Из рис. 1 видно, что  $(T_1 T)^{-1}$  имеет максимум для составов, содержащих  $\sim 25$  ат. %  $\text{Ti}$ . Заметим, что при добавлении циркония в ниобий  $(T_1 T)^{-1}$  также имеется максимум при содержании циркония  $\sim 30$  ат. % [3]. Наличие максимумов  $(T_1 T)^{-1}$  в сплавах  $\text{Nb}-\text{Ti}$  и  $\text{Nb}-\text{Zr}$  при близкой концентрации  $\text{Ti}$  и  $\text{Zr}$  в ниобии неудивительно, так как этим сплавам соответствует примерно одна и та же электронная концентрация  $e/a \sim 4,75-4,70$ .

В приближении сильной связи для кубического кристалла полная ядерная спин-решеточная скорость релаксации выражается в аналитической форме как сумма скоростей релаксации, обусловленных тремя механизмами:

$$\frac{1}{T_1} = \left(\frac{1}{T_1}\right)_{\text{кон}} + \left(\frac{1}{T_1}\right)_{\text{пол}} + \left(\frac{1}{T_1}\right)_{\text{орб}}, \quad (1)$$

где индексы кон., пол. и орб. соответствуют: контактному сверхтонкому взаимодействию; взаимодействию, обусловленному поляризацией заполненных  $s$ -оболочек; орбитальному взаимодействию. Полное выражение для ядерной спин-решеточной скорости релаксации имеет вид

$$\frac{1}{T_1 T} = 4\pi\gamma_n^2 \hbar k_B [N(0)]^2 \{ [\rho H_{\text{кон}}]^2 + [(1-\rho)H_{\text{пол}}]^2_q + [(1-\rho)H_{\text{орб}}]^2_p \}. \quad (2)$$

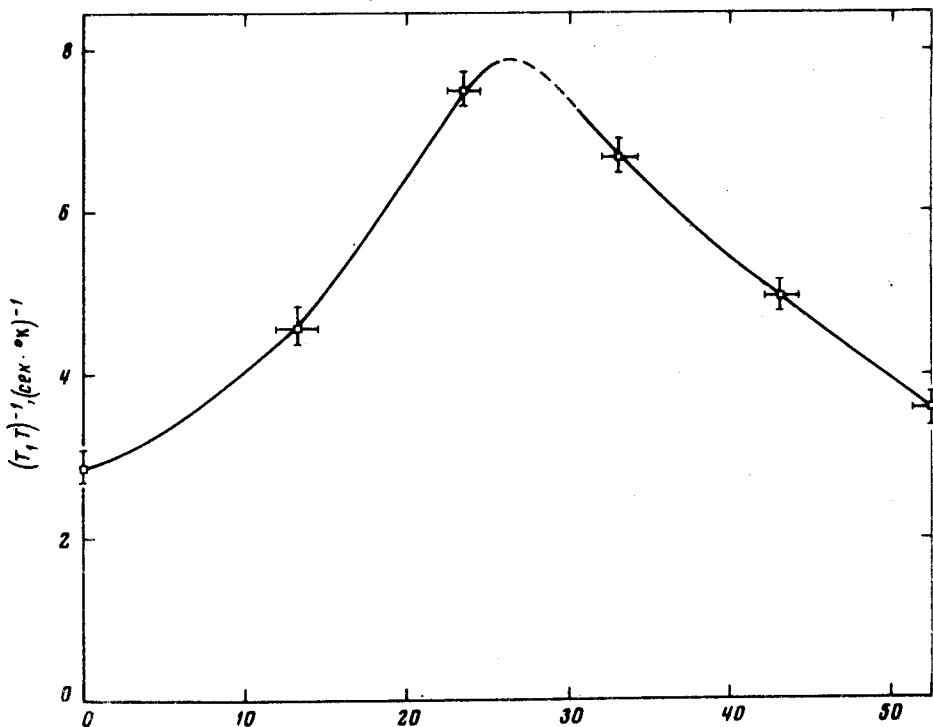


Рис. 1. Концентрационная зависимость спин-решеточной скорости релаксации  $(T_1 T)^{-1}$  в Nb - Ti сплавах

В этом выражении  $T$  - температура опыта,  $\gamma_n$  - ядерное гироманнитное отношение,  $k_B$  - постоянная Больцмана,  $N(0)$  - "чистая" плотность состояний на поверхности Ферми для одного направления спина,  $\rho$  - отношение плотности состояний  $s$ -электронов  $N_s(0)$  к суммарной плотности состояний  $\rho = N_s(0)/N(0)$ ,  $H$  - соответствующее сверхтонкое поле (СТП) для определенного типа взаимодействия, параметры  $q$  и  $p$  выражаются через степень  $f$  присутствия атомных функций  $\Gamma_5$  на поверхности Ферми.  $q$  и  $p$  в зависимости от  $f$  рассчитывались в [1] и имеют вид:

$$q = \frac{1}{3} (f)^2 + \frac{1}{2} (1-f)^2, \quad (3)$$

$$p = \frac{2}{3} f(2 - \frac{5}{3} f).$$

Релаксации, обусловленные дипольным и квадрупольным взаимодействиями малы и не учитывались [1]. Величины СТП разного происхождения для ниобия известны. Мы брали те же значения СТП, что и в работе [4] при расчете  $T_1$  в ниобии. Обычно предполагается, что волновые функции электронов с энергией Ферми могут быть ограничены атомными функциями с орбитальным числом  $l = 0$  и  $l = 2$ , что дает  $N(0) = N_s(0) + N_d(0)$ . Однако, атомные функции  $l = 1$  также могут дать вклад в суммарную плотность состояний  $N(0)$ . Но СТП от  $p$ -электронов мало по сравнению с СТП от  $s$ - и  $d$ -электронов [1]. Следовательно, вклад  $p$ -электронов в  $T_1$  мал и можно пренебречь вкладом этих электронов в  $N(0)$ . Основной вклад в  $N(0)$  на поверхности Ферми дают  $d$ -электроны. Поэтому хорошим приближением для  $\rho$  в ниобии будет значение  $\rho = 0,1$  [4]. Причем, мы полагаем, что  $\rho$  не изменяется с составом по аналогии с тем, что было предположено в [5] при изучении  $(T_1 T)^{-1}$  в сплавах со структурой А 15 на основе ванадия. Последний параметр, величину которого нам нужно знать для расчета  $N(0)$ , есть  $f$  — относительный вес атомных функций состояний типа  $\Gamma_5$  на поверхности Ферми. В соответствии с расщеплением атомных  $d$ -уровней в кубическом поле на трех- ( $\Gamma_5$ )- и двухкратно ( $\Gamma_3$ ) вырожденные уровни мы должны взять  $f = 0,6$ . Поскольку мы рассматриваем сплавы только с ОЦК решеткой, то  $f$  постоянно для всех сплавов.

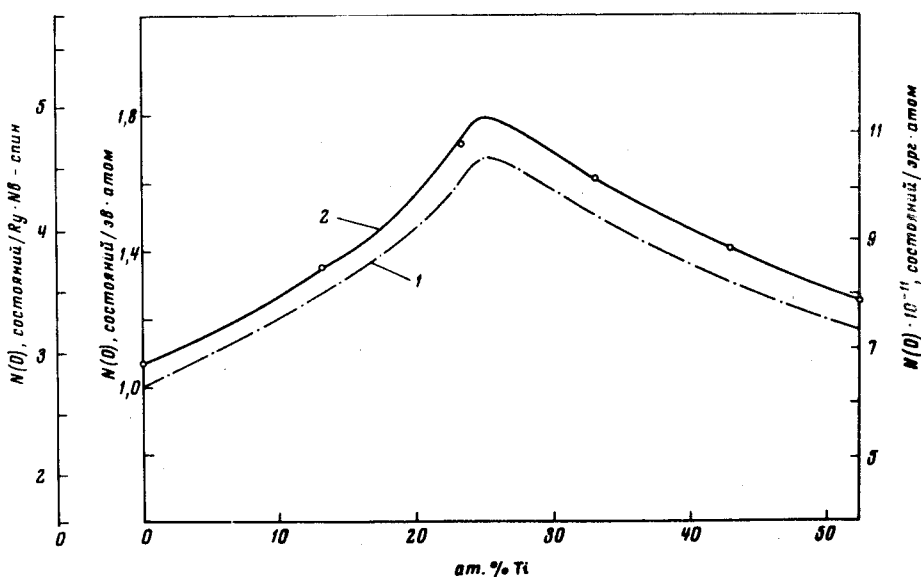


Рис. 2. Концентрационная зависимость "чистой" плотности состояний  $N(0)$  в Nb — Ti сплавах: 1 —  $N(0)$  рассчитывалось при  $H_{орб} = 0,285 \cdot 10^6$  э; 2 —  $N(0)$  рассчитывалось при  $H_{орб} = 0,75 \cdot (0,285 \cdot 10^6)$  э.

На рис. 2 приведена концентрационная зависимость "чистой" плотности состояний  $N(0)$ , рассчитанной по формуле (2).  $N(0)$  имеет максимум в области составов  $\sim 25$  ат. % Ti. Анализ показал, что некоторые вариации параметров  $\rho$ ,  $H$  и  $f$  в уравнении (2) не меняют формы зависимости  $N(0)$  от состава, а величины  $N(0)$  изменяются незначитель-

но. Так, в [6] было получено из зонных вычислений для ниобия, что  $\rho \cong 0,06$ . Рассчитанные  $N(0)$  для  $\rho \cong 0,06$  практически не отличаются от тех, которые приведены на рис. 2. Из рисунка видно, что изменение  $H_{орб}$  на 25% изменяет  $N(0)$  примерно на 6%.

Научно-исследовательский институт  
черной металлургии  
им. И.П.Бардина

Поступила в редакцию  
6 августа 1975 г.

### Литература

- [1] Y.Obata. J. Phys. Soc. Japan, 18, 1020, 1963; Y.Yafet, V.Jaccarino. Phys. Rev., 133, A1630, 1964.
  - [2] L.P.Kadanoff. Phys. Rev., 132, 2073, 1963.
  - [3] I.Masudo, M.Nishioka. J. Phys. Soc. Japan., 22, 238, 1967.
  - [4] B.N.Ganguly. Phys. Rev., B8, 1055, 1973.
  - [5] F.Y.Fradin. D.Zamir. Phys. Rev., B7, 4861, 1973.
  - [6] L.F.Mattheiss. Phys. Rev., 134, A970, 1964.
-