

сообщения  
Объединенного  
института  
ядерных  
исследований  
Дубна

5198/2-80

3/41-80

P17-80-438

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

КВАЗИЛОКАЛЬНЫЕ  
СТРУКТУРНЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ  
В РЕШЕТКЕ СВЕРХПРОВОДНИКОВ  
С ВЫСОКОЙ  $T_c$

---

\* Институт ядерных исследований им. Б. Кидрича,  
Белград, СФРЮ.

Вуйичич Г. и др.

P17-80-438

Квазилокальные структурные возбуждения  
в решетке сверхпроводников с высокой  $T_c$

Вычислена температура сверхпроводящего перехода  $T_c$  при учете взаимодействия электронов с квазилокальными структурными возбуждениями, которое может значительно повышать  $T_c$ , если структурный переход происходит при температуре более низкой, чем  $T_c$ .

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1980

Vujičić G. et al.

P17-80-438

QuasilocaI Structural Excitations in a Lattice  
of High- $T_c$  Superconductors

The superconducting transition temperature  $T_c$  is  
calculated by taking into account both electron-phonon

## ВВЕДЕНИЕ

Экспериментальное изучение сверхпроводников с наиболее высокой  $T_c$  показывает, что помимо специфических электронных эти соединения обладают рядом аномальных решеточных свойств: многие из них имеют структурные фазовые переходы /соединение типа A-15/, а сплавы характеризуются сосуществованием двух или более фаз ( $Nb_3Al_xGe_{1-x}$ ,  $Na_xWO_3$ ,  $K_xWO_3$ )<sup>/1-4/</sup>. Взаимосвязь структурной неустойчивости и высокой температуры  $T_c$  теоретически недостаточно выяснена<sup>/2,3/</sup>, и проблема определения характеристик вещества, влияющих на повышение  $T_c$ , остается актуальной. Одной из причин повышения  $T_c$  в сверхпроводниках со структурной неустойчивостью, как было показано в работе<sup>/5/</sup>, могут быть локальные структурные возбуждения /ЛСВ/. Они описывают переход неустойчивой при структурном превращении группы атомов между энергетически эквивалентными положениями равновесия, разделенными небольшим потенциальным барьером. Экспериментально ЛСВ могут наблюдаться как сильно ангармонические низколежащие возбуждения с частотой  $\Omega \ll \omega_D$  - характерной частоты фононов, обуславливая низкотемпературные аномалии термодинамических величин /теплоемкости и др./.

В работе<sup>/5/</sup> исследовались главным образом свойства решетки при наличии ЛСВ и качественно обсуждалась взаимосвязь структурной неустойчивости и сверхпроводимости.

Настоящая работа посвящена последовательному рассмотрению влияния взаимодействия ЛСВ с электронами на температуру сверхпроводящего перехода. Предложен новый вывод уравнений типа уравнений Элиашберга для сверхпроводника с учетом квазилокальных возбуждений типа ЛСВ. Показано, что взаимодействие ЛСВ с электронами при определенных условиях значительно увеличивает константу связи, что приводит к существенному повышению  $T_c$  /этот результат был опубликован ранее в нашей работе<sup>/6/</sup>/. При достаточно сильном взаимодействии между ЛСВ в системе возникает структурный переход, который приводит к ослаблению этого эффекта. В приближении слабой и промежуточной связи выполнены расчеты зависимости  $T_c$  от параметров модели. Результаты этих расчетов, приведенные в разделе 5, показывают роль различных характеристик модели в повышении  $T_c$ .

## 2. ГАМИЛЬТОНИАН МОДЕЛИ

Рассмотрим модель сверхпроводника, в котором структурная неустойчивость определяется локальными возбуждениями решетки. В простейшем приближении эти возбуждения описываются с помощью двухуровневой системы<sup>/5/</sup>, гамильтониан которой в псевдоспиновом ( $S=1/2$ ) представлении имеет вид модели Изинга в поперечном поле:

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

где  $\Omega = E_a - E_s > 0$  - разность энергий дублета, состояния которого описываются симметричной,  $\psi_s$ , и антисимметричной,  $\psi_a$ , волновыми функциями,  $J_{ij}$  - эффективное взаимодействие ЛСВ, которое в общем случае определяется как прямым взаимодействием, так и косвенным - через обмен фононами<sup>/7/</sup>. Рассмотрение взаимодействия возбуждений типа /1/ с решеткой хорошо известно /см., например, /7/ / и было проведено в работе<sup>/5/</sup>. Поэтому в дальнейшем мы будем полагать, что оно учтено с помощью эффективного взаимодействия  $J_{ij}$ .

В структурно-неустойчивой решетке для описания искажения элементарной ячейки при локальных возбуждениях удобно ввести локальную координату  $\vec{x}_i$ <sup>/8/</sup>. Потенциал взаимодействия электрона с координатой  $\vec{r}$  с решеткой представим в виде  $\sum U(\vec{\ell}_i + \vec{x}_i + \vec{r})$ , где  $\vec{\ell}_i$  - узел решетки. Разложение этого потенциала с учетом только линейных по  $\vec{x}_i$  членов приводит к взаимодействию электронов с ЛСВ в виде,

$$H_{e-s} = \sum_{p-p'=q} V_s(p, p') \Psi_p^+ \tau_3 \Psi_{p'} S_q^x, \quad /2/$$

где использовано псевдоспиновое представление /1/, в котором матричный элемент

$$V_s(p, p') = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{ia} e^{iq\vec{\ell}_i} \langle p | \nabla_{\vec{r}}^a U_s(\vec{\ell}_i + \vec{x}_i) | p' \rangle 2x_{sa}^a, \quad /3/$$

где  $x_{sa}^a = \langle \psi_s | x_i^a | \psi_a \rangle$ . В /2/ операторы рождения,  $a_{p\sigma}^+$ , и уничтожения,  $a_{p\sigma}$ , электронов записаны с помощью операторов Намбу:

$$\Psi_p = \begin{pmatrix} a_{p\uparrow} \\ a_{-p\downarrow}^+ \end{pmatrix}, \quad \Psi_p^+ = (a_{p\uparrow}^+, a_{-p\downarrow}), \quad /4/$$

и матриц Паули:

$$\tau_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad /5/$$

Электронная часть гамильтониана имеет стандартный вид:

$$H_e = \sum_p \epsilon_p \Psi_p^+ \tau_3 \Psi_p + \frac{1}{2} \sum_{pp',q} v(q) (\Psi_{p-q}^+ \tau_3 \Psi_p) (\Psi_{p'+q}^+ \tau_3 \Psi_{p'}), \quad /6/$$

где  $v(q) = 4\pi e^2 / q^2 V$  - кулоновское взаимодействие,  $V$  - объем кристалла.

Таким образом, полный гамильтониан модели имеет вид

$$H = H_e + H_{ph} + H_{e-ph} + H_s + H_{s-e}, \quad /7/$$

где  $H_{ph}$  - фоновый гамильтониан в гармоническом приближении,  $H_{e-ph}$  описывает обычное электрон-фононное взаимодействие:

$$H_{e-ph} = \sum_{p-p'=q, \lambda} V_\lambda(p, p') \Psi_p^+ \tau_3 \Psi_{p'} Q_{q\lambda}, \quad /8/$$

где  $Q_{q\lambda}$  - нормальная координата гармонического фона поляризации  $\lambda$ .

Заметим, что взаимодействие электронов с ЛСВ типа /3/ было обнаружено экспериментально в аморфных металлических сплавах<sup>/5,9/</sup>.

## 3. САМОСОГЛАСОВАННОЕ ВЫЧИСЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ ФУНКЦИИ ГРИНА

Рассмотрим двухвременные электронные функции Грина /ФГ/, которые представим в матричном виде /5/:

$$G_p(t-t') = \langle\langle \Psi_p(t); \Psi_p^+(t') \rangle\rangle, \quad /9/$$

используя обычные обозначения<sup>/10/</sup>. Исследование электрон-ионной модели металла /первые три члена в гамильтониане /7// с произвольным электрон-фононным взаимодействием  $H_{e-ph}$  показывает<sup>/11/</sup>, что кулоновское взаимодействие /6/ приводит к экранировке электрон-ионного взаимодействия, которое можно учесть с помощью диэлектрической проницаемости электронного газа. Для упрощения и без того громоздких дальнейших расчетов мы кулоновское взаимодействие в /6/ учитывать не будем, а перенормировку параметров  $V_s$ ,  $V_\lambda$  /7,2/, /8// учтем в соответствующем месте, используя результаты<sup>/11/</sup>.

### 3.1. Уравнение Дайсона для ФГ

Дифференцируя /9/ по времени  $t$  с учетом гамильтониана /7/, для фурье-компонент ФГ получаем

$$(\omega \tau_0 - \epsilon_p \tau_3) G_p(\omega) = \tau_0 + \sum_{\lambda, p-p=q} V_\lambda(p, p-q) \tau_3 \ll \Psi_{p-q} \delta Q_{q\lambda} | \Psi_p^+ \gg_\omega +$$

$$+ \sum_{p-p=q} V_s(p, p-q) \tau_3 \ll \Psi_{p-q} \delta S_q^x | \Psi_p^+ \gg_\omega. \quad /10/$$

В уравнении /10/ введены операторы флуктуаций:  $\delta Q_{q\lambda} = Q_{q\lambda} - \langle Q_{q\lambda} \rangle$  и  $\delta S_q^x = S_q^x - \langle S_q^x \rangle$ , где средние значения  $\langle Q_{q\lambda} \rangle$  и  $\langle S_q^x \rangle$  могут быть отличны от нуля при структурном переходе. Возникающее при этом изменение электронного спектра может быть учтено соответствующей перенормировкой  $\epsilon_p$  в /6/.

Далее воспользуемся методом составления уравнений движения по второму времени  $t'/12/$ . Дифференцируя ФГ в правой части /10/ по  $t'$ , получаем для них уравнения, подставляя которые в /10/ и вводя нулевую ФГ

$$G_p^0(\omega) = [\omega \tau_0 - \epsilon_p \tau_3]^{-1}, \quad /11/$$

получаем уравнение для ФГ  $G_p(\omega)$  в виде

$$G_p(\omega) = G_p^0(\omega) + G_p^0(\omega) T_p(\omega) G_p^0(\omega). \quad /12/$$

$T_p(\omega)$  - матрица рассеяния - определяется выражением

$$T_p(\omega) = \sum_{q\lambda} \tau_3 \ll \delta\rho(p, p-q) \Psi_{p-q} | \Psi_{p-q}^+ \delta\rho(p, p-q) \gg_{\tau_3}, \quad /13/$$

где

$$\delta\rho(p, p-q) = \sum_{\lambda} V_\lambda(p, p-q) \delta Q_{q\lambda} + V_s(p, p-q) \delta S_q^x. \quad /13a/$$

Уравнение /12/ можно переписать в виде уравнения Дайсона:

$$G_p^{-1}(\omega) = G_p^{0-1}(\omega) - \Sigma_p(\omega), \quad /14/$$

где  $\Sigma_p(\omega)$  - массовый оператор, который связан с матрицей рассеяния уравнением

$$T_p(\omega) = \Sigma_p(\omega) + \Sigma_p(\omega) G_p^0(\omega) T_p(\omega). \quad /15/$$

Как следует из этого уравнения, массовый оператор является связанной частью матрицы рассеяния, которая не может быть представлена в виде двух частей, соединенных отдельной нулевой ФГ  $G_p^0$ .

### 3.2. Вычисление массового оператора

Для получения замкнутой самосогласованной системы уравнений для массового оператора  $\Sigma_p(\omega)$  необходимо найти приближенное его выражение через ФГ /9/. Выпишем спектральное представление /10/ для массового оператора:

$$\Sigma_p(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\omega - \omega'} (1 + e^{-\beta\omega'}) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi} e^{i\omega' t} \times$$

$$\times \sum_{q\lambda} \tau_3 \langle \delta\rho(p, p-q; t) \Psi_{p-q}(t) | \Psi_{p-q}^+ \delta\rho(p, p-q) \rangle^{(c)} \tau_3,$$

где индекс (c) означает связанную часть.

Массовый оператор  $\Sigma_p(\omega)$  описывает неупругое рассеяние электронов на фононах и ЛСВ. В простейшем приближении можно пренебречь корреляцией в распространении этих возбуждений и электронов, что соответствует следующему расщеплению корреляционных функций в /16/:

$$\tau_3 \langle \delta\rho(p, p-q; t) \Psi_{p-q}(t) | \Psi_{p-q}^+ \delta\rho(p, p-q) \rangle^{(c)} \tau_3 \approx$$

$$\approx \langle \delta\rho(p, p-q; t) \delta\rho(p, p-q) \rangle \tau_3 \langle \Psi_{p-q}^+ | \Psi_{p-q} \rangle \tau_3. \quad /17/$$

Корреляционные функции  $\langle \delta\rho | \delta\rho \rangle$  в /17/ вычисляются по гамильтонианам  $H_{ph}$  и  $H_s$  в /7/, при этом  $\langle \delta Q_{q\lambda} \delta S_q^x \rangle = 0$ .

Используя /17/ и спектральные представления для корреляционных функций, получаем следующее выражение для массового оператора:

$$\Sigma_p(\omega) = \Sigma_p^{lat}(\omega) = \frac{1}{2\pi^2} \iint_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1 d\omega_2}{\omega - \omega_1 - \omega_2} \left( \text{th} \frac{\beta\omega_1}{2} + \text{cth} \frac{\beta\omega_2}{2} \right) \times$$

$$\times \sum_{q\lambda} \left\{ \sum_{\lambda\lambda'} V_\lambda(p, p-q) V_{\lambda'}(p-q', p) \text{Im} \ll \delta Q_{q\lambda} | \delta Q_{-q'\lambda'} \gg_{\omega_2 + i\epsilon} + \right.$$

$$\left. + V_s(p, p-q) V_s(p-q', p) \text{Im} \ll \delta S_q^x | \delta S_{-q'}^x \gg_{\omega_2 + i\epsilon} \right\} \times$$

$$\times \tau_3 \text{Im} \ll \Psi_{p-q}^+ | \Psi_{p-q} \gg_{\omega_1 + i\epsilon} \tau_3.$$

Массовый оператор /18/ отличается от обычно используемого /2,3/ наличием псевдоспиновой ФГ, которая описывает распространение ЛСВ /1/.

Учет кулоновского взаимодействия /6/ формально не меняет вида уравнения /18/. Однако в этом случае взаимодействия  $V_s(q)$  и  $V_\lambda(q)$  становятся экранированными:

$$V_{s,\lambda}(q, \omega) = \frac{V_{s,\lambda}(q)}{\epsilon(q, \omega)}, \quad /19/$$

где  $\epsilon(q, \omega)$  - диэлектрическая проницаемость электронного газа /11/. Именно в этом смысле мы и будем использовать выражение /18/. Полный массовый оператор кроме /18/ содержит еще слабое, определяемое экранированным кулоновским взаимодействием /11/:

$$\Sigma_p^c(\omega) = - \sum_{qq'} \delta_{qq'} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi} \frac{v(q)}{\epsilon(q, \omega - \omega_1)} \times \\ \times \text{th} \frac{\beta\omega_1}{2} \tau_3 \text{Im} \langle\langle \Psi_{p-q}^+ | \Psi_{p-q}'^+ \rangle\rangle_{\omega_1 + i\epsilon} \tau_3, \quad /20/$$

и имеет вид

$$\Sigma_p(\omega) \Rightarrow \Sigma_p^{\text{lat.}}(\omega) + \Sigma_p^c(\omega). \quad /21/$$

Таким образом, мы получили самосогласованную систему уравнений /14/, /21/, /18/, /20/ для одночастичной электронной ФГ.

#### 4. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ ДЛЯ СВЕРХПРОВОДНИКА

Выражение для массового оператора /21/ позволяет записать уравнения Элиашберга для щелевой функции  $\Delta(\omega)$ . Используя /18/, /20/ стандартным образом /3/, получаем

$$[1 - Z(\omega)]\omega = - \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 K(\omega_1, \omega) \text{Re} \frac{\omega_1}{\sqrt{\omega_1^2 - \Delta^2(\omega_1)}} \text{sign} \omega_1, \quad /22/$$

$$Z(\omega)\Delta(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 K(\omega_1, \omega) \text{Re} \frac{\Delta(\omega_1)}{\sqrt{\omega_1^2 - \Delta^2(\omega_1)}} \text{sign} \omega_1 - \\ - N(0) V_c \int_0^{\omega_F} d\omega_1 \text{th} \frac{\omega_1}{2T} \text{Re} \frac{\Delta(\omega_1)}{\sqrt{\omega_1^2 - \Delta^2(\omega_1)}}. \quad /23/$$

Функция  $Z(\omega)$  описывает перенормировку электронного спектра в результате взаимодействия электронов /плотность состояний которых вблизи уровня Ферми  $\omega_F - N(0)$ / с фононами и ЛСВ. В /23/  $V_c$  - псевдопотенциал кулоновского взаимодействия.

Ядро интегральных уравнений /22/, /23/ определяется выражением

$$K(\omega_1, \omega) = \int_0^{\infty} d\omega_2 S(\omega_2) \frac{1}{2} \left\{ \frac{\text{th} \frac{\omega_1}{2T} + \text{cth} \frac{\omega_1}{2T}}{\omega_1 + \omega_2 - \omega - i\delta} - \right. \\ \left. - \frac{\text{th} \frac{\omega_1}{2T} - \text{cth} \frac{\omega_2}{2T}}{\omega_1 - \omega_2 - \omega - i\delta} \right\}, \quad /24/$$

где спектральная плотность  $S(\omega_2)$  состоит из двух слагаемых: фононной спектральной плотности,

$$S_{ph}(\omega) = \alpha_{ph}^2(\omega) F_{ph}(\omega) = \int_{S_F} \frac{d^2 p}{v_p} \int_{S_F} \frac{d^2 p'}{v_{p'}} \sum_{\lambda r} V_\lambda(\vec{p}, \vec{p}') V_\lambda(\vec{p}' + \vec{r}, \vec{p}) \times \\ \times \left[ - \frac{1}{\pi} \text{Im} \langle\langle \delta Q_{p-p', \lambda} | \delta Q_{p'-p, \lambda}^* \rangle\rangle_{\omega_2 > 0} \right] / \int_{S_F} \frac{d^2 p}{v_p}, \quad /25/$$

и спектральной плотности ЛСВ,

$$S_s(\omega_2) = \alpha_s^2(\omega) F_s(\omega) = \int_{S_F} \frac{d^2 p}{v_p} \int_{S_F} \frac{d^2 p'}{v_{p'}} \sum_r V_s(\vec{p}, \vec{p}') V_s(\vec{p}' + \vec{r}, \vec{p}) \times \\ \times \left[ - \frac{1}{\pi} \text{Im} \langle\langle \delta S_{p-p', \lambda}^x | \delta S_{p'-p, \lambda}^x \rangle\rangle_{\omega_2 > 0} \right] / \int_{S_F} \frac{d^2 p}{v_p}. \quad /26/$$

В уравнениях /25/, /26/ учтена возможность процессов перебро-

са, т.е.  $\vec{p} = \vec{p}' + \vec{r}$ . При записи уравнения /26/ мы пренебрегли перемешиванием фононных мод, т.е. положили  $\lambda = \lambda'$ .

Взаимодействие электронов с ЛСВ /2/ приводит к эффективному взаимодействию между электронами, характер которого определяется спектральной плотностью /26/. Следуя стандартным методам, введем эффективную константу связи  $\lambda_s$ :

$$\lambda_s = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\omega} S_s(\omega) = \frac{1}{N(0)} \int \frac{d^2p}{v_p} \int \frac{d^2p'}{v_{p'}} |V_s(\vec{p}, \vec{p}')|^2 \frac{\Omega \langle S^z \rangle}{E_q^2}, \quad /27/$$

где  $E_q^2$  - полюс статической восприимчивости

$$\text{Re} \langle \delta S_q^x | \delta S_{-q}^x \rangle_{\omega=0} = - \frac{\Omega \langle S^z \rangle}{E_q^2}.$$

Дальнейшее вычисление  $\lambda_s$  зависит от дисперсии взаимодействия  $V_s(q)$  и энергии квазилокальных возбуждений. Предполагая, что  $E_q$  имеет слабую дисперсию, воспользуемся локальным приближением /ср. с результатами /2/, гл.4, для обычных фононов/. В таком случае, вводя усредненный матричный элемент взаимодействия,

$$\langle J_s^2 \rangle = \frac{1}{(2x_{sa})^2} \cdot \frac{1}{N(0)} \int \frac{d^2p}{v_p} \int \frac{d^2p'}{v_{p'}} |V_s(\vec{p}, \vec{p}')|^2, \quad /28/$$

и усредненную частоту квазилокальных возбуждений,

$$\frac{1}{\omega_s^2} = \langle \frac{1}{E_q^2} \rangle \approx \frac{1}{N} \sum_q \frac{1}{E_q^2}, \quad /29/$$

получаем оценку для  $\lambda_s$  в виде

$$\lambda_s = N(0) \langle J_s^2 \rangle (2x_{sa})^2 \cdot \frac{\Omega \langle S^z \rangle}{\omega_s^2}. \quad /30/$$

Согласно работе /2/ /гл. IV / константа электрон-фононной связи имеет оценку

$$\lambda_{ph} = N(0) \langle J_{ph}^2 \rangle < \frac{1}{M\omega_q^2} \rangle. \quad /31/$$

Учитывая определение /3/, для оценок можно считать, что выполняется приближенное равенство  $\langle J_s^2 \rangle \approx \langle J_{ph}^2 \rangle$ . Вводя упругую

энергию при дисторсии решетки  $(2x_{sa})^2 / \langle \frac{1}{M\omega_q^2} \rangle$ , получаем, что

$$\frac{\lambda_s}{\lambda_{ph}} \approx \frac{\Omega \langle S^z \rangle}{\omega_s^2} \omega_D. \quad /32/$$

Таким образом, отношение  $\lambda_s / \lambda_{ph}$  зависит от отношения частоты локальных колебаний к средней частоте фононов. Поскольку обычно  $\omega_s < \omega_D$ , то видно, что  $\lambda_s$  может значительно превышать  $\lambda_{ph}$ .

## 5. ТЕМПЕРАТУРА СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО ПЕРЕХОДА

Рассмотрим, как влияют на сверхпроводящий фазовый переход ЛСВ и возможная вследствие взаимодействия между ними структурная неустойчивость решетки.

Уравнение для температуры перехода  $T_c$  получаем из уравнений /22/, /23/ при условии стремления к нулю энергетической щели ( $\Delta(\omega_1) \rightarrow 0$ ):

$$[1 - Z(\omega)]\omega = - \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 K(\omega_1, \omega), \quad /33/$$

$$Z(\omega)\Delta(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 K(\omega_1, \omega) \text{Re} \frac{\Delta(\omega_1)}{\omega_1} - N(0) V_c \int_0^{\omega_F} d\omega_1 \text{th} \frac{\omega_1}{2T_c} \text{Re} \frac{\Delta(\omega_1)}{\omega_1}. \quad /34/$$

Рассмотрим приближенные решения этих уравнений.

Наиболее простой аппроксимацией для ядра электрон-фононного взаимодействия является следующая аппроксимация, обычно используемая в теориях слабой связи:

$$K_{ph}(\omega_1, \omega) = \frac{\lambda_{ph}}{2} \text{th} \frac{\omega_1}{2T} \theta(\omega_D - |\omega_1|) \theta(\omega_D - |\omega|). \quad /35/$$

Такую же аппроксимацию возьмем и для ядра взаимодействия ЛСВ с электронами:

$$K_s(\omega_1, \omega) = \frac{\lambda_s}{2} \text{th} \frac{\omega_1}{2T} \theta(\omega_s - |\omega_1|) \theta(\omega_s - |\omega|). \quad /36/$$

В приближении /35/, /36/ из уравнения /33/ следует, что

$$Z(\omega) = 1, \quad /37/$$

а уравнение /34/ принимает вид

$$\Delta(\omega) = \lambda_{ph} \theta(\omega_D - |\omega|) \int_0^{\omega_D} \frac{d\omega_1}{\omega_1} \Delta(\omega_1) \text{th} \frac{\omega_1}{2T_c} + \lambda_s \theta(\omega_s - |\omega|) \int_0^{\omega_s} \frac{d\omega_1}{\omega_1} \Delta(\omega_1) \text{th} \frac{\omega_1}{2T_c} - N(0) V_c \int_0^{\omega_F} \frac{d\omega_1}{\omega_1} \Delta(\omega_1) \text{th} \frac{\omega_1}{2T_c}. \quad /38/$$

Решение уравнения /38/ будем искать в виде

$$\begin{aligned} \Delta_s, & \quad |\omega| < \omega_s, \\ \Delta(\omega) = \Delta_{ph}, & \quad \omega_s < |\omega| < \omega_D, \\ \Delta_c, & \quad \omega_D < |\omega| < \omega_F. \end{aligned} \quad /39/$$

Вводя обозначения:  $\lambda_c = N(0)V_c$  и  $\kappa(y) = \int_0^y \frac{dx}{x} \text{th} x$ , из /38/ с учетом /39/ получаем систему уравнений:

$$\begin{aligned} [1 - (\lambda_{ph} + \lambda_s - \lambda_c) \kappa(\frac{\omega_s}{2T_c})] \Delta_s - (\lambda_{ph} - \lambda_c) \ln \frac{\omega_D}{\omega_s} \Delta_{ph} + \lambda_c \ln \frac{\omega_F}{\omega_D} \Delta_c &= 0, \\ \lambda_c \kappa(\frac{\omega_s}{2T_c}) \Delta_s + \lambda_c \ln \frac{\omega_D}{\omega_s} \Delta_{ph} + (1 + \lambda_c \ln \frac{\omega_F}{\omega_D}) \Delta_c &= 0, \\ -(\lambda_{ph} - \lambda_c) \kappa(\frac{\omega_s}{2T_c}) \Delta_s + [1 - (\lambda_{ph} - \lambda_c) \ln \frac{\omega_D}{\omega_s}] \Delta_{ph} + \lambda_c \ln \frac{\omega_F}{\omega_D} \Delta_c &= 0. \end{aligned} \quad /40/$$

Используя соотношение  $\kappa(y) = \ln(\frac{48}{\pi} y)$ , получаем формулу для  $T_c$ :

$$T_c = 1,14 \omega_s e^{-1/\lambda}, \quad \lambda = \lambda_s + \frac{\lambda_{ph} - \mu^*}{1 - (\lambda_{ph} - \mu^*) \ln \frac{\omega_D}{\omega_s}}, \quad /41/$$

где экранированное кулоновское отталкивание /13/

$$\mu^* = N(0)V_c / [1 + N(0)V_c \ln \frac{\omega_F}{\omega_D}].$$

Для определения правой части уравнения /41/ необходимо найти  $\omega_s$  /29/. Энергию квазилокальных возбуждений /1/ вычислим в приближении хаотических фаз для спиновой ФГ в /26/:

$$E_q^2 = \sum_j \phi_{ij} e^{iq(\vec{R}_i - \vec{R}_j)},$$

где

$$\phi_{ij} = \delta_{ij} (\Omega^2 + J_0^2 \langle S^x \rangle^2) - \Omega \langle S^z \rangle J_{ij} (1 - \delta_{ij}).$$

В локальном приближении

$$\omega_s^2 = \Omega^2 + h_x^2; \quad h_x = J_0 \langle S^x \rangle. \quad /42/$$

Система уравнений /41/, /42/, /32/ становится замкнутой после определения средних значений  $\langle S^x \rangle$  и  $\langle S^z \rangle$ . В соответствии с приближением вычисления спектра  $E_q \langle S^x \rangle$  и  $\langle S^z \rangle$  определяются уравнениями в приближении среднего поля:

$$\langle S^x \rangle = \frac{h_x}{2\omega_s} \text{th} \frac{\omega_s}{2T}, \quad \langle S^z \rangle = \frac{\Omega}{2\omega_s} \text{th} \frac{\omega_s}{2T}. \quad /43/$$

Таким образом, мы получили самосогласованную систему уравнений для температуры перехода  $T_c$ . Параметрами модели являются: экранированное кулоновское отталкивание  $\mu^*$ , константа электрон-фононной связи  $\lambda_{ph}$ , отношение  $y = \omega_D/\Omega$  и отношение  $x = J_0/\Omega$ . Параметр  $\mu^*$  выберем /14/ в виде  $\mu^* = 0,11$ . Параметр  $x$  определяет термодинамическое состояние системы /1/. При  $x < 2$  псевдоспиновая подсистема является разупорядоченной ( $\langle S^x \rangle = 0$ ) даже при нулевой температуре. При  $x > 2$  при определенной температуре  $T_0^s$  происходит структурный фазовый переход в упорядоченное состояние:  $\langle S^x \rangle \neq 0$ . На рис.1 представлена зависимость отношения  $T_c$  к  $T_c^0$  /температура сверхпроводящего перехода при  $\lambda_s = 0$ / от  $x$  при некоторых значениях  $y$  при  $\lambda_{ph} = 0,3$ . Значения величин, определяющих поведение системы уравнений /41/, /42/, /32/, /43/ в единицах  $\omega_D$ , приведены в табл.1. Зависимость  $T/T_0^0$  от отношения  $y$  при  $\lambda_{ph} = 0,3$ ,  $x=0$  приведена на рис.2. Аналогичные расчеты были проведены при различных значениях параметра  $\lambda_{ph}^*$ .

Для сравнения в таблице приведены результаты вычислений на основе приближенной формулы для  $T_c$ , полученной /15/ без использования аппроксимации типа /35/ и справедливой согласно расчетам /15/ вплоть до  $\lambda \approx 2$  и частот  $\omega \approx T_c$ . Для модельной спектральной функции /15/

$$S(\omega) = \frac{\lambda_{ph} \omega_D}{2} \delta(\omega - \omega_D) + \frac{\lambda_s \omega_s}{2} \delta(\omega - \omega_s) \quad /44/$$

эта формула имеет вид

$$T_c = 1,14 \bar{\omega} \exp\left[-\frac{1 + \lambda}{\lambda - \mu^*(1 + \beta)}\right], \quad /45/$$

\*С увеличением  $\lambda_{ph} \max(T_c/T_c^0)$  уменьшается за счет увеличения  $T_c^0$ .

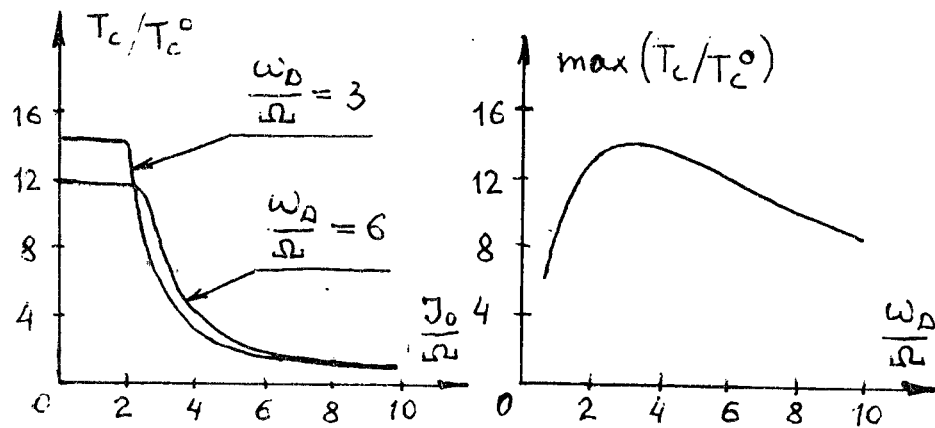


Рис.1. Зависимость  $T_c/T_c^0$  - температура сверхпроводящего перехода без взаимодействия электронов с ЛСВ/ от отношения  $x=J_0/\Omega$  при  $\lambda_{ph}=0,3$ ,  $y=\omega_D/\Omega=3$  и 6.

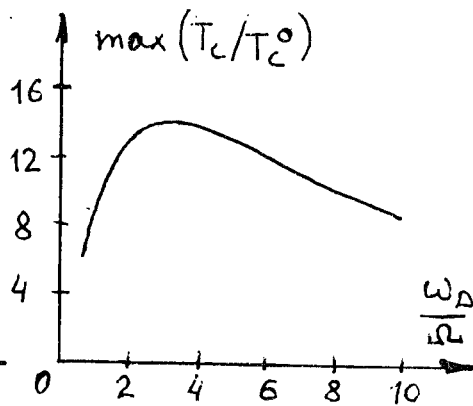


Рис.2. Зависимость  $\max(T_c/T_c^0)$  от  $y = \frac{\omega_D}{\Omega}$  при  $\lambda_{ph}=0,3$ .

где

$$\lambda = \lambda_s + \lambda_{ph}, \quad \bar{\omega} = \omega_D^{\lambda_{ph}/\lambda} \omega_s^{\lambda_s/\lambda} e^{-\lambda}, \quad \beta = \frac{\lambda}{1+\lambda} A,$$

$$A = \frac{1}{2} - \frac{\lambda_{ph} \cdot \lambda_s}{2\lambda^2} \left[ 1 + \frac{\omega_D^2 + \omega_s^2}{\omega_D^2 - \omega_s^2} \ln \frac{\omega_s}{\omega_D} \right].$$

Величины  $\lambda_s, \omega_s$  определяются уравнениями /32/, /42/, /43/.

Сравнение расчетов по формулам /41/ и /45/ показывает, что абсолютные значения  $T_c^0$  и  $T_c$ , вычисленные по формуле /41/, оказываются примерно на порядок выше, чем вычисленные по формуле /45/. Однако отношение  $T_c/T_c^0$  в первом случае примерно в 3 раза меньше при  $\lambda \leq 1$ , чем даёт формула /45/. При уменьшении  $\lambda$  эта разность существенно уменьшается и при  $\lambda \leq 0,4$  может быть отнесена на счет разного способа вычисления спектральной функции. При этом условие  $T_c \ll \omega_s$  выполняется при  $\lambda \leq 1$  в обоих случаях. Таким образом, хотя формула /41/ получена в приближении слабой связи, ее можно использовать для качественного обсуждения в области промежуточной связи  $\lambda < 1$ .

Таблица

Значения температуры фазового перехода в единицах  $\omega_D$ , вычисленные по формулам /41/ /верхняя строка/ и /45/ /нижняя строка/ при  $\lambda_{ph}=0,3$ ,  $\mu^*=0,1$ ,  $\omega_D/\Omega=3$

$J_0/\Omega$	$T_c/\omega_D$	$T_c^0/\omega_D$	$T_c/T_c^0$	$T_0^s/\omega_D$	$\lambda_s$
2,01	1/ 8,6 · 10 <sup>-2</sup>	5,9 · 10 <sup>-3</sup>	14,6	0,06	0,44
	2/ 2,0 · 10 <sup>-2</sup>	4,7 · 10 <sup>-4</sup>	42,6		
2,5	1/ 5,3 · 10 <sup>-2</sup>	5,9 · 10 <sup>-3</sup>	9,0	0,15	0,23
	2/ 9,4 · 10 <sup>-3</sup>	4,7 · 10 <sup>-4</sup>	10,0		
3,0	1/ 3,3 · 10 <sup>-2</sup>	5,9 · 10 <sup>-3</sup>	5,6	0,21	0,13
	2/ 4,5 · 10 <sup>-3</sup>	4,7 · 10 <sup>-4</sup>	9,6		

## 6. ВЫВОДЫ

Как показано в настоящей работе на основе модели /7/, в сверхпроводниках, содержащих локально-неустойчивые структурные конфигурации, может возникнуть эффективное дополнительное притяжение между электронами, приводящее к повышению  $T_c$ . При достаточно сильном взаимодействии между локальными структурными возбуждениями  $J_0 > 2\Omega$  в /1// в системе происходит и структурный переход при некоторой температуре  $T_0^s$ . При этом, если  $T_0^s > T_c$ , то структурный переход подавляет отмеченное выше повышение  $T_c$  /см. рис.1/. Например, при  $\omega_D=200$  К и  $\Omega=\omega_D/3$ ,  $\lambda_{ph}=0,3$  получаем  $T_c=3,3$  К и  $T_c/T_c^0=2,8$ , если  $T_0^s=67$  К, а для  $T_0^s=11$  К и  $T_c=17$  К получаем  $T_c/T_c^0=14,5$ . Наиболее сильное повышение  $T_c$  происходит при определенном соотношении частоты квазилокальных возбуждений  $\omega_s$  и характерной фононной частоты  $\omega_D$  /см. рис.2/. Таким образом, проведенные в настоящей работе расчеты показывают, что наиболее благоприятные условия повышения  $T_c$  реализуются в сверхпроводниках, обладающих локально-неустойчивыми структурными конфигурациями, при условии, что структурный переход в решетке не происходит до возникновения сверхпроводимости. Эти результаты находятся в согласии с качественными оценками, приведенными в работе /5/.



ЛИТЕРАТУРА

1. Testardi L. Rev.Mod.Phys., 1975, 47, p.637.
2. Проблема высокотемпературной сверхпроводимости, под ред. В.Л.Гинзбурга и Д.А.Киржница. "Наука", М., 1977.
3. Вонсовский С.В., Изюмов Ю.А., Курмаев Э.З. Сверхпроводимость переходных металлов, их сплавов и соединений. "Наука", М., 1977.
4. Phillips J.C. Sol.St.Comm., 1976, 18, p.831.
5. Ngai K.L., Reinecke T.L. Phys.Rev.B., 1977, 16, p.1077.
6. Vajičić G. et al. Phys.Lett. A., 1979, 73A, p.439.
7. Yamada Y. Proc.Int.Conf. on Low Lying Lattice Vibrational Modes and Their Relationship to Superconductivity and Ferroelectricity, Ferroelectrics, 1977, 16, p.49.
8. Moore M.A., Williams H.C.W.L. J.Phys.C., 1972, 5, p.3168.
9. Cochran R.W. et al. Phys.Rev.Lett., 1975, 35, p.676.
10. Боголюбов Н.Н., Тябликов С.В. ДАН СССР, 1959, 126, с.53; Зубарев Д.Н. УФН, 1960, 71, с.71.
11. Вуйичич Г., Петру З., Плакида Н.М. ОИЯИ, Р17-12956, Дубна, 1979.
12. Церковников Ю.А. ДАН СССР, 1962, 143, с.832.
13. Боголюбов Н.Н., Толмачев В.В., Ширков Д.В. Новый метод в теории сверхпроводимости. Изд-во АН СССР, М., 1958.
14. McMillan W.L. Phys.Rev., 1968, 167, p.331.
15. Каракозов А.Е., Максимов Е.Е., Машков С.А. ЖЭТФ, 1975, 68, с.1937.

## Нет ли пробелов в Вашей библиотеке?

Вы можете получить по почте перечисленные ниже книги, если они не были закуплены ранее.

Д1,2-8408	Труды IV Международного симпозиума по физике высоких энергий и элементарных частиц. Варна, 1974.	2 р. 05 к.
Р1,2-8529	Труды Международной школы-семинара молодых ученых. Актуальные проблемы физики элементарных частиц. Сочи, 1974.	2 р. 60 к.
Д6-8846	XIV совещание по ядерной спектроскопии и теории ядра. Дубна, 1975.	1 р. 90 к.
Д13-9164	Международное совещание по методике проволочных камер. Дубна, 1975.	4 р. 20 к.
Д1,2-9224	IV Международный семинар по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1975.	3 р. 60 к.
Д-9920	Труды Международной конференции по избранным вопросам структуры ядра. Дубна, 1976.	3 р. 50 к.
Д9-10500	Труды II Симпозиума по коллективным методам ускорения. Дубна, 1976.	2 р. 50 к.
Д2-10533	Труды X Международной школы молодых ученых по физике высоких энергий. Баку, 1976.	3 р. 50 к.
Д13-11182	Труды IX Международного симпозиума по ядерной электронике. Варна, 1977.	5 р. 00 к.
Д17-11490	Труды Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1977.	6 р. 00 к.
Д6-11574	Сборник аннотаций XV совещания по ядерной спектроскопии и теории ядра. Дубна, 1978.	2 р. 50 к.
Д3-11787	Труды III Международной школы по нейтринной физике. Алушта, 1978.	3 р. 00 к.
Д13-11807	Труды III Международного совещания по пропорциональным и дрейфовым камерам. Дубна, 1978.	6 р. 00 к.
	Труды VI Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна 1978. /2 тома/	7 р. 40 к.
Д1,2-12036	Труды V Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна 1978.	5 р. 00 к.
Р18-12147	Труды III совещания по использованию ядерно-физических методов для решения научно-технических и народнохозяйственных задач.	2 р. 20 к.

Рукопись поступила в издательский отдел  
24 июня 1980 года.

Д1,2-12450	Труды XII Международной школы молодых ученых по физике высоких энергий. Приморско, НРБ, 1978.	3 р. 00 к.
P2-12462	Труды V Международного совещания по нелокальным теориям поля. Алушта, 1979.	2 р. 25 к.
Д-12831	Труды Международного симпозиума по фундаментальным проблемам теоретической и математической физики. Дубна, 1979.	4 р. 00 к.
Д-12965	Труды Международной школы молодых ученых по проблемам ускорителей заряженных частиц. Мянск, 1979.	3 р. 00 к.
Д11-80-13	Труды рабочего совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике. Дубна, 1979.	3 р. 50 к.
Д4-80-271	Труды Международной конференции по проблемам нескольких тел в ядерной физике. Дубна, 1979.	3 р. 00 к.
Д4-80-385	Труды Международной школы по структуре ядра. Алушта, 1980.	5 р. 00 к.

Заказы на упомянутые книги могут быть направлены по адресу:

101000 Москва, Главпочтамт, п/я 79,

издательский отдел Объединенного института ядерных исследований