

# “SUPERCONDUCTIVIDAD EN EL COMPUESTO $\text{Li}_2\text{Pd}_{3-x}\text{Ag}_x\text{B}$ con $x=0.0, 0.1$ y $0.3$ ”

Amaranta Anai Castro Espinosa

Instituto de Investigaciones en Materiales

06 de noviembre del 2021



# Contenido

- 1 Objetivos y justificación
- 2 Compuesto  $\text{Li}_2\text{Pd}_3\text{B}$
- 3 Síntesis y caracterización
  - Sistema  $\text{Li}_2\text{Pd}_{3-x}\text{Ag}_x\text{B}$
- 4 Conclusiones



# Objetivos

- El objetivo de este trabajo fue realizar la sustitución del Pd por Ag en el compuesto superconductor  $\text{Li}_2\text{Pd}_3\text{B}$ .
- Estudiar los efectos de estas sustituciones sobre la estructura cristalina y las propiedades superconductoras.



## Justificación

- Estas sustituciones producirán cambios en el tamaño de la celda cristalina lo cual debe modificar la estructura de bandas y por lo tanto la densidad de estados electrónicos en la energía de Fermi. La modificación en la densidad de estados al nivel de Fermi afectara las características superconductoras.



## Antecedentes del compuesto $\text{Li}_2\text{Pd}_3\text{B}$

- La superconductividad en el compuesto  $\text{Li}_2\text{Pd}_3\text{B}$  fue descubierta por Togano et al. con una  $T_c$  de 8 K.
- Cristaliza en una estructura cúbica, es no centro simétrico, su grupo espacial es el  $P4_332$  y tiene un parámetro de red de 6.755 Å.





**Tabla:** Parámetros obtenidos del calor específico del compuesto  $\text{Li}_2\text{Pd}_3\text{B}$ ; coeficiente de Sommerfeld  $\gamma$ , densidad de estados en el nivel de Fermi  $N(E_F)$ , coeficiente del término cúbico de la temperatura  $\beta$ , temperatura de Debye  $\theta_D$ , temperatura crítica  $T_c$  y el cambio del calor específico a  $T_c$  dividido entre  $\gamma T_c$ .

Referencia	$\gamma$ (mJ/molK <sup>2</sup> )	$N(E_F)$ estados/eV	$\beta$ (mJ/molK <sup>4</sup> )	$\theta_D$ (K)	$T_c$ (K)	$\Delta C/\gamma T_c$
Takeya <sup>1</sup>	9.01±0.01	0.91±0.04	0.98±0.01	221±1	7.5±0.3	2.0±0.3
Takeya <sup>2</sup>	9.3±0.3		1.1±0.1			

<sup>1</sup>Phys. Rev. B **72**, 104506 (2005).

<sup>2</sup>Phys. Rev. B **76**, 104506 (2007).



**Tabla:** Valores obtenidos a partir de medidas de magnetización en función del campo magnético; campo crítico bajo  $H_{c1}(0)$ , campo crítico alto  $H_{c2}^{WHH}(0)$ , longitud de coherencia  $\xi(0)$ , longitud de penetración  $\lambda(0)$  y el parámetro  $\kappa(0)$  de G-L.

Referencia	$H_{c1}(0)$ (Oe)	$H_{c2}^{WHH}(0)$ (T)	$\xi(0)$ (nm)	$\lambda(0)$ (nm)	$\kappa(0)$
Badica <sup>3</sup>	138	3.4	9.8	190	19.3
Li <sup>4</sup>	230	4.6	8.5	132	15.5
Badica <sup>5</sup>	135	4	9.1	194	21
Togano <sup>6</sup>		4.8			

<sup>3</sup> JPS **74**, 1014 (2005).

<sup>4</sup> Physica C **468**, 244 (2008).

<sup>5</sup> Appl. Phys. Lett **85**, 4433 (2004).

<sup>6</sup> Phys. Rev. B **93**, 247004 (2004).





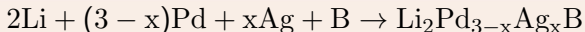
- Las muestras se sintetizaron con un horno de arco marca Materials Research Furnace.
- Los difractogramas de las muestras se obtuvieron de un difractómetro de rayos X (XRD) modelo D5000 que trabaja con radiación de Co con una longitud de onda de  $1.79030 \text{ \AA}$ . El programa empleado para realizar el refinamiento de la estructura fue el MAUD (Materials Analysis Using Diffraction).
- Las mediciones magnéticas se realizaron a través de un equipo que se basa en un SQUID (Superconducting Quantum Interference Device).
- Las medidas eléctricas se realizaron por el método de cuatro puntas.
- Las medidas de calor específico se realizaron con el método de relajación.



## Síntesis de las muestras $\text{Li}_2\text{Pd}_{3-x}\text{Ag}_x\text{B}$ con $x=0.0, 0.1$ y $0.3$ .

Los reactivos empleados para la síntesis de las muestras fueron Pd en polvo, gránulos de Li, B y Ag en polvo. Los reactivos se pesaron estequiométricamente para obtener muestras de 0.3 g por medio de las siguientes reacciones:

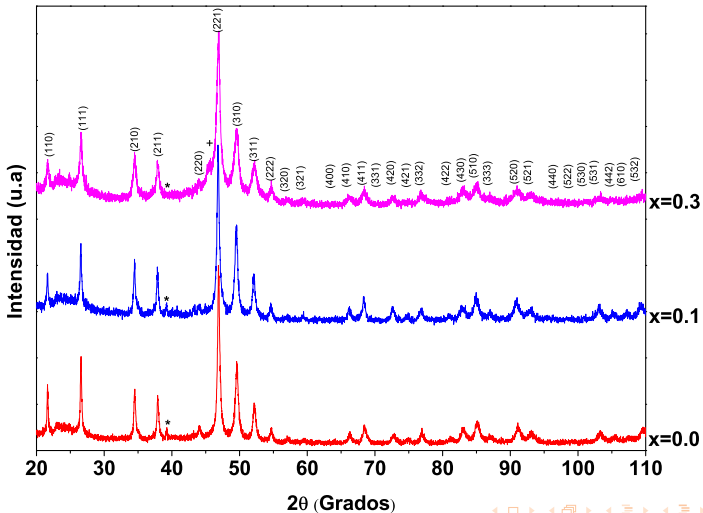
Compuesto  $\text{Li}_2\text{Pd}_{3-x}\text{Ag}_x\text{B}$



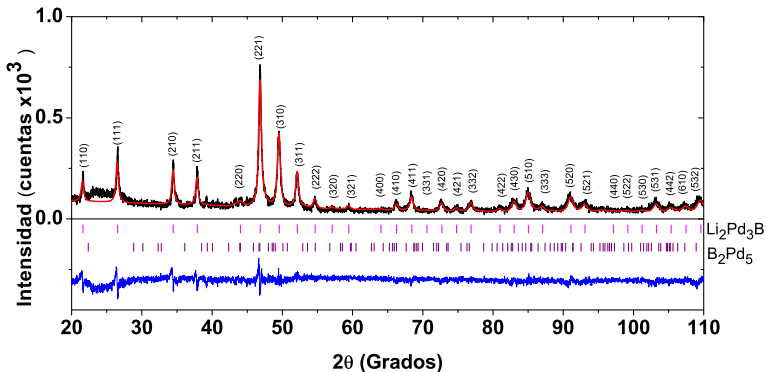
# Horno de arco



# Difracción de rayos-X



## Refinamiento de la estructura



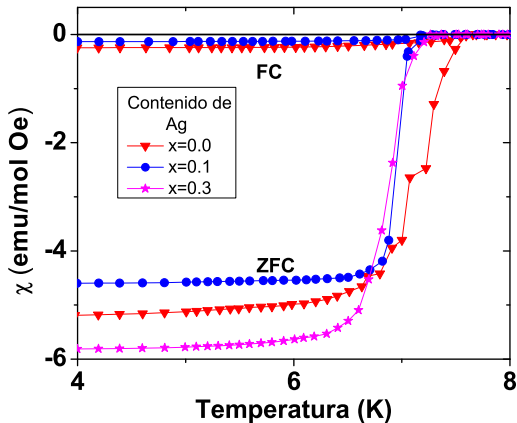
Refinamiento del patrón de difracción del compuesto  $\text{Li}_2\text{Pd}_{2.9}\text{Ag}_{0.1}\text{B}$ , medidas en un paso de  $0.015^\circ$  durante 13 horas. La diferencia entre el patrón de difracción experimental (línea negra) y el calculado (línea roja) se muestra en la parte inferior.

	x=0.0	x=0.1	x=0.3
a (Å)	6.7427(3)	6.7548(3)	6.7637(9)
V (Å <sup>3</sup> )	306.6	308.2	309.4
$R_w$ (%)	15.82	16.28	14.34
$R_b$ (%)	12.28	12.72	11.08
$R_{exp}$ (%)	10.87	11.98	10.37
$\chi^2$ (%)	1.45	1.35	1.38
$\text{Li}_2\text{Pd}_{3-x}\text{Ag}_x\text{B}$ (%)	90.5590	97.5043	80.1257
$\text{B}_2\text{Pd}_5$ (%)	9.4490	2.4956	19.0506
$\text{Pd}_2\text{B}$ (%)	-	-	0.8235

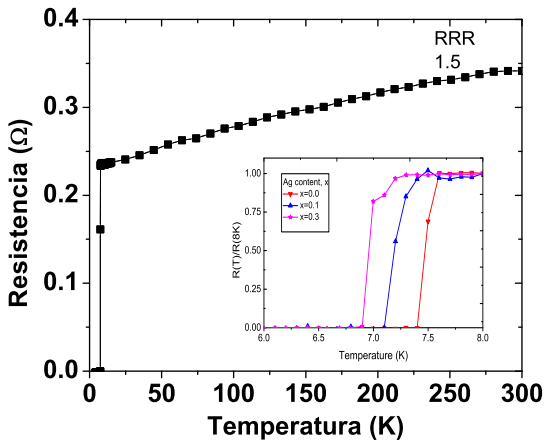
Parámetros de red, volúmenes, parámetros de bondad del refinamiento y porcentajes de las fases  $\text{Li}_2\text{Pd}_{3-x}\text{Ag}_x\text{B}$ ,  $\text{B}_2\text{Pd}_5$  y  $\text{Pd}_2\text{B}$  consideradas en el refinamiento del sistema con sustitución de Ag.



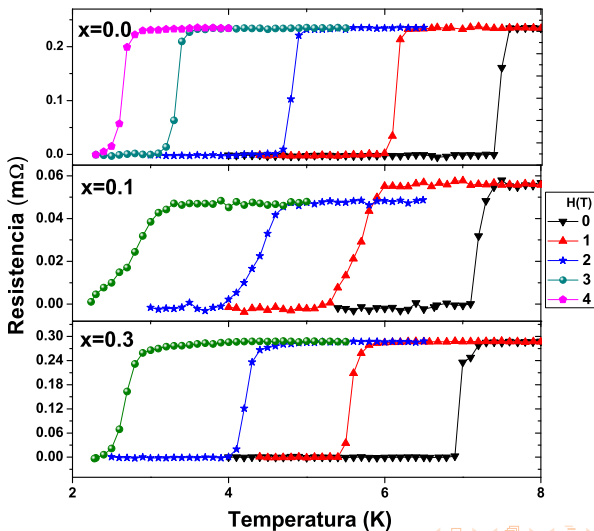
# Medidas magnéticas



# Medidas eléctricas





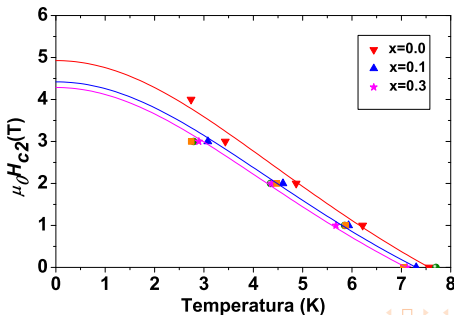


### Ecuación de Ginzburg–Landau

$$H_{c2}(T) = H_{c2}(0) \left( \frac{1-t^2}{1+t^2} \right); t = T/T_c$$

### Ecuación de Werthamer-Helfand-Hohenberg (WHH)

$$\mu_0 H_{c2}(T) = -0.693 \mu_0 \left( \frac{dH_{c2}}{dT} \right)_{T=T_c} T_c$$



$x$	$T_c$ (K)	$dH_c/dT$ (T/K)	$H_{c2}^{WHH}(0)$ (T)	$H_{c2}^{G-L}(0)$ (T)	$\xi(0)$ (nm)	$\mu_0 H^{Pauli}$ (T)	$\mu_0 H_{(BCS)}^{Pauli}$ (T)
0.0	7.56	$-0.79 \pm 0.15$	$4.15 \pm 0.25$	$4.9 \pm 0.15$	$8.23 \pm 0.12$	$11.97 \pm 1.16$	13.5
0.1	7.3	$-0.741 \pm 0.02$	$3.602 \pm 0.07$	$4.4 \pm 0.11$	$8.68 \pm 0.01$	$12.94 \pm 1.40$	12.6
0.3	7.1	$-0.716 \pm 0.01$	$3.512 \pm 0.06$	$4.3 \pm 0.07$	$8.79 \pm 0.01$	$13.68 \pm 0.85$	12.3

### Campo límite de Pauli

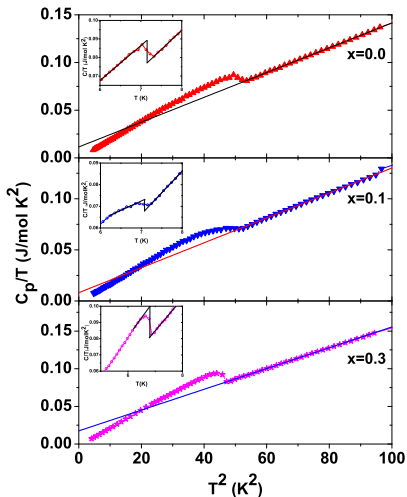
$$\mu_0 H^{Pauli} = \frac{2\Delta(0)}{\mu_B \sqrt{2}}$$

### Campo límite de Pauli a partir de BCS

$$\mu_0 H_{BCS}^{Pauli} = 1.83 T_c$$



# Medidas de calor específico a presión constante



## Calor específico

$$C_n = \gamma T + \beta T^3$$

$$\bullet C_e = \gamma T$$

$$\bullet C_f = \beta T^3$$



## Temperatura de Debye

$$\theta_D = \left( \frac{1943.7N}{\beta} \right)^{\frac{1}{3}}$$

## Densidad de estados electrónicos al nivel de Fermi

$$N(E_F) = 0.1519 \frac{\gamma}{k_B^2}$$

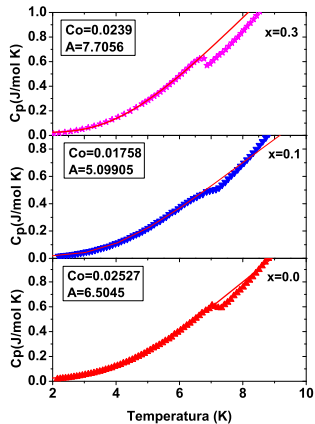
## Constante de acoplamiento electrón-fonón

$$\lambda_{e-f} = \frac{\text{Ln}\left(\frac{\theta_D}{1.45T_c}\right)(1-0.62\mu^*)}{\text{Ln}\left(\frac{\theta_D}{1.45T_c}\right)(1-0.62\mu^*)+1.04}; \mu^* = 0.13$$



## Calor específico

$$C_p = C_o + A \exp(-\Delta(0)/k_B T)$$



## BCS

$$\frac{2\Delta(0)}{k_B T_c} = 3.52 ; \Delta C / \gamma T_c = 1.43$$

x	0.0	0.1	0.3
$\gamma$ (mJ/mol K)	$11.26 \pm 0.31$	$8.11 \pm 0.37$	$17.48 \pm 0.26$
$N(E_F)$ ( $\text{eV}^{-1}$ )	$2.43 \pm 0.065$	$1.72 \pm 0.078$	$3.70 \pm 0.055$
$\beta$ (mJ/mol $\text{K}^4$ )	$1.3 \pm 0.004$	$1.22 \pm 0.005$	$1.38 \pm 0.004$
$\theta_D$ (K)	208	212	204
$T_c$ (K)	7.36	6.89	6.72
$\Delta C / \gamma T_c$	$0.96 \pm 0.03$	$1.14 \pm 0.05$	$0.89 \pm 0.01$
$\lambda_{e-f}$	0.84	0.81	0.82
$2\Delta(0)$ (meV)	$2.92 \pm 0.03$	$2.77 \pm 0.02$	$2.91 \pm 0.04$
$2\Delta(0) / k_B T_c$	$4.60 \pm 0.03$	$4.67 \pm 0.03$	$5.03 \pm 0.07$



## Conclusiones

- El efecto de la sustitución del Pd por Ag causa un incremento en el parámetro de red.
- A partir de las medidas de calor específico se obtuvo que la  $T_c$  disminuye al aumentar el contenido de Ag para las concentraciones  $x=0.0$ ,  $0.1$  y  $0.3$ .
- En el sistema  $\text{Li}_2\text{Pd}_{3-x}\text{Ag}_x\text{B}$  con  $x=0.0$ ,  $0.1$  y  $0.3$  los valores del  $\mu_0 H_{c2}^{WHH}(0)$  y  $\mu_0 H_{c2}^{G-L}(0)$  son menores que los del  $\mu_0 H^{Pauli}$  lo cual indica que el campo límite de Pauli juega un papel importante en el rompimiento de pares.





- Los valores obtenidos de la razón  $\Delta C/\gamma T_c$  y  $2\Delta(0)/k_B T_c$  indican que para este sistema el acoplamiento electrónico es fuerte.
- El comportamiento a bajas temperaturas del calor específico nos permiten clasificar al sistema  $\text{Li}_2\text{Pd}_{3-x}\text{Ag}_x\text{B}$  con  $x=0.0, 0.1$  y  $0.3$  como un superconductor convencional BCS.

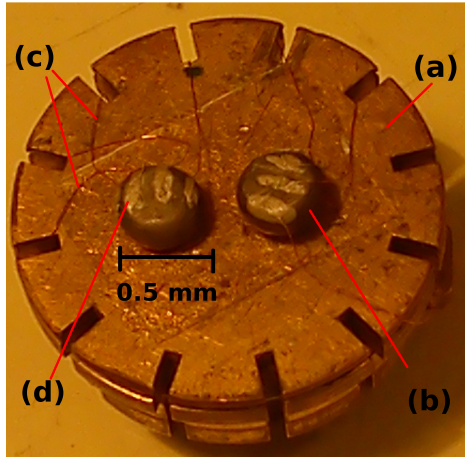


# Gracias por su atención...





## Método de 4 puntas



# Sistema con Ag

