

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА



1/8-77
P17 - 10560

P-22

2893/2-77

И.М.Рангелов

ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРНОГО ПЕРЕХОДА
НА СВЕРХПРОВОДЯЩИЕ СВОЙСТВА МЕТАЛЛОВ

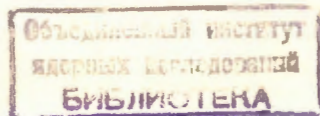
1977

P17 - 10560

И.М.Рангелов

ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРНОГО ПЕРЕХОДА
НА СВЕРХПРОВОДЯЩИЕ СВОЙСТВА МЕТАЛЛОВ

Направлено в журнал "Физика твердого тела"



Рангелов И.М.

P17 - 10560

Влияние структурного перехода на сверхпроводящие свойства металлов

Сделана попытка выяснить общую физическую причину высоких T_c и наличия мартенситного превращения в интерметаллических соединениях типа A_3B со структурой $A15(\beta-W)$. Известно, что в зависимости от энергетического спектра и плотности электронов некоторые кристаллические решетки металлов проявляют неустойчивость относительно искажения, понижающего симметрию кристаллической структуры и потенциала. Эти структурные переходы сопровождаются переходом металла в полуметаллическое или полупроводниковое состояние. На основе энергетических спектров и распределения нормальных и сверхпроводящих электронов в двухжидкостной модели сверхпроводника исследовано влияние сверхпроводящего состояния металла на энергетическую выгодность и параметры структурного перехода. С учётом изменения энергетических спектров электронов и фононов при структурном переходе качественно проанализировано его влияние на сверхпроводящие свойства металлов.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1977

Rangelov I.M.

P17 - 10560

Structure Transition Effect of the Superconducting Properties of Metals

An attempt is made to make clear the common physical reasons for high T_c and for the presence of the martensitic transformation in an intermetal combination of the A_3B type with structure $A15(\beta-W)$. It is known that the instability of some crystal metal lattice with respect to the distortion (that lowers the symmetry of the crystal structure and of the interaction potential in which electrons are moving) is due to the energy spectrum and density of electrons. These structure transformations are accompanied by transitions of a metal into the semimetal or semiconductor states. On the basis of the energy spectrum and distribution of the normal and superconductive electrons in the framework of the two-fluid model of superconductivity, the influence of the superconductive state of a metal on the energetic profit and parameters of the structure transformation was studied. The influence of the change of the energy spectrum of electrons and phonons on the superconductive properties of a metal was considered when the structure transformation took place.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1977

Исследованы в отдельности пайерлсовский структурный переход /ПСР/ и переход коллективизированных валентных электронов /КВЭ/ в сверхпроводящие и нормальные при куперовском сверхпроводящем переходе /КСП/. Качественно рассмотрена возможность сосуществования обоих переходов и их взаимное влияние. При исследовании ПСР учитывалось только изменение энергетического спектра КВЭ и изменение упругой энергии кристаллической решетки металла. Качественно учтено влияние изменения энергетического спектра фононов при ПСР на величину динамической корреляции между формирующими куперовскую пару квазичастицами и усиление процессов переброса при ПСР.

1. Введение

Известные к настоящему времени сверхпроводники с наивысшими температурами сверхпроводящего перехода T_c и с наивысшими критическими полями H_c относятся к классу интерметаллических соединений A_3B со структурой $A15(\beta-W)^{1-4}$. В некоторых из этих соединений, являющихся сверхпроводниками с высокими T_c , обнаружено мартенситное структурное превращение решетки из объемно-центрированной кубической в тетрагональную фазу при T_p , слегка превышающих T_c . Поэтому необходимо выяснить, имеют ли общую физическую природу высокие T_c и наличие мартенситного превращения, кроющуюся в особенностях их кристаллической структуры, состава и энергетического спектра коллективизированных валентных электронов /КВЭ/.

Впервые Литтолом^{/5/} было исследовано взаимное влияние пайерлсовского структурного перехода/ПСП/^{/6/} и куперовского сверхпроводящего перехода /КСП/^{/7/}. Далее в зависимости от рассматриваемой модели получались противоположные выводы. В работе Андерсена и Блаунта^{/8/} предполагалось, что вблизи T_p одна из оптических фононных мод становится достаточно низкочастотной. Это должно увеличить эффективную константу взаимодействия КВЭ с этой модой, которая обратно пропорциональна среднему значению фононной частоты $\sqrt{\langle \omega^2 \rangle}$. С другой стороны, T_c пропорциональна $\sqrt{\langle \omega^2 \rangle}$. Поэтому в работе^{/8/} предполагалось, что в результате ПСП реализуется возможность максимального повышения T_c .

Существует противоположная точка зрения на влияние ПСП на T_c . Предполагается, что высокотемпературная симметричная фаза неустойчива из-за большой константы электрон-фононного взаимодействия. Так как низкотемпературная искаженная фаза устойчива, то, наверняка, константа электрон-фононного взаимодействия уменьшается при ПСП. Следовательно, утверждается, что T_c^0 в отсутствие ПСП была бы выше наблюдаемой T_c .

Конечно, предположение, что константа электрон-фононного взаимодействия в искаженной фазе меньше константы в симметричной фазе ошибочно. Известно, что чем ближе находится ферми-поверхность /ФП/ КВЭ к границам зон Бриллюэна, тем больше константа электрон-фононного взаимодействия. Так как ПСП приближает ФП КВЭ к границам зон Бриллюэна, то в искаженной фазе константа электрон-фононного взаимодействия, наверняка, больше константы в симметричной фазе.

Теоретические исследования^{/9,10/} показывают, что кристаллическая решетка проявляет неустойчивость к ПСП, если сильное электрон-фононное взаимодействие сопровождается наличием плоских участков в ФП КВЭ.

Однако только сильная анизотропия в пространственном распределении КВЭ может обеспечить ФП, состоящую из слабо гофрированных плоскостей. Степень гофрировки зависит от степени анизотропии и от симметрии кристаллической решетки и плотности КВЭ.

2. Описание модели

Так как в интерметаллических соединениях типа A_3B со структурой $A15$ /рис. 1/ атомы типа А образуют три взаимно перпендикулярные системы линейных цепочек, погруженные в объемно-центрированную кубическую решетку атомов типа В, то предполагалось^{/11/}, во-первых, что s-электроны переходных атомов А и атомов сорта В коллективизируются в кристалле, образуя широкую зону /в нее могут входить и валентные p-электроны атомов В / и, во-вторых, что d-электроны образуют узкие одномерные зоны^{/12/} линейных цепочек. Широкая зона перекрывается с узкими зонами, причем уровень Ферми проходит где-то внутри узкой зоны. Хотя расстояние между ближайшими атомами сорта А одной цепочки d_1 не так сильно отличается от расстояния между атомами А разных цепочек $d_2/d_1/d_2$: $d_1 = 1,22/$, второе предположение можно считать выполненным, так как пространственное распределение d-электронов сильно анизотропно. В этой модели движение d-КВЭ в кристалле оказывается, во-первых,

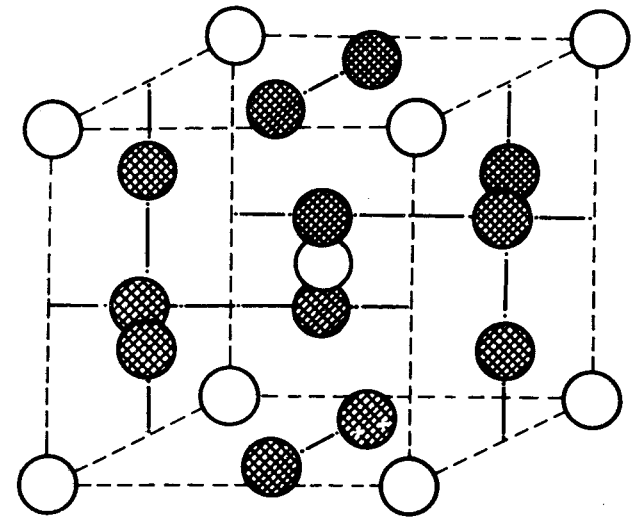


Рис. 1. Элементарная ячейка кристаллической структуры $A15$ интерметаллических соединений типа A_3B .

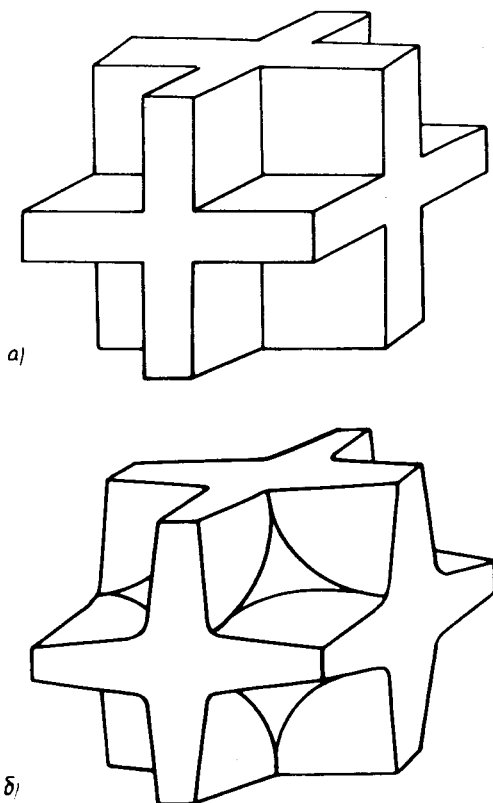


Рис. 2. Ферми-поверхность КВЭ в интерметаллических соединениях A_3B . первая подзона.

одномерным и, во-вторых, - многократно вырожденным /по номерам цепочки/. Однако для проявления одномерности энергетического спектра КВЭ вблизи энергии Ферми /что существенно для обеспечения энергетической выгоды ПСП/ необходимо, чтобы $d3z^2-r^2$ зона переходных атомов А являлась проводимой зоной симметричной фазы. Не углубляясь в вопрос распределения КВЭ по зонам, можно допустить, что сильно анизотропное квазиодномерное пространственное распределение КВЭ обеспечивает им ФП, составленную из трех взаимно

перпендикулярных, слабо гофрированных параллельных плоскостей /рис. 2/. Так как обычно ПСП в некоторых интерметаллических соединениях A_3B со структурой $A15$ происходит при температурах T_p , больших, чем T_c , то сначала рассмотрим изменение энергетических спектров КВЭ и фононов при ПСП и КСП, а потом исследуем получение сверхпроводящего состояния в пайерлсовском полуметалле.

3. Пайерлсовский структурный переход

Энергетический спектр сильно анизотропно распределенных в пространстве КВЭ /например, КВЭ, находящихся в тетрагональной кристаллической решетке/ можно записать в виде

$$\epsilon_k^0 = \epsilon_1(k_z) + \gamma \epsilon_2(k_x, k_y). \quad /1/$$

Здесь параметр γ учитывает анизотропию в пространственном распределении КВЭ и определяет степень гофрировки их ФП. Возможны два случая:

а/ $\gamma \ll 1$. Пространственные волновые функции КВЭ сильно вытянуты вдоль одной оси /оси z /, и поэтому перекрытие волновых функций КВЭ соседних атомов сильно вдоль этой оси и очень слабо в перпендикулярной плоскости (XY). В этом случае ФП КВЭ одновалентного металла составлена из двух параллельных, слабо гофрированных плоскостей /рис. 3/.

б/ $\gamma \gg 1$. Пространственные волновые функции КВЭ сильно вытянуты вдоль плоскости (XY) и слабо - вдоль перпендикулярной оси z . Поэтому перекрытие волновых функций КВЭ ближайших атомов, лежащих в одной плоскости, намного больше перекрытия волновых функций КВЭ ближайших атомов, находящихся в соседних плоскостях /вдоль оси z /. В этом случае ФП КВЭ одновалентного металла является слабо гофрированным цилиндром /рис. 4/.

Удвоение периода решетки вдоль оси z в случае $\gamma \ll 1$ и вдоль диагонали плоскости (XY) в случае $\gamma \gg 1$ при-

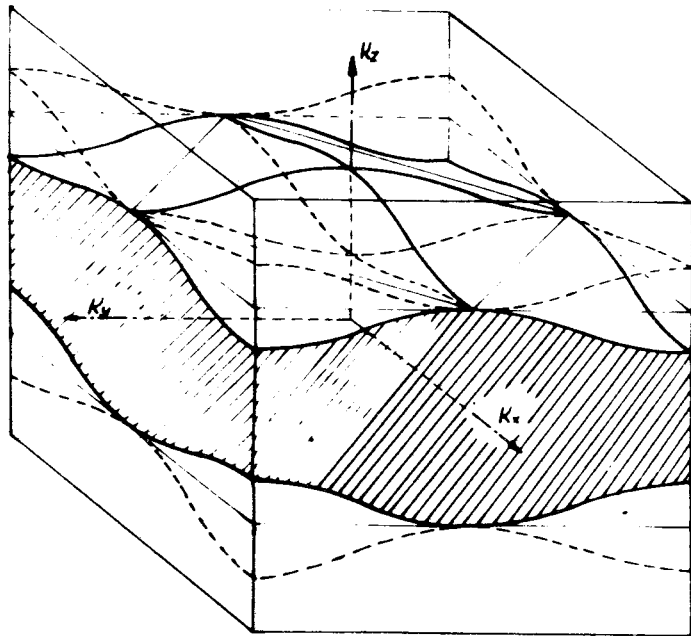


Рис. 3. Ферми-поверхность КВЭ в квазиодномерном одновалентном металле.

водит к появлению новых поверхностей разрыва энергии

/плоскости $K_z = \pm \frac{\pi}{2c}$ и плоскости $K_x \pm K_y = \pm \frac{\pi}{a}$ соот-

ветственно/ и к образованию новых ФП КВЭ /рис. 5 и рис. 6/. Новые плоскости разрыва энергии в К-пространстве являются гранями новых зон Бриллюэна искаженной удвоением периода кристаллической решетки с уменьшенным в два раза объемом. В зависимости от значения параметра гофрировки u в валентной подзоне пайерлсовского полуметалла остается некоторое количество незанятых КВЭ состояний /дырок/, и такое же количество КВЭ занимают состояния в проводимой подзоне. Поэтому в зависимости от соотношения между равновесной деформацией решетки и гофрировкой ФП КВЭ ПСП одновалентного металла сопровождается переходом в полуметал-

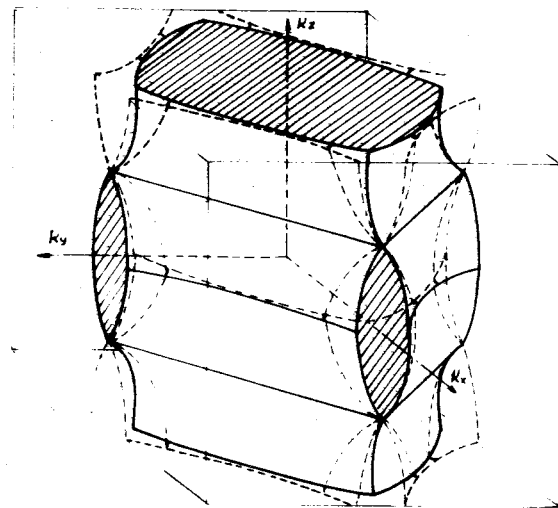


Рис. 4. Ферми-поверхность КВЭ в квазидвухмерном одновалентном металле.

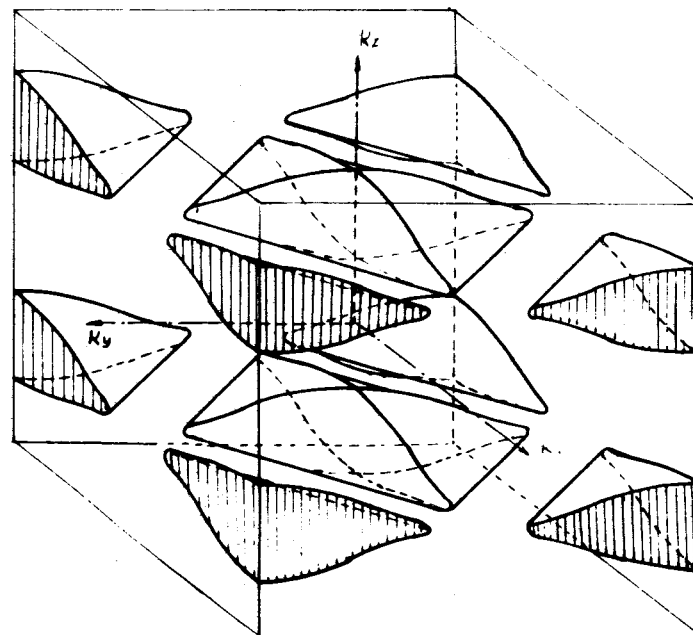


Рис. 5. Ферми-поверхность КВЭ в искаженном квазиодномерном одновалентном металле.

лическое или полупроводниковое состояние. Так как устойчивость кристаллической решетки одновалентного металла с энергетическим спектром /1/ при $\gamma \ll 1$ уже исследовалась в /9/ и /10/, фазовая диаграмма представлена на рис. 7/, то сейчас необходимо только выписать энергетический спектр КВЭ, находящихся в искаженной решетке:

$$\epsilon_{\mathbf{k}}^{\pm} = \frac{1}{2} [\epsilon_1(k_z) + \epsilon_1(k_z - \frac{\pi}{c})] + \gamma \epsilon_2(k_x, k_y) \pm \sqrt{\frac{1}{4} [\epsilon_1(k_z) - \epsilon_1(k_z - \frac{\pi}{c})]^2 + |k_z|V|k_z - \frac{\pi}{c}|^2} \quad /2/$$

Матричный элемент потенциала деформации $\langle k_z | V | k_z - \frac{\pi}{c} \rangle$ связывает состояния (K_x, K_y, K_z) с состоя-

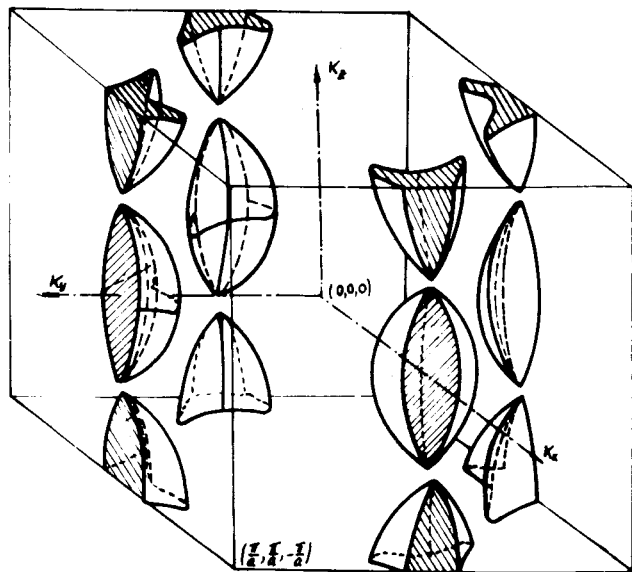


Рис. 6. Ферми-поверхность КВЭ в искаженном квазидвухмерном одновалентном металле.

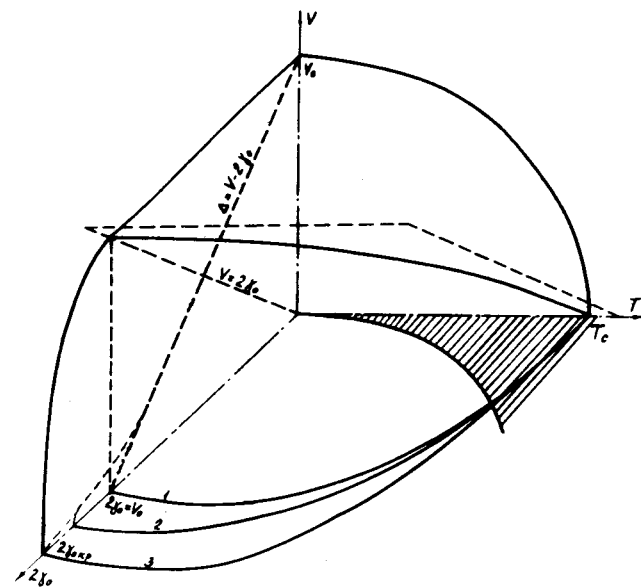


Рис. 7. Фазовая диаграмма квазиодномерного одновалентного металла.

ниями $(K_x, K_y, K_z - \frac{\pi}{c})$. Предполагается, что эта модель применима при исследовании интерметаллических соединений типа A_3B .

В интерметаллических соединениях типа A_3B со структурой В ПСП переводит решетку ионов типа AB_5 из кубической структуры в тетрагональную. Искажение снимает трехкратное вырождение уровней взаимно перпендикулярных систем цепочек, что приводит к перераспределению КВЭ по квазиодномерным взаимно перпендикулярным системам. Поэтому число КВЭ, находящихся в зонах проводимости металла с нормальным периодом решетки атомов А, отлично от 1. Действительно, в пределах элементарной ячейки возможны смещения атомов четырех типов, соответствующие неприводимым представлениям кубической группы $\Gamma_{25(-)}$, $\Gamma_{15(-)}$, $\Gamma_{12(+)}$ и $\Gamma_{15(+)}$ /рис. 8/. Нейтронографические исследования монокристалла Nb_3Sn , проведенные Ши-

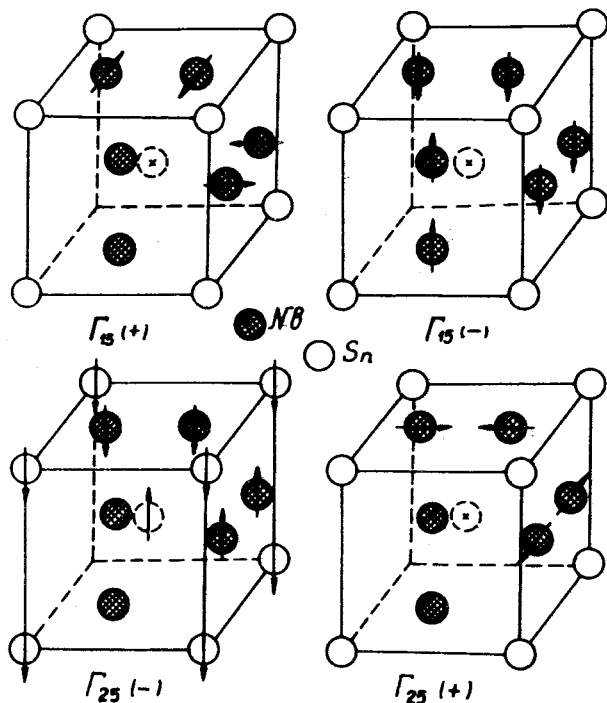


Рис. 8. Возможные смещения атомов типа А в интерметаллических соединениях типа A_3B .

ране и Аксом /13/, показывают, что ниже T_p возникают смещения атомов друг относительно друга, соответствующие представлению $\Gamma_{12(+)}$. Замечательно, что зависимость смещения атомов Nb от температуры $\delta(T)$ в точности соответствует температурной зависимости параметра тетрагональности $(\delta^2 - (\frac{a}{c} - 1)^2)$. Поэтому в полуметаллическом состоянии интерметаллических соединений A_3B с искаженной структурой, наверняка, число КВЭ в подзонах проводимости намного больше числа дырок в валентных подзонах. Такое предположение о распределении квазиэлектронов проводимости /КЭП/ по зонам дает право рассматривать эти соединения при переходе в сверхпроводящее состояние как сильно леги-

рованный n -полупроводник с плотностью КЭП $n^* > n_k = \frac{\pi}{3} \left[\frac{2m^*\omega_D}{\pi^2 \hbar} \right]^{3/2}$, т.е. с $\epsilon_F^* > \hbar\omega_D$, где ω_D - дебаевская частота решетки /14/. Поэтому здесь нельзя полностью применить выводы о зависимости энергетической выгоды ПСП от параметра гофрировки /рис.7/, сделанные в /10/.

4. Куперовский сверхпроводящий переход

Изотопический эффект в сверхпроводниках /15,16/ подтвердил предположение Фрелиха /17/ о том, что взаимодействие КЭП с полем колебаний решетки является причиной сверхпроводимости. Виртуальный обмен фононами между КЭП /один КЭП поляризует решетку, а другой КЭП взаимодействует с поляризацией /18, с.181/ /вызывает динамическое взаимодействие притяжения между ними с большой корреляцией во времени обмена. Учитывая только основные процессы рассеяния между КЭП, приводящие к максимальному изменению их энергетического спектра и понижению их термодинамического потенциала, из гамильтониана Фрелиха /19/ можно получить редуцированный гамильтониан БКШ /20, с.103/, /18, с.188/

$$H = \sum_k \epsilon_k^0 (a_k^+ a_k + a_{-k}^+ a_{-k}) + \sum_{kk'} W_{kk'} a_k^+ a_{-k}^+ a_{-k} a_k \quad /3/$$

В сверхпроводнике число сверхпроводящих КЭП не сохраняется, а сохраняется только среднее значение полного числа КВЭ

$$N = \sum_k (a_k^+ a_k + a_{-k}^+ a_{-k}) \quad /4/$$

Чтобы избавиться от необходимости учитывать постоянство среднего значения полного числа КВЭ $\langle N \rangle = N_0$ в явном виде, в соответствии с законами статистической физики /21/ необходимо минимизировать термодинамический потенциал $\Omega = H - \mu N - TS$. При $T=0^\circ K$ термо-

динамический потенциал Ω переходит в квазичастичный гамильтониан

$$\tilde{H} = \sum_k \xi_k (a_k^+ a_k + a_{-k}^+ a_{-k}) + \sum_{kk} W_{kk} a_k^+ a_{-k}^+ a_{-k} a_k. \quad /5/$$

В /5/ $\xi_k = \epsilon_k^0 - \mu$ обозначает квазичастичную энергию КЭП, а μ - химпотенциал КВЭ. Диагонализация квазичастичного гамильтониана /5/ методом Боголюбова /22/ - Валатина /23/ соответствует переходу к операторам

$$c_k^+ = u_k a_k^+ - v_k a_{-k}, \quad /6a/$$

$$c_{-k} = u_k a_{-k} + v_k a_k^+. \quad /6b/$$

Собственные значения операторов c_k^+ и c_{-k} определяются системой уравнений движения для a_k^+ и a_{-k} :

$$i\hbar \dot{a}_k^+ = -\xi_k a_k^+ - \sum W_{kk} a_k^+ a_{-k}^+ a_{-k}, \quad /7a/$$

$$i\hbar \dot{a}_{-k} = \xi_k a_{-k} - \sum W_{kk} a_k^+ a_{-k} a_k. \quad /7b/$$

после их линеаризации /18, с.196/. Параметры u_k и v_k - вещественные числа, связанные равенством $u_k^2 + v_k^2 = 1$, причем u_k - четная, а v_k - нечетная функция волнового вектора K . Линеаризация системы /7/ состоит в замене произведений операторов $a_k^+ a_{-k}^+$ и $a_{-k} a_k$ средними величинами $B_k^* = \langle N+1 | a_k^+ a_{-k}^+ | N-1 \rangle$ и $B_k = \langle N-1 | a_{-k} a_k | N+1 \rangle$ соответственно. Это соответствует разрыву цепочки уравнений для функции Грина /24/ в первом приближении. После введения обозначения

$$\Delta_k = -\sum W_{kk} B_k \quad /8/$$

система уравнений движения /7/ переписывается в виде

$$i\hbar \dot{a}_k^+ = -\xi_k a_k^+ + \Delta_k^* a_{-k}, \quad /9a/$$

$$i\hbar \dot{a}_{-k} = \xi_k a_{-k} + \Delta_k a_k^+. \quad /9b/$$

Система уравнений движения /9/ имеет решение экспоненциального типа, $a_k^+(t) = a_k^+(0) \exp(\frac{i\lambda_k t}{\hbar})$ и $a_{-k}(t) = a_{-k}(0) \exp(\frac{-i\lambda_k t}{\hbar})$, при условии, что $\lambda_k = \pm \sqrt{\xi_k^2 + \Delta_k^2}$. Знак λ_k соответствует знаку ξ_k . На рис. 9 представлены энергетические спектры сверхпроводящих КЭП $E_k = \mu + \lambda_k$ и нормальных КЭП ϵ_k^0 .

С помощью обратного преобразования

$$a_k^+ = u_k c_k^+ + v_k c_{-k}, \quad /10a/$$

$$a_{-k} = u_k c_{-k} - v_k c_k^+ \quad /10b/$$

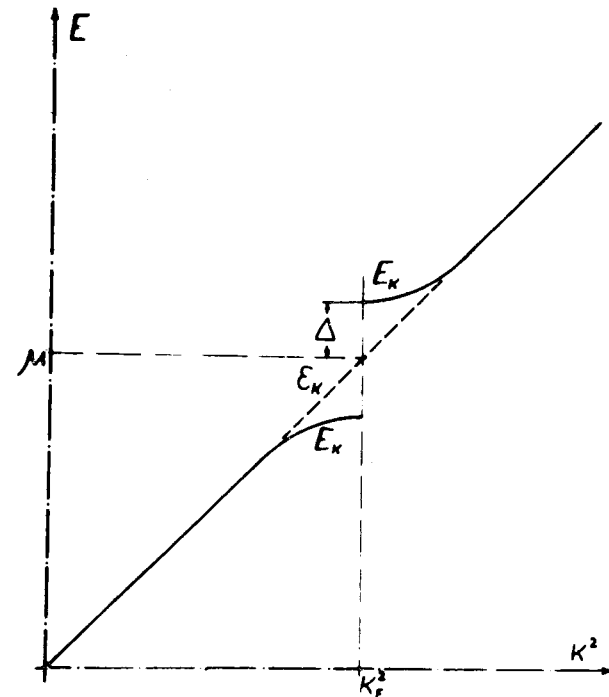


Рис. 9. Энергетические спектры сверхпроводящих E_k и нормальных ϵ_k^0 КЭП.

после усреднения получаются следующие соотношения:

$$n_k = u_k^2 f_k + v_k^2 (1 - f_{-k}), \quad /11/$$

$$B_k = u_k v_k (1 - f_k - f_{-k}), \quad /12/$$

$$\Delta_k = \sum_{k\kappa} W_{k\kappa} u_{\kappa} v_{\kappa} (1 - f_{\kappa} - f_{-\kappa}), \quad /13/$$

где $n_k = \langle a_k^+ a_k \rangle$ и $f_k = \langle c_k^+ c_k \rangle$. Выбор параметров преобразования u_k и v_k в виде

$$u_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_k}{\lambda_k} \right); \quad v_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_k}{\lambda_k} \right) \quad /14/$$

минимизирует полную квазичастичную энергию

$$\tilde{E} = \sum 2\xi_k u_k^2 f_k + \sum 2\xi_k v_k^2 (1 - f_k) - \sum \frac{\Delta_k^2 (1 - 2f_k)}{2\lambda_k}. \quad /15/$$

Функция занятости сверхпроводящих состояний КЭП

$$f_k = \{ \exp(\beta\lambda_k) + 1 \}^{-1} \quad /16/$$

минимизирует термодинамический потенциал $\Omega = N - \mu N - TS$.

Из /11/ следует, что в сверхпроводнике КЭП находятся в двух состояниях: в упорядоченном сверхпроводящем состоянии куперонов $u_k^2 f_k$ с энергетическим спектром $E_k = \mu + \lambda_k$ и в нормальном состоянии боголонов $v_k^2 (1 - f_k)$ с энергетическим спектром ϵ_k . Полная квазичастичная энергия невзаимодействующих между собой куперонов и боголонов

$$\tilde{E}_{k\delta} = \sum 2\lambda_k u_k^2 f_k + \sum 2\xi_k v_k^2 (1 - f_k) \quad /17/$$

отличается от /15/ изменением энергии нулевых колебаний решетки

$$\tilde{E} - \tilde{E}_{k\delta} = - \frac{N(\mu)\Delta^2}{2} \left(\frac{\hbar\omega_D}{\mu} \right). \quad /18/$$

С помощью /13/, /14/ и /16/ получаем уравнение для самосогласованного определения величины куперовской щели

$$\Delta_k = - \sum W_{k\kappa} \frac{\Delta_{\kappa}}{2\lambda_{\kappa}} \operatorname{th} \left(\frac{\beta\lambda_{\kappa}}{2} \right). \quad /19/$$

Подстановкой /14/ и /16/ в /11/ получаем квазиимпульсное распределение КЭП в сверхпроводнике /т.е. в К-пространстве/

$$n_k = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{\xi_k}{\lambda_k} \operatorname{th} \left(\frac{\beta\lambda_k}{2} \right) \right]. \quad /20/$$

На рис. 10 представлено распределение КВЭ в К-пространстве, а на рис. 11 - распределение КВЭ по

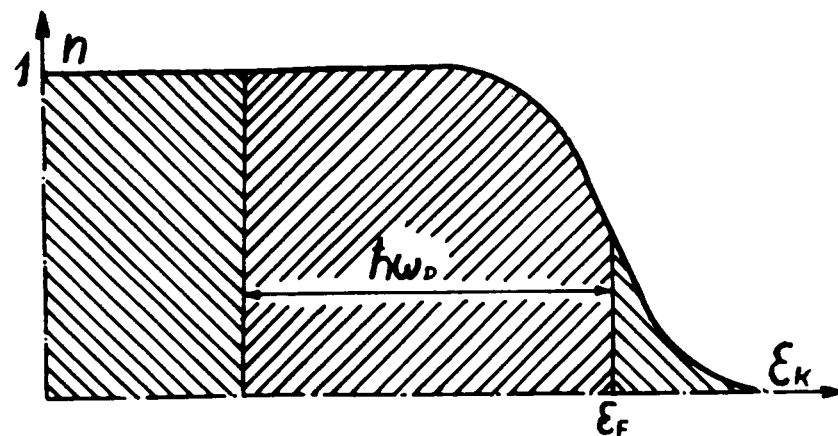


Рис. 10. Распределение сверхпроводящих и нормальных КЭП в К-пространстве при $T = 0^\circ\text{K}$.

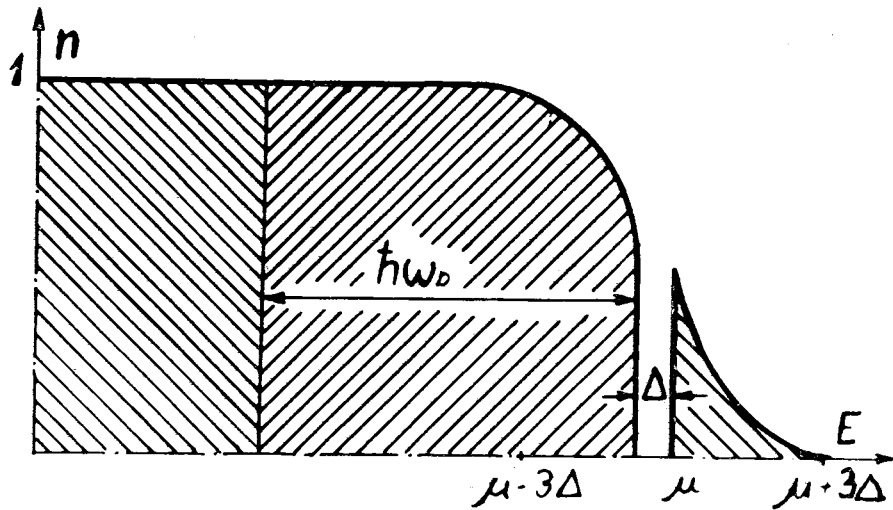


Рис. 11. Распределение сверхпроводящих и нормальных КЭП по энергии при $T = 0^\circ\text{K}$.

энергии в сверхпроводнике при $T=0^\circ\text{K}$. С помощью формул /11/, /14/ и /16/ находим, что число нормальных КЭП

$$N(\mu) \int_0^{\hbar\omega_D} \left(1 - \frac{x}{\sqrt{x^2 + \Delta^2}}\right) [1 - f(\sqrt{x^2 + \Delta^2}) + 1 - f(-\sqrt{x^2 + \Delta^2})] dx = N(\mu)\Delta \quad /21a/$$

и число сверхпроводящих КЭП

$$N(\mu) \int_0^{\hbar\omega_D} \left(1 + \frac{x}{\sqrt{x^2 + \Delta^2}}\right) [f(\sqrt{x^2 + \Delta^2}) + f(-\sqrt{x^2 + \Delta^2})] dx = N(\mu)[2\hbar\omega_0 - \Delta] \quad /21б/$$

определяется температурной зависимостью куперовской щели /19/. Конечно, распределения нормальных КЭП $v_k^2(1-f_k)$ и сверхпроводящих КЭП $u_k^2 f_k$, в свою очередь, определяются температурными зависимостями функций числа заполнения f_k и куперовской щели Δ .

Сохранение среднего значения полного числа КВЭ определяет следующую зависимость химпотенциала КВЭ μ от куперовской щели Δ :

$$\sqrt{\mu^3} = \sqrt{\mu^3} + \frac{3}{8} \frac{(\hbar\omega_D)^2}{\sqrt{\mu}} [1 - \sqrt{1 + \alpha^2} + \alpha^2 \ln\left\{\frac{1 + \sqrt{1 + \alpha^2}}{\alpha}\right\}],$$

где $\alpha = \Delta / \hbar\omega_D$.

/22/

5. Выводы

Исследование в отдельности влияния КВЭ на формирование и устойчивость кристаллической решетки металла относительно ПСП и неустойчивость КЭП относительно перехода металла из нормального в сверхпроводящее состояние показывает следующее.

А. В зависимости от энергетического спектра и плотности КВЭ искаженная структура металла может оказаться энергетически выгоднее неискаженной вследствие вызванного понижением симметрии кристаллического потенциала изменения энергетического спектра КВЭ. Искажение решетки может увеличить ее период или только изменить симметрию ее элементарной ячейки, изменяя один из ее параметров. Энергетическая выгода искаженной структуры максимальна в случае максимальной асимметрии распределения КЭП относительно границ ее зон Бриллюэна, и поэтому равновесное значение параметра деформации сильно зависит от относительного расположения ФП КВЭ и вводимых искажением решетки граней новых зон Бриллюэна. Чем ближе проходит ФП КВЭ мимо плоскостей разрыва энергии и чем больше плоских участков на ФП КВЭ, тем энергетически выгоднее искажение и больше параметр равновесной деформации. Температура размывает границу энергетического распределения КЭП и, уменьшая асимметрию в их распределении относительно плоскости разрыва энер-

гии, уменьшает энергетическую выгодность искаженной структуры, что приводит к уменьшению параметра равновесной деформации.

Б. Из-за принципа Паули виртуальный обмен фононами между КЭП ограничен в малом энергетическом интервале около уровня Ферми. Виртуальный обмен фононами вызывает сильную корреляцию и динамическое притяжение между КЭП. Динамическое притяжение вводит куперовскую щель между спектрами куперонов и боголонов, причем имеет место полупроводниковая модель энергетического спектра сверхпроводящих КЭП /25, 26, 27/. Температура перехода металла из нормального в сверхпроводящее состояние обычно определяется моментом возникновения куперовской щели. Сильная корреляция между КЭП в сверхпроводнике вместе с куперовской щелью, препятствуя малым изменениям полного момента количества движения, обеспечивает его бесконечную проводимость при постоянном токе /28, 29/. Хотя существует сильная корреляция между КЭП во время виртуального обмена фононами, спаривание КЭП нельзя понимать в прямом смысле этого слова. Только для виртуального обмена фононами необходим одновременный переход двух куперонов в боголоны и наоборот. Энергетический порог перехода куперонов и боголонов в два раза больше ширины куперовской щели между их энергетическими спектрами.

В. Сильное электрон-решеточное взаимодействие является необходимым условием для обеспечения энергетической выгоды обоих переходов. Поэтому оба перехода должны встречаться там, где сильное электрон-фононное взаимодействие может обеспечить интенсивное притяжение между КЭП и чувствительное изменение их энергетического спектра при понижении симметрии кристаллического потенциала искажением решетки.

6. Сверхпроводящее состояние пайерлсовского полуметалла

Сверхпроводящее состояние пайерлсовского полуметалла можно описать двумя способами. Можно диагона-

лизовать гамильтониан, учитывая одновременно влияние брэгговского отражения искаженной решетки и куперовского спаривания в сверхпроводнике /30, 31, 32/. Возможно также учесть сначала только изменение энергетического спектра КВЭ при ПСП, а потом учесть виртуальный обмен фононами. Так как оба взаимодействия независимы, то формально конечные результаты совпадают. Поэтому, следуя за экспериментом, мы опишем последовательно оба перехода. С физической точки зрения это более правильно, так как можно более точно учесть влияние ПСП на энергетические спектры КВЭ и фононов, а также и на константу электрон-фононного взаимодействия.

Изменением взаимного расположения ФП КВЭ и грани зон Бриллюэна искажение решетки сильно увеличивает константу электрон-фононного взаимодействия. Изменение фононного спектра увеличивает число энергетических ветвей колебаний, что изменяет существенным образом число фононов, участвующих в процессах рассеяния КЭП и виртуальном обмене. Так как оптические колебания экранируются слабее акустических, то искажение не только повышает верхнюю границу участвующих в виртуальном обмене фононов, но увеличивает эффективность и интенсивность динамического взаимодействия. Если для акустических колебаний интервал энергии, для которого выполняется неравенство $\hbar\omega_q > |\epsilon_k - \epsilon_{k+q}|$, суживается с уменьшением волнового вектора q , то для оптических колебаний, наоборот, слегка увеличивается. Усиление неравенства $\hbar\omega_q > |\epsilon_k - \epsilon_{k+q}|$ для оптических колебаний приводит к усилению динамического притяжения между КЭП при виртуальном обмене фононами. Кроме того, при сближении ФП КВЭ с границами зон Бриллюэна /26, с. 258/ понижается нижняя граница волновых векторов фононов, участвующих в процессах переброса. Так как процессы переброса обеспечивают 3/4 электрического сопротивления, то, наверняка, их полное включение в виртуальные обмены тоже усиливает интенсивность динамического притяжения между КЭП.

Изложенные физические соображения показывают, что имеются веские причины, ради которых необходимо

учитывать все последствия ПСП при совместном решении уравнений, определяющие равновесные значения параметра деформации и куперовской щели.

Итак, в нормальном металле с неискаженной решеткой поведение КВЭ и фононов описывается гамильтонианом Фрелиха

$$H = \sum_k \epsilon_k^0 a_k^+ a_k + \sum_q \hbar \omega_q b_q^+ b_q + \sum_q V_q a_{k+q}^+ a_k a_{k-q} + \sum_q g_q a_{k+q}^+ a_k (b_q + b_{-q}^+). \quad /23/$$

Третий член в /23/ описывает кулоновское электрон-электронное взаимодействие, а четвертый - электрон-фононное взаимодействие. Предполагаем, что экранировка учтена в приближении хаотических фаз и поэтому влияние третьего члена в /23/ слабо сказывается на исследуемых процессах. При ПСП колебание решетки, относительно которого симметричная структура проявляет неустойчивость, переходит в статическое искажение. Это соответствует переходу операторов рождения $b_{q_0}^+$ и уничтожения b_{q_0} этого колебания в С-числа. Таким образом, получается матричный элемент потенциала деформации

$$W_{q_0} = g_{q_0} (\langle b_{q_0} \rangle + \langle b_{q_0}^+ \rangle), \quad /24/$$

связывающий соответствующие энергетические ветви ϵ_k^0 и $\epsilon_{k+q_0}^0$. Поведение КВЭ и фононов в искаженном пайерлсовском полуметалле описывается гамильтонианом

$$H = \sum_k \epsilon_k^\pm A_k A_k^+ + \sum_q \hbar \Omega_q^\pm B_q^+ B_q + \sum_q \tilde{V}_q A_{k+q}^+ A_k A_{k-q} + \sum_q G_q A_{k+q}^+ A_k (B_q + B_{-q}^+). \quad /25/$$

В /25/ приняты следующие обозначения для энергии КВЭ:

$$\epsilon_k^\pm = \frac{\epsilon_k^0 + \epsilon_{k+q_0}^0}{2} \pm \sqrt{\left[\frac{\epsilon_k^0 - \epsilon_{k+q_0}^0}{2} \right]^2 + |W_{q_0}|^2}, \quad /26/$$

и для частоты фононов ^{/32/}:

$$[\Omega_q^\pm]^2 = \frac{\omega_q^2 + \omega_{q+q_0}^2}{2} \pm \sqrt{\left[\frac{\omega_q^2 - \omega_{q+q_0}^2}{2} \right]^2 + |\Sigma_{q_0}|^2}. \quad /27/$$

Итак, в искаженном полуметалле КВЭ и фононы имеют новые энергетические спектры ϵ_k^\pm и Ω_q^\pm и новые операторы рождения и уничтожения A_k^+, A_k, B_q^+ и B_q соответственно. В соответствии со сказанным выше изменилась и константа электрон-фононного взаимодействия G_q . После соответствующих преобразований /25/ можно получить редуцированный гамильтониан БКШ с квазичастичной энергией $\nu_k = \epsilon_k^\pm - \mu$. Квазичастичная энергия сверхпроводящих КЭП в пайерлсовском полуметалле

$$\eta_k = \pm \sqrt{\nu_k^2 + \Delta_k^2} \quad /28/$$

определяет новые параметры унитарного преобразования Боголюбова-Валатина

$$\tilde{u}_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\nu_k}{\eta_k} \right); \quad \tilde{v}_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\nu_k}{\eta_k} \right). \quad /29/$$

Полная квазичастичная энергия и термодинамический потенциал КВЭ при учете $\frac{\Delta_k^2}{2\eta_k}$ -члена, описывающий изменения полной энергии нулевых колебаний, описываются формулами

$$\tilde{E} = \sum_k 2\eta_k \tilde{u}_k^2 \tilde{f}_k + \sum_k 2\nu_k \tilde{v}_k^2 (1 - \tilde{f}_k) - \sum_k \frac{\Delta_k^2}{2\eta_k}, \quad /30/$$

$$\tilde{\Omega} = \sum (\nu_k + \eta_k) + \sum \frac{\Delta_k^2 (1 - 2f_k)}{2\eta_k} + \frac{2}{\beta} \sum \ln f_k. \quad /31/$$

Равновесное значение куперовской щели определяется самосогласованным образом с помощью уравнения

$$\Delta_k = - \sum_l \tilde{W}_{\kappa k} \frac{\Delta_k}{2\eta_k} \operatorname{th}\left(\frac{\beta\eta_k}{2}\right). \quad /32/$$

Из /31/ легко получить разность между термодинамическими потенциалами сверхпроводящего $\Omega(W, \Delta)$ и нормального состояния $\Omega(W, 0)$ пайерлсовского полуметалла

$$\begin{aligned} \Omega(W, \Delta) - \Omega(W, 0) = & \sum (|\nu_k| - |\eta_k|) + \sum \frac{\Delta_k^2}{2\eta_k} \operatorname{th}\left(\frac{\beta\eta_k}{2}\right) + \\ & + \frac{2}{\beta} \sum \ln \left\{ \frac{1 + e^{-\beta|\nu_k|}}{1 + e^{-\beta|\eta_k|}} \right\}. \end{aligned} \quad /33/$$

Из /33/ видно, что при $T=0^\circ\text{K}$ сверхпроводящее состояние может оказаться энергетически выгоднее нормального, т.е. переход пайерлсовского полуметалла из нормального в сверхпроводящее состояние может оказаться энергетически выгоднее и произойти при определенной температуре T_c . Все зависит от существования ненулевого решения $\Delta \neq 0$ самосогласованного уравнения /32/.

До сих пор пренебрегалось изменением константы электрон-фононного взаимодействия g_q и силы динамического притяжения $W_{\kappa k}$. Поэтому исходя из /32/ утверждалось, что ПСП понижает T_c ($T_c^p < T_c^o$). Однако из сказанного выше следует, что ПСП сильно увеличивает силу динамического притяжения, которая экспоненциальным образом увеличивает ширину общей щели $R = \sqrt{W^2 + \Delta^2}$. Так как сила динамической корреляции увеличивает экс-

поненциально общую щель R , а пайерлсовская щель W уменьшает куперовскую щель Δ вычетом $\Delta^2 = R^2 - W^2$, то можно надеяться, что ПСП улучшит сверхпроводящие свойства интерметаллических соединений типа A_3B со структурой $A15$.

Искажение увеличением периода решетки увеличивает упругую энергию металла, изменение которой можно представить в виде

$$\delta E_{уп} = A \frac{W^2}{2}. \quad /34/$$

Параметр равновесной деформации минимизирует сумму изменения упругой энергии решетки /34/ и термодинамического потенциала КВЭ /33/. После дифференцирования /31/ и /34/ по W получаем

$$W \left\{ A + \sum \frac{1}{W} \frac{\partial \nu_k}{\partial W} - \sum \frac{\nu_k}{W\eta_k} \frac{\partial \nu_k}{\partial W} \operatorname{th}\left(\frac{\beta\eta_k}{2}\right) \right\} = 0. \quad /35/$$

Вклад второго члена в /35/ очень мал, так как $\frac{\partial \nu_k}{\partial W}$ меняет знак при переходе через ФП КВЭ. В приближении постоянной плотности состояний им пренебрегается.

Однако множитель $\frac{\nu_k}{W} \frac{\partial \nu_k}{\partial W}$ в третьем члене

только в случае $\epsilon_{k+q_0}^o = -\epsilon_k^o$ принимает значение 1. Поэтому только в этом приближении уравнение /35/ переходит в уравнение, формально совпадающее с /32/:

$$W \left\{ A - \sum \frac{1}{\eta_k} \operatorname{th}\left(\frac{\beta\eta_k}{2}\right) \right\} = 0. \quad /36/$$

Отличие /35/ от /36/ приводит к изменению температурной зависимости пайерлсовской щели W от температурной зависимости куперовской щели Δ . Самый простой расчет показывает, что с ростом T ширина пайерлсовской щели W убывает быстрее ширины куперовской щели Δ . Для случая $T_p > T_c$ это различие показано на рис. 12.

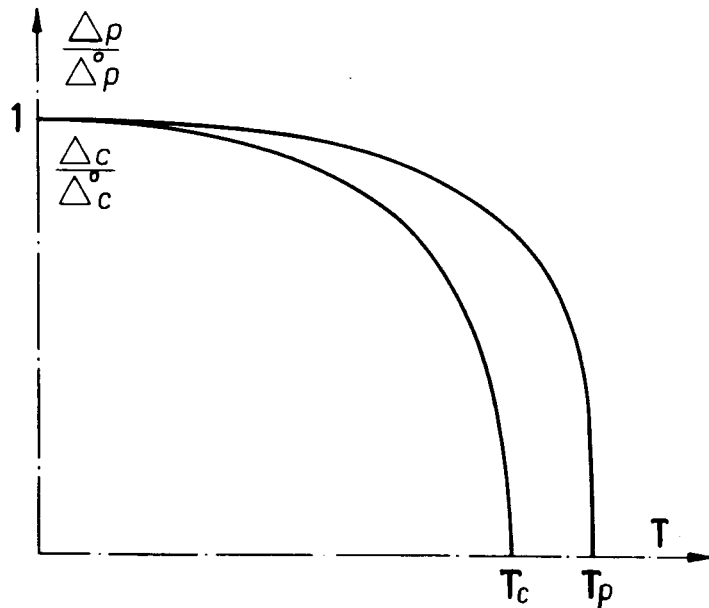


Рис. 12. Температурные зависимости пайерлсовской W и куперовской Δ щелей.

Так как суммирование Σ_1 в /32/ происходит только в области, где $\Delta \neq 0$ /33,34/, а суммирование Σ в /36/ происходит по всей зоне, то уравнение /36/ можно представить в виде

$$W \left\{ A - \Sigma_1 \frac{1}{\eta_k} \text{th} \left(\frac{\beta \eta_k}{2} \right) - \Sigma_2 \frac{1}{\nu_k} \text{th} \left(\frac{\beta \nu_k}{2} \right) \right\} = 0. \quad /37/$$

В /37/ суммирование Σ_2 производится по остальной части зоны, где $\Delta = 0$. Так как $T_c \ll \theta_D$, то в Σ_2 , где $\nu_k \geq \theta_D$, с экспоненциальной точностью можно заметить $\text{th} \left(\frac{\beta \nu_k}{2} \right)$ единицей. Комбинируя /37/ с /32/, получаем, что в сверхпроводящем состоянии величина пайерлсовской щели W не зависит от температуры. При

изменении температуры T меняется только ширина куперовской щели Δ между спектрами нормальных и сверхпроводящих КЭП. Отсюда следует, что сверхпроводимость останавливает развитие пайерлсовского искажения решетки. Поэтому при $T_c > T_p$ невозможен ПСП, что согласуется с экспериментальными данными.

7. Обсуждение полученных результатов

В сделанном приближении мы получили только оценку количественной зависимости сверхпроводящих параметров металла от ПСП. Так как только в одномерной модели можно провести все вычисления до конца /30, 31/, то при рассмотрении реальной трехмерной модели необходимо ограничиться только качественными исследованиями. На основе экспериментальных данных и изложенного выше начнем рассмотрение возможности существования сверхпроводящего состояния в пайерлсовском полуметалле при $T_p > T_c$. Как видно из сказанного, ПСП изменением энергетических спектров КВЭ и фононов может сильно изменять параметры электрон-фононного и динамического электрон-электронного взаимодействий. Улучшение сверхпроводящих свойств металла возможно только в случае, когда в пайерлсовском полуметалле плотность КЭП n^* превышает критическую плотность n_k . Если плотность n^* ниже n_k , то ПСП, с одной стороны, увеличивает силу динамического притяжения между виртуально обменивающимися фононами КЭП, но, с другой стороны, уменьшает число участвующих в этом обмене КЭП. Однако высокая плотность n^* уменьшает энергетическую выгодность ПСП, параметр равновесной деформации и температуру ПСП T_p . Плотность КЭП n^* в полуметалле зависит от величины параметра гофрировки ФП КВЭ γ и от ширины пайерлсовской щели W . Величина параметра деформации кристаллической решетки зависит от эластичных свойств металла, от параметра гофрировки γ и от температуры. Чем больше параметр гофрировки γ , тем меньше величина деформации и T_p . Жесткость кристаллической структуры тоже уменьшает равновесную

деформацию и T_p . Поэтому можно предположить, что только в металлах с низкой дебаевской температурой θ_D возможен структурный переход при наличии большой гофрировки ФП КВЭ, необходимой для обеспечения минимальной плотности КЭП n^* в проводящей подзоне искаженного полуметалла. Конечно, слишком мягкая кристаллическая решетка уже не годится, так как она должна иметь высокую T_p . А если T_p намного выше T_c , то это мешает развитию сверхпроводящего перехода, так как чем больше разность $T_p - T_c$, тем больше ширина пайерлсовской щели W в сверхпроводнике и тем меньше плотность КЭП n^* . Кроме того, T_c пропорциональна $\theta_D/k_0 T_c = 2\hbar\omega_D \exp(-1/N(\mu)V)$. Так как эластичные свойства решетки, с одной стороны, влияют на ПСП, а с другой - на КСП, то выходит, что, наверняка, существуют решетки, упругость которых обеспечивает малость параметра деформации W и T_p , а ее фононный спектр Ω_q^\pm - высокую T_c . Конечно, θ_D металла должна обеспечить неравенство $T_p > T_c$, которое необходимо для улучшения сверхпроводящих свойств металлов. Потому что увеличение силы динамического притяжения W_{kk} в два раза может в 10 раз повысить T_c .

Как видно из /37/, переход пайерлсовского полуметалла из нормального в сверхпроводящее состояние останавливает развитие ПСП. Поэтому если КСП прошел в металле, то ПСП уже энергетически невыгоден. Это подтверждается и экспериментом, где всегда наблюдалось $T_p > T_c$. Более того, так как только логарифмический член уменьшения полной энергии КВЭ компенсирует увеличение упругой энергии решетки при ПСП, то размытие верхней границы энергетического распределения КЭП виртуальным обменом фононами в связи с уменьшением энергетической выгодности искажения слабо сужает пайерлсовскую щель. На рис. 13 показаны изменения обеих щелей, Δ и $W^{3/4}$, причем изменение пайерлсовской щели определялось изменением тетрагональности $\delta(T)$ искаженной A15 структуры V_3S_i . Пунктирная линия определяет полную энергетическую щель $R = \sqrt{W^2 + \Delta^2}$, а сплошной линией представлено изменение пайерлсовской щели W .

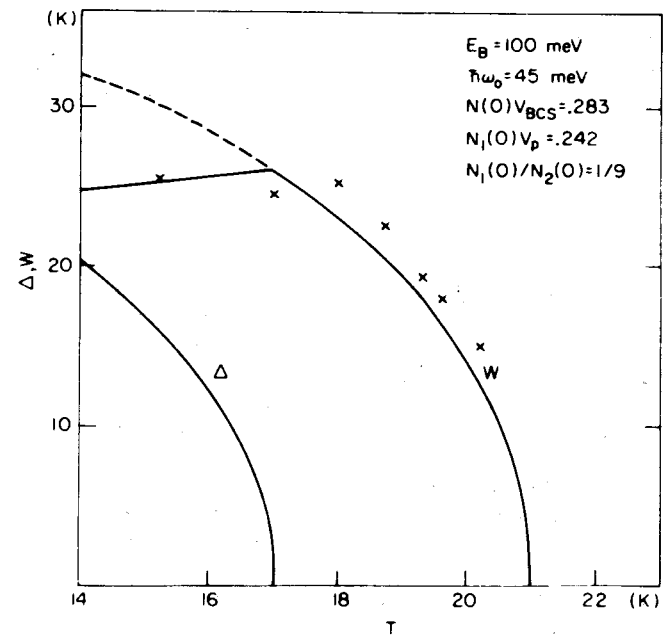


Рис. 13. Температурные зависимости энергетических щелей W , Δ и $R = \sqrt{W^2 + \Delta^2}$ для V_3S_i .

Настоящее изложение дает физическую картину ПСП и КСП в пайерлсовском полуметалле. Новое распределение КЭП по энергиям и новые энергетические спектры нормальных /боголонов/ и сверхпроводящих /куперонов/ КЭП более полно объясняют происходящие процессы. Качественные оценки физических причин усиления сверхпроводящих свойств металлов при ПСП дают возможность для их более полного количественного определения. Раскрывая механизм происходящих процессов, мы смогли учесть взаимное влияние обоих состояний. На основе качественных соображений можно утверждать, что пайерлсовские полуметаллы с низкой T_p должны иметь высокую T_c . Качественные соображения о взаимном влиянии ПСП и КСП показывают, что вследствие прямой связи T_c с θ_D и n^* , с одной стороны, и с T_p , с другой сто-

роны, как и связи T_p с θ_D и n^* при ПСП, имеется верхняя граница T_c , связанная с механическими свойствами кристаллической решетки, с энергетическим спектром, плотностью и взаимным расположением ФП КВЭ и границы зон Бриллюэна.

Литература

1. *Batterman В. W., Barret С. В. Phys. Rev. Lett., 1964, 13, p.390; Phys. Rev., 1966, 145, p.296.*
2. Изюмов Ю. А., Курмаев Э. З. УФН, 1974, 113, 193.
3. *Testardi L. R. Rev. Mod. Phys., 1975, 47, p.637.*
4. Булаевский Л. Н. УФН, 1975, 115, 263.
5. *Little W. A. Phys. Rev., 1964, 134A, p.1416.*
6. Пайерлс Р. Квантовая теория твердых тел, ИЛ, Москва, 1956, с. 130.
7. *Cooper L. N. Phys. Rev., 1956, 104, p.1189.*
8. *Anderson P. W., Blount E. J. Phys. Rev. Lett., 1965, 14, p.217.*
9. Архипов Р. Г., Рангелов Й. М. ФТТ, 1970, 12, 3413.
10. Рангелов Й. М. ФТТ, 1972, 14, 364.
11. *Clogston A. M., Jaccarino V. Phys. Rev., 1961, 121, p.1357.*
12. *Labbe J., Friedel J. J. Phys. et Radium, 1966, 27, p.153.*
13. *Shirane G., Axe J. D. Phys. Rev., 1971, 4B, p.1957.*
14. Козн М. и др. Сверхпроводимость полупроводников и переходных металлов. Мир, Москва, 1972, с. 60.
15. *Maxwell E. Phys. Rev., 1950, 78, p.477.*
16. *Reynolds С. А. e. a. Phys. Rev., 1950, 78, p.487.*
17. *Frohlich H. Phys. Rev., 1950, 79, p.845.*
Теория сверхпроводимости. ИЛ, Москва, 1960, с. 11.
18. Киттель Ч. Квантовая теория твердых тел. Наука, Москва, 1967.
19. *Frohlich H. Proc. Roy. Soc., 1952, A215, p.291.*
Теория сверхпроводимости. ИЛ, Москва, 1960, с. 37.
20. *Bardeen J., Schriffer J., Cooper L. N. Phys. Rev., 1957, 108, p.1175.*
Теория сверхпроводимости. ИЛ, Москва, 1960, с. 11.
21. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. Наука, Москва, 1964, с. 92.
22. Боголюбов Н. Н. ЖЭТФ, 1958, 34, 58, 73;
Nuovo Cimento, 1958, 7, p.794.

23. *Valatin J. G. Nuovo Cimento, 1958, 7, p.843.*
24. Горьков Л. П. ЖЭТФ, 1958, 34, 735.
25. Солимар Л. Туннельный эффект в сверхпроводниках и его применение. Мир, Москва, 1974, с. 25.
26. Займан Дж. Принципы теории твердого тела. Мир, Москва, 1966, с. 394.
27. *Lundqvist S., Cleason T. Physica Scripta, 1974, 10, p.5.*
28. Роуз-Инс А., Родерик Е. Введение в физику сверхпроводимости. Мир, Москва, 1972, с. 172.
29. Блейкмор Дж. Физика твердого состояния. Металлургия, Москва, 1972, с. 315.
30. Горьков Л. П., Бычков Ю. А., Дзялошинский И. Е. ЖЭТФ, 1966, 50, 738.
31. *Levin K., Gunningham S. L., Mills D. L. Phys. Rev., 1974, 10B, p.3821.*
32. Копаев Ю. В., Тиммеров Р. Х. ЖЭТФ, 1972, 63, 290.
33. Бранков Й. Г., Тончев Н. С. ОИЯИ, Р4-8150, Дубна, 1974;
Physica, 1976, 84A, p.371.
34. *Griff Bilbro, Millan W. L. Phys. Rev., 1976, 14B, p.1887.*

Рукопись поступила в издательский отдел
13 апреля 1977 года.