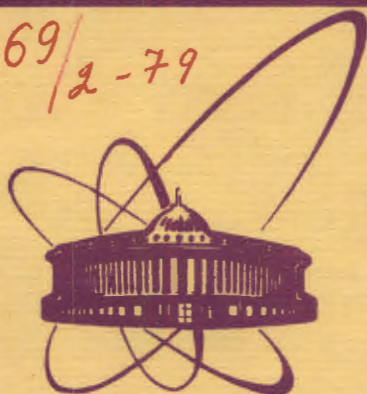


4869/2-79



е
объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

B-884

3/12-79

P17 - 12561

Г.М.Вуйичич, В.Л.Аксенов, Н.М.Плакида,
С.Стаменкович

О РОЛИ КВАЗИЛОКАЛЬНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ
В РЕШЕТКЕ СВЕРХПРОВОДНИКОВ
С ВЫСОКОЙ T_c

1979

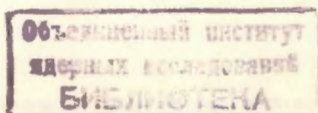
P17 - 12561

Г.М.Вуйичич, В.Л.Аксенов, Н.М.Плакида,
С.Стаменкович *

О РОЛИ КВАЗИЛОКАЛЬНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ
В РЕШЕТКЕ СВЕРХПРОВОДНИКОВ
С ВЫСОКОЙ T_c

Направлено в "Physics Letters" A

* Институт ядерных наук им. Б.Кидрича, Белград, СФРЮ



Вуйичич Г.М. и др.

P17 - 12561

О роли квазилокальных возбуждений в решетке сверхпроводников с высокой T_c

Получена новая формула для температуры сверхпроводящего перехода T_c , в которой помимо электрон-фононного учтено также взаимодействие электронов с квазилокальными возбуждениями в структурно неустойчивой решетке. Показано, что последнее взаимодействие значительно увеличивает эффективную константу электрон-электронного притяжения λ и повышает T_c .

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований, Дубна 1979

Vujić G.M. et al.

P17 - 12561

On the Role of Quasilocal Excitations in the Lattice of High- T_c Superconductors

A new formula is derived for the superconducting transition temperature T_c which takes into account both electron-phonon and electron-quasilocal excitations interactions in a structurally unstable lattice. The latter results in a considerable enhancement of the coupling constant λ and T_c .

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1979

Наиболее высокие температуры сверхпроводящего перехода T_c наблюдаются в веществах, обладающих структурной неустойчивостью /1/. Помимо специфических электронных свойств, для этих веществ характерны эффекты сильного ангармонизма, которые, по-видимому, обусловлены квазилокальными возбуждениями при туннельных переходах неустойчивой группы атомов в решетке /2/. Поскольку мягкие фононы ($\omega_q \sim T_c$) существенно не влияют на T_c /3,5/, представляет интерес изучить роль квазилокальных возбуждений в решетке при вычислении T_c /2/. В настоящей работе получены уравнения типа уравнений Элиашберга для сверхпроводника с учетом этих возбуждений и показано, что они значительно увеличивают константу связи λ по сравнению с электрон-фононным взаимодействием, что при определенных условиях приводит к повышению T_c .

Рассмотрим модель сверхпроводника с гамильтонианом:

$$H = H_e + H_{ph} + H_{e-ph} + H_s + H_{s-e} \quad /1/$$

где помимо взаимодействия H_{e-ph} электронов (H_e) с фононами (H_{ph}) учтено взаимодействие H_{e-s} электронов с квазилокальными возбуждениями (H_s). Предполагая для простоты наличие только двух уровней в элементарной ячейке, которые описываются симметричной (ψ_s) и антисимметричной (ψ_a) волновыми функциями, гамильтониан квазилокальных возбуждений в псевдоспиновом представлении запишем в виде:

$$H_s = -\Omega \sum_i S_i^z - \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} S_i^x S_j^x \quad /2/$$

где $\Omega = E_a - E_s > 0$ - разность энергий состояний ψ_a и ψ_s ,

J_{ij} - эффективное взаимодействие /включая обмен фононами/ локальных возбуждений в узлах решетки i, j , S_i^a - оператор квазиспина ($S=1/2$). Вводя локальную координату x_i для описания дисторсии элементарной ячейки при локальных возбуждениях в /2/, потенциал взаимодействия электрона с координатой \vec{r} с решеткой представим в виде:

$$\sum_i U(\vec{\ell}_i - \vec{x}_i + \vec{r}).$$

где $\vec{\ell}_i$ - узел решетки. Тогда при учете только линейных по x_i членов в разложении потенциала U_s в псевдоспиновом представлении /2/ получаем

$$H_{e-s} = \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} \sum_q V_s(\vec{p}, \vec{p}') a_{\vec{p}\sigma}^\dagger a_{\vec{p}'\sigma} S_q^x. \quad /3/$$

где приняты обычные обозначения и введен матричный элемент:

$$V_s(\vec{p}, \vec{p}') = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{ia} e^{iq\vec{\ell}_i} \langle p | V_r^a U_s(\vec{\ell}_i + \vec{r}) | p' \rangle 2x_{sa}^a, \quad /4/$$

где $x_{sa}^a = \langle \psi_a | x_i^a | \psi_a \rangle$.

Учитывая оба типа взаимодействий, H_{e-ph} и H_{e-s} в /1/, /дополнительный учет кулоновского взаимодействия H_{e-e} существенно не усложняет расчетов/, получаем систему уравнений типа Элиашберга для матричной функции Грина электронов. Вклад в массовый оператор, обусловленный H_{e-s} /3/, без учета перенормировки вершины, определяется спектральной плотностью:

$$S_s(\omega) = a_s^2 F_s(\omega) = \frac{1}{N(0)} \int \frac{d^2p}{v_p} \int \frac{d^2p'}{v_{p'}} |V_s(\vec{p}, \vec{p}')|^2 \chi_s(q, \omega), \quad /5/$$

где использованы обычные обозначения и введена спектральная плотность запаздывающей функции Грина /5/:

$$\chi_s(q, \omega) = \frac{1}{\pi} \text{Im} \int \frac{S_q^x S_q^x}{\omega + i\epsilon}$$

При этом эффективная константа связи λ_s принимает выражение:

$$\lambda_s = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\omega} S_s(\omega)}{N(0)} \frac{1}{v_p} \int \frac{d^2p}{v_p} \int \frac{d^2p'}{v_{p'}} |V_s(\vec{p}, \vec{p}')|^2 \frac{\Omega S^z}{E_q^2}, \quad /6/$$

где E_q - полюс статической восприимчивости:

$$\text{Re} \int \frac{S_q^x S_q^x}{\omega - 0} = \frac{\Omega S^z}{E_q^2} S^z S_i^z$$

В частности, в приближении случайных фаз для гамильтониана /2/ получаем:

$$E_q^2 = \Omega(\Omega - J(q)S^z) + (J(0) S_i^x)^2,$$

где $J(q)$ - фурье-образ J_{ij} .

Для оценки λ_s введем усредненный матричный элемент взаимодействия

$$J_s^2 = \frac{1}{(2x_{sa})^2} \frac{1}{N^2(0)} \int \frac{d^2p}{v_p} \int \frac{d^2p'}{v_{p'}} |V_s(\vec{p}, \vec{p}')|^2 \quad /7/$$

и усредненную частоту ω_s квазилокальных возбуждений:

$$\frac{1}{\omega_s^2} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\omega} S_s(\omega) \int_{-\infty}^{\infty} \omega d\omega S_s(\omega). \quad /8/$$

Следуя ⁷, получим оценку λ_s в виде:

$$\lambda_s = \frac{J_s^2 |2x_{sa}|^2 (\Omega S^z \omega_s^2)}{J_{ph}^2 (1 M \omega_q^2)} \frac{\Omega S^z}{\omega_s^2} \omega_D, \quad /9/$$

где было принято, что $J_s^2 = J_{ph}^2$, согласно определению /4/, и введена упругая энергия квазилокальных колебаний при дисторсии решетки $\gamma(2x_{sa})^2 - \omega_D$, где $\gamma = M \omega_q^2$. Для температур $T - T_c \ll \Omega - \omega_s$ получаем $S^z \approx 1/2$ и, следовательно, $\lambda_s \approx \lambda_{ph}$ при $\omega_s \approx \Omega - \omega_D$. Последнее неравенство выполняется для решетки с высокой степенью неустойчивости /2/.

На основе полученной системы уравнений для функций Грина была рассчитана температура сверхпроводящего перехода T_c . В стандартном приближении слабой связи ($T_c \ll \omega_s \approx \omega_D$) была получена формула:

$$T_c = 1.14 \omega_s \exp(-\frac{1}{\lambda}), \quad /10/$$

где эффективная константа связи λ /с учетом экранированного кулоновского отталкивания μ^* / имеет вид:

$$\lambda = \lambda_s + \frac{\lambda_{ph} - \mu^*}{1 - (\lambda_{ph} - \mu^*) \ln(\omega_D / \omega_s)}. \quad /11/$$

Как следует из /9/-/11/, учет квазилокальных возбуждений $\omega_s \sim \Omega \ll \omega_D$ приводит к значительному увеличению константы связи λ /"антиэкранирование" ($\lambda_{ph} - \mu^*$) в /11//, и, как следствие, к увеличению T_c относительно $T_c^{(0)}$, вычисленной при $\lambda_s = 0$. Например, при $\lambda_{ph} = 0,3$ и $\omega_D/\omega_s = 3$ получаем $\lambda = 1,14$ и $T_c/T_c^{(0)} = 27(\mu^* - 0,11)$.

Полученные результаты, по-видимому, позволяют объяснить резкое увеличение T_c для веществ, обладающих структурной неустойчивостью, например, напыленные пленки, соединения типа А-15, двух- и трех-компонентные сплавы /см.^{1,2/ и цитированную там литературу/. Сравнение развитой теории с экспериментом и обобщение формализма на случай неупорядоченных систем будет проведено в отдельной работе.}

Один из авторов /Н.П./ признателен проф. Ф.Аллену за полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Testardi L. *Rev.Mod.Phys.*, 1975, 47, p.637.
2. Ngai K.L., Reinecke T.L. *Phys.Rev.*, 1977, B16, p.1077.
3. Bergman G., Rainer D. *Zs. Phys.*, 1973, 263, p.59.
4. Каракозов А.Е., Максимов Е.Г., Машков С.А. *ЖЭТФ*, 1975, 68, с.1937.
5. Allen Ph., Dynes R.C., *Phys. Rev.*, 1975, B12, p.905.
6. Боголюбов Н.Н., Тябликов С.В. *Доклады АН СССР*, 1969, 126, с.53; Зубарев Д.Н. *УФН*, 1960, 71, с.71.
7. McMillan W.L. *Phys.Rev.*, 1968, 167, p.331.

Рукопись поступила в издательский отдел
19 июня 1979 года.