

КРИТЕРИИ СМЯГЧЕНИЯ ФОНОННОГО СПЕКТРА МОНОАТОМНОЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ ПЛЕНКИ С ДВУМЕРНЫМ ПОКРЫТИЕМ

В.Н. Кушнир¹, С.Л. Прищепа²

*¹Белорусский государственный университет,
г. Минск, Республика Беларусь*

*² Учреждение образования «Белорусский государственный университет
информатики и радиоэлектроники», г. Минск, Республика Беларусь*

Аннотация. В данной работе анализируется метод априорной оценки параметров двумерной кристаллической структуры, покрывающей тонкую металлическую пленку, необходимых для стабилизации (стимуляции) ее сверхпроводящего состояния. Метод основан на вычислении следа невозмущенной и возмущенной динамической матрицы. В работе рассмотрены два примера одномерных моделей, для которых задача о параметрах возмущения, необходимых для смягчения фононного спектра, решается в явных формулах.

Ключевые слова: Сверхпроводимость; критическая температура; ниобий; графен; модель Борна – Кармана; динамическая матрица; след матрицы; собственные частоты; одномерная цепочка; приближение ближайших соседей.

CRITERIA FOR SOFTENING THE PHONON SPECTRUM OF A MONOATOMIC CRYSTALLINE FILM WITH 2D COATING

V.N. Kushnir¹, S.L. Prischepa²

¹*Belarusian State University, Minsk, Republic of Belarus*

²*Educational Institution “Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics”, Minsk, Republic of Belarus*

Abstract. This paper analyzes a method for a priori estimating the parameters of a two-dimensional crystal structure covering a thin metal film, which are necessary for stabilizing (stimulating) its superconducting state. The method is based on calculating the trace of the unperturbed and perturbed dynamic matrices. Two examples of one-dimensional models are considered, for which the problem of determining the perturbation parameters necessary for softening the phonon spectrum is solved using explicit formulas.

Keywords: Superconductivity, critical temperature; niobium; graphene; Born – von Karman model; dynamical matrix; trace of matrix; eigen frequencies; one-dimensional chain; nearest-neighbors approximation.

Введение

Устойчивость характеристик сверхпроводимости пленок наноразмерных толщин относительно вариаций их материальных параметров является необходимым условием использования таких пленок в сверхпроводниковой наноэлектронике и спинтронике. С этой позиции ценность представляет обнаруженный эффект стабилизации критической температуры пленки ниобия при ее покрытии графеном [1]. Трактовка эффекта дана в [1] в рамках концепции стимуляции сверхпроводимости за счет «смягчения» фононного спектра кристаллической решетки (то есть, увеличения статистического веса низких частот). Данная концепция сформировалась к середине 1970-х гг. в ряде основополагающих экспериментальных и теоретических работ – их анализ был выполнен в обзоре [2]. Между тем, достижение эффекта смягчения фононного спектра модификацией поверхности пленки каким-либо 2D-покрытием оказывается довольно случайным событием [2]. Следовательно, необходимы априорные (и простые) критерии эффекта, например, минимума суммы частот, или квадратов частот спектра. Вторым критерий представляется более предпочтительным, поскольку сводится к оценке разности следов невозмущенной и возмущенной динамической матрицы кристаллической решетки. Ниже мы показываем на простых примерах эффективность данного критерия (см. также [3]).

Основная часть

Пусть D_0 и D – динамические матрицы невозмущенной и возмущенной (двумерным покрытием) моноатомной кристаллической

пленки, соответственно. Критерием смягчения фононного спектра назовем соотношение

$$Cr = Tr(D_0) - Tr(D) > 0, \quad (1)$$

где символ Tr означает «след».

В общем случае величина Cr может быть рассчитана в соответствии с теорией И.М. Лифшица [3], однако здесь мы рассмотрим два простых примера, демонстрирующих эффективность критерия, и требующих почти только устного вычисления.

В первом примере рассматривается классическая одномерная гармоническая цепочка N частиц массы M_0 с упругим взаимодействием (жесткости K_0) между ближайшими соседями, дополненная звеном из двух атомов массы M ; принимается, что связь между дополнительными атомами (K), равно как и между основной цепочкой и дополнительной (K_{01}) – также упругая. Данная элементарная модель использовалась в [1] в качестве иллюстрации эффекта смягчения фононного спектра за счет графенового покрытия. Теперь, вводя для этой модели параметры $K_0/M_0 = \omega_0^2$, $K/M = \omega^2$, $K_{01}/K_0 = \alpha$, и используя (1), получим

$$Cr = 4\omega_0^2 - 2\omega^2 - \alpha(1 + M_0/M) > 0. \quad (2)$$

Видим, что условие смягчения фононного спектра, совершенно предсказуемо: собственная частота дополнительного звена, $2^{1/2}\omega$, меньше верхней грани, $2\omega_0$, частотного спектра основной цепочки, связь с ней дополнительного звена должна быть достаточно слабой. Вместе с тем (2), определяя довольно узкую область значений параметров, объясняет безуспешные попытки стимулирования сверхпроводимости разными способами модификации поверхности пленки.

Рассмотрение второго примера связано с тем, что для воспроизведения реальных фононных спектров на основе модели Борна – Кармана учитывалось, как это следует из литературы [4] (см. также [2]), взаимодействие атома с несколькими ближайшими соседями (например, для ниобия необходимое их число равно 10–12). Поэтому, соблюдая последовательность в постановке задач, рассмотрим снова одномерную цепочку с дополнительным 2-атомным звеном, но вначале – с учетом всех парных взаимодействий. В этом случае вместо формулы (2) имеем

$$Cr/\omega_0^2 = 4 \sum_{n=1}^{N-3} \beta_n + 2 \sum_{n=N-2}^{N-1} \beta_n - 2v^2 - \frac{M + M_0}{M} \sum_{i=1}^2 \sum_{n=1}^{N-2} \alpha_{i,n} > 0, \quad (3)$$

где все «жесткости» масштабируются на K_0 (тогда $\beta_1 = 1$) и преобразуются в параметры связи β_n (для основной цепочки) и $\alpha_{i,n}$ (цепочки и звена), а $v = \omega/\omega_0$.

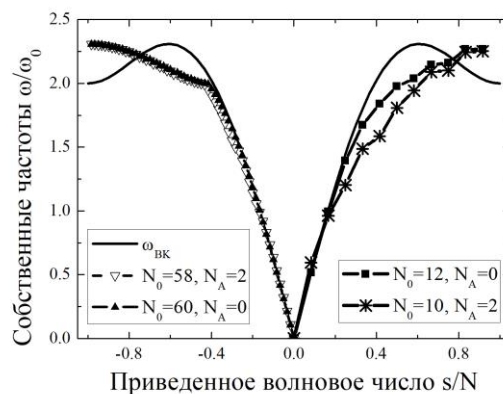
Видим, что принципиально выводы относительно смягчения фононного спектра не меняются, однако существуют обстоятельства, на которых акцентируем внимание, рассмотрев для удобства модель только двух ближайших соседей. В этом случае соотношение (3) упростится:

$$Cr/\omega_0^2 = 4(1 + \beta) - 2v^2 - (1 + M_0/M)(\alpha_1 + 2\alpha_2) > 0. \quad (4)$$

Зафиксировав отношение M_0/M и β , получим из (4) область значений в пространстве трех параметров (v, α_i) , благоприятных для сверхпроводимости. Факт смягчения фононного спектра при условии положительного критерия мы иллюстрируем на рисунке сравнением спектров однородной цепочки с числом одинаковых «атомов» $N_0 = 12$ (число дополнительных атомов $N_A = 0$) и цепочки с дополнительным звеном двух легких атомов ($N_0 = 10, N_A = 2$). Для расчета зафиксировано отношение $M_0/M = 7.5$ (близкое к отношению масс атомов Nb и C) и $\beta = 0.75$, взяты значения $v^2 = 0.5, \alpha_1 = 0.1$, а параметр α_2 находится из принятого значения $Cr = 4$. Из рисунка мы видим, что на участке $(0.2, 0.8)$ приведенных волновых чисел возмущенный спектр (звездочки) лежит ниже невозмущенного (квадратные символы).

Следующий факт, на который следует обратить внимание, заключается в характере дисперсионных кривых возмущенной и невозмущенной цепочки при $N_0 \rightarrow \infty$; из рисунка видим, что они почти сливаются (для удобства они представлены с отрицательными приведенными волновыми числами).

Наконец, обратим внимание на интересный сопутствующий факт, отраженный на рисунке: спектр «разомкнутой» цепочки в области высоких частот не совпадает со спектром цепочки, замкнутой по циклическим условиям Борна – Кармана. Этот факт обязан включению дополнительной связи со значением параметра $\beta > 0.25$.



Дисперсионные кривые невозмущенной и возмущенной упругой цепочки (линии с символами) и дисперсионная кривая одномерной периодической цепочки
 Dispersion curves of unperturbed and perturbed elastic chains (lines with symbols) and the dispersion curve of a one-dimensional periodic chain

Заключение

Таким образом, простота и эффективность рассмотренного критерия смягчения фононного спектра в одномерных задачах убеждают в перспективности его обобщения на случай реальных монокристаллических решеток.

Список использованных источников

1. Prischepa S. L., Kushnir V. N., Cirillo C., Granata V., Komissarov I. V., Kovalchuk N. G., et al. (2021) Superconducting critical temperature and softening of the phonon spectrum in ultrathin Nb and NbN/graphene hybrids. *Superconductor Science and Technology. IOP.* 34, 115021-1–15.
2. Prischepa S. L., Kushnir V. N. (2023) Phonon softening in nanostructured phonon-mediated superconductors (review). *Journal of Physics: Condensed Matter. IOP.* 35, 313003-1–54.
3. Лифшиц И. М. (1952) Об одной задаче теории возмущений, связанной с квантовой статистикой. *Успехи математических наук.* 7(1) 171–180.
4. Nakagawa Y., Woods A. D. B. (1963) Lattice dynamics of niobium. *Physical Review Letters. APS.* 11(6) 271–274.

References

1. Prischepa S. L., Kushnir V. N., Cirillo C., Granata V., Komissarov I. V., Kovalchuk N. G., et al. (2021) Superconducting critical temperature and softening of the phonon spectrum in ultrathin Nb and NbN/graphene hybrids. *Superconductor Science and Technology. IOP.* 34, 115021-1–15.
2. Prischepa S. L., Kushnir V. N. (2023) Phonon softening in nanostructured phonon-mediated superconductors (review). *Journal of Physics: Condensed Matter. IOP.* 35, 313003-1–54.
3. Lifshitz I. M. (1952) On a problem of the theory of perturbations connected with quantum statistics. *Uspekhi Matematicheskikh Nauk.* 7(1) 171–180 (in Russian).
4. Nakagawa Y., Woods A. D. B. (1963) Lattice dynamics of niobium. *Physical Review Letters. APS.* 11(6) 271–274.

Сведения об авторах

Кушнир В.Н., д-р физ.-мат. наук, доц., проф., Белорусский государственный университет, vnkushnir@gmail.com.

Прищеп С.Л., д-р физ.-мат. наук, проф., проф., учреждение образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники», prischepa@bsuir.by.

Information about the authors

Kushnir V.N., Dr. Sci. (Phys. Mat.), Associate Professor, Professor of the Department, Belarusian State University, vnkushnir@gmail.com.

Prischepa S.L., Dr. Sci. (Phys. Mat.), Professor, Professor, Educational Institution “Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics”, prischepa@bsuir.by.