сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

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.

1980

Вуйичич Г. и др. Р17-80-438

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

Vujičič G. et al. P17-80-438

Quasilocal Structural Excitations in a Lattice of High-T_c Superconductors

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

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 А-15/, а сплавы характеризуются сосуществованием двух или более фаз ($Nb_3Al_xGe_{1-x}$, Na_xWO_3, K_xWO_3) [1-4]. Взаимосвязь структурной неустойчивости и высокой температуры T_c теоретически недостаточно выяснена [2,3], 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 [5], 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, обусловливая низкотемпературные аномалии термодинамических величин /теплоемкости и др./.

В работе [5] 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 [6] /. 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 [5], гамильтониан которой в псевдоспиновом ($S=1/2$) представлении имеет вид модели Изинга в поперечном поле:

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

где $\Omega = E_a - E_s > 0$ - разность энергий дублета, состояния которого описываются симметричной, ψ_s, и антисимметричной, ψ_a, волновыми функциями, J_{ij} - эффективное взаимодействие ЛСВ, которое в общем случае определяется как прямым взаимодействием, так и косвенным - через обмен фононами [7]. Рассмотрение взаимодействия возбуждений типа /1/ с решеткой хорошо известно /см., например, [7] / и было проведено в работе [5]. 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 $\vec{x}_i$ [8]. Потенциал взаимодействия электрона с координатой r с решеткой представим в виде $\sum_i U(\vec{\ell}_i + \vec{x}_i + \vec{r})$, где ℓ_i - узел решетки. Разложение этого потенциала с учетом только линейных по $\vec{x}_i$ членов приводит к взаимодействию электронов с ЛСВ в виде

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

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

$$V_s(\vec{p},\vec{p}\,') = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i\alpha} e^{i\vec{q}\vec{\ell}_i} \langle p|\nabla_r^\alpha U_s(\vec{\ell}_i + \vec{r})|p'\rangle 2x_{sa}^\alpha . \qquad /3/$$

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

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

и матриц Паули:

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

Электронная часть гамильтониана имеет стандартный вид:

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

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

Таким образом, полный гамильтониан модели имеет вид

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

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

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

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

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

3. САМОСОГЛАСОВАННОЕ ВЫЧИСЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ ФУНКЦИИ ГРИНА

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

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

используя обычные обозначения [10]. Исследование электрон-ионной модели металла /первые три члена в гамильтониане /7// с произвольным электрон-фононным взаимодействием H_{e-ph} показывает [11], 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_λ /2/, /8// учтем в соответствующем месте, используя результаты [11].

3.1. <u>Уравнение Дайсона для ФГ</u>

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

$$(\omega r_0 - \epsilon_p r_3) G_p(\omega) = r_0 + \sum_{\lambda, p-p'=q} V_\lambda(p, p-q)\, r_3 \langle\langle \Psi_{p-q}\, \delta Q_{q\lambda} | \Psi_p^+ \rangle\rangle_\omega + \qquad /10/$$

$$+ \sum_{p-p'=q} V_s(p, p-q)\, r_3 \langle\langle \Psi_{p-q}\, \delta S_q^x | \Psi_p^+ \rangle\rangle_\omega .$$

В уравнении /10/ введены операторы флюктуаций: $\delta Q_{q\lambda} = Q_{q\lambda} - \langle Q_{q\lambda}\rangle$ и $\delta S_q^\alpha = S_q^\alpha - \langle S_q^\alpha \rangle$, 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 ϵ_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

$$G_p^\circ(\omega) = [\omega r_0 - \epsilon_p r_3]^{-1} , \qquad /11/$$

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

$$G_p(\omega) = G_p^\circ(\omega) + G_p^\circ(\omega) T_p(\omega) G_p^\circ(\omega) . \qquad /12/$$

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

$$T_p(\omega) = \sum_{qq'} r_3 \langle\langle \delta\rho(p, p-q)\, \Psi_{p-q} | \Psi_{p-q'}^+\, \delta\rho(p, p-q')\rangle\rangle\, r_3 , \qquad /13/$$

где

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

Уравнение /12/ можно переписать в виде уравнения Дайсона:

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

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

$$T_p(\omega) = \Sigma_p(\omega) + \Sigma_p(\omega) G_p^\circ(\omega) T_p(\omega). \qquad /15/$$

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°.

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

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

$$\times \sum_{qq'} r_3 \langle \delta\rho(p, p-q; t)\, \Psi_{p-q}(t) | \Psi_{p-q'}^+\, \delta\rho(p, p-q')\rangle^{(c)} r_3 , \qquad /16/$$

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/:

$$r_3 \langle \delta\rho(p, p-q; t)\, \Psi_{p-q}(t) | \Psi_{p-q'}^+\, \delta\rho(p, p-q')\rangle^{(c)} r_3 \approx$$

$$\approx \langle \delta\rho(p, p-q; t)\, \delta\rho(p, p-q')\rangle\, r_3 \langle \Psi_{p-q}(t)\, \Psi_{p-q'}^+ \rangle r_3 . \qquad /17/$$

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:

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

$$\times \sum_{qq'} \Big\{ \sum_{\lambda\lambda'} V_\lambda(p, p-q) V_{\lambda'}(p-q', p)\, \operatorname{Im} \langle\langle \delta Q_{q\lambda} | \delta Q_{-q'\lambda'} \rangle\rangle_{\omega_2 + i\epsilon} + \qquad /18/$$

$$+ V_s(p, p-q) V_s(p-q', p)\, \operatorname{Im} \langle\langle \delta S_q^x | \delta S_{-q'}^x \rangle\rangle_{\omega_2 + i\epsilon} \Big\} \times$$

$$\times r_3 \operatorname{Im} \langle\langle \Psi_{p-q} | \Psi_{p-q'}^+ \rangle\rangle_{\omega_1 + i\epsilon}\, r_3 .$$

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:

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

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 слагаемое, определяемое экранированным кулоновским взаимодействием [11]:

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

и имеет вид

$$\Sigma_p(\omega)\Rightarrow\Sigma^{lat.}_p(\omega)+\Sigma^c_p(\omega). \qquad /21/$$

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

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

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

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

$$K(\omega_1,\omega)=\int_0^{\infty}d\omega_2\,S(\omega_2)\,\frac{1}{2}\Big\{\frac{\mathrm{th}\frac{\omega_1}{2T}+\mathrm{cth}\frac{\omega_1}{2T}}{\omega_1+\omega_2-\omega-i\delta}-$$
$$-\frac{\mathrm{th}\frac{\omega_1}{2T}-\mathrm{cth}\frac{\omega_2}{2T}}{\omega_1-\omega_2-\omega-i\delta}\Big\}, \qquad /24/$$

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

$$S_{ph}(\omega)=\alpha^2_{ph}(\omega)F_{ph}(\omega)=\int_{S_F}\frac{d^2p}{v_p}\int_{S_F}\frac{d^2p'}{v_{p'}}\sum_{\lambda\tau}V_\lambda(\vec p,\vec p\,')V_\lambda(\vec p\,'+\vec\tau,\vec p)\times$$
$$\times\Big[-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\langle\langle\delta Q_{p-p',\lambda}|\delta Q^+_{p'-p,\lambda}\rangle\rangle_{\omega_2>0}\Big]\Big/\int_{S_F}\frac{d^2p}{v_p}, \qquad /25/$$

и спектральной плотности ЛСВ,

$$S_s(\omega_2)=\alpha^2_s(\omega)F_s(\omega)=\int_{S_F}\frac{d^2p}{v_p}\int\frac{d^2p'}{v_{p'}}\sum_\tau V_s(\vec p\,',\vec p)V_s(\vec p\,'+\tau,\vec p)\times$$
$$\times\Big[-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\langle\langle\delta S^x_{p-p'}|\delta S^x_{p'-p}\rangle\rangle_{\omega_2>0}\Big/\int_{S_F}\frac{d^2p}{v_p}. \qquad /26/$$

В уравнениях /25/, /26/ учтена возможность процессов переброса, 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 λ_s:

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

где E_q^2 - полюс статической восприимчивости

$$\mathrm{Re} \ll \delta S_q^x | \delta S_{-q}^x \gg_{\omega=0} = - \frac{\Omega<S^z>}{E_q^2}.$$

Дальнейшее вычисление λ_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,

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

и усредненную частоту квазилокальных возбуждений,

$$\frac{1}{\omega_s^2} = <\frac{1}{E_q^2}> \approx \frac{1}{N} \sum_q \frac{1}{E_q^2}, \qquad /29/$$

получаем оценку для λ_s в виде

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

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

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

Учитывая определение /3/, для оценок можно считать, что выполняется приближенное равенство $<J_s^2> \approx <J_{ph}^2>$. Вводя упругую энергию при дисторсии решетки $(2x_{sa})^2/<\frac{1}{M\omega_q^2}>$, получаем, что

$$\frac{\lambda_s}{\lambda_{ph}} \approx \frac{\Omega<S^z>}{\omega_s^2}\,\omega_D. \qquad /32/$$

Таким образом, отношение λ_s/λ_{ph} зависит от отношения частоты локальных колебаний к средней частоте фононов. Поскольку обычно [5] $\omega_s < \omega_D$, то видно, что λ_s может значительно превышать λ_{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 $(\Delta(\omega_1) \to 0)$:

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

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

Рассмотрим приближенные решения этих уравнений.

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

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

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

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

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

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

а уравнение /34/ принимает вид

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

Решение уравнения /38/ будем искать в виде

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

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

$$[1-(\lambda_{ph}+\lambda_s-\lambda_c)\kappa(\frac{\omega_s}{2T_c})]\Delta_s-(\lambda_{ph}-\lambda_c)\ln\frac{\omega_D}{\omega_s}\Delta_{ph}+\lambda_c\ln\frac{\omega_F}{\omega_D}\Delta_c=0,$$

$$\lambda_c\kappa(\frac{\omega_s}{2T_c})\Delta_s+\lambda_c\ln\frac{\omega_D}{\omega_s}\Delta_{ph}+(1+\lambda_c\ln\frac{\omega_F}{\omega_D})\Delta_c=0, \qquad /40/$$

$$-(\lambda_{ph}-\lambda_c)\kappa(\frac{\omega_s}{2T_c})\Delta_s+[1-(\lambda_{ph}-\lambda_c)\ln\frac{\omega_D}{\omega_s}]\Delta_{ph}+\lambda_c\ln\frac{\omega_F}{\omega_D}\Delta_c=0.$$

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

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

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 ω_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

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

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:

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

Таким образом, мы получили самосогласованную систему уравнений для температуры перехода T_c. Параметрами модели являются: экранированное кулоновское отталкивание μ^*, константа электрон-фононной связи λ_{ph}, отношение $y=\omega_D/\Omega$ и отношение $x=J_0/\Omega$. Параметр μ^* выберем [14] в виде $\mu^*=0{,}11$. Параметр x определяет термодинамическое состояние системы /1/. При $x\le 2$ 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 /температуре 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 ω_D, приведены в табл.1. Зависимость T_c/T_c^0 от отношения y при $\lambda_{ph}=0{,}3$, $x=0$ приведена на рис.2. Аналогичные расчеты были проведены при различных значениях параметра λ_{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]

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

эта формула имеет вид

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

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

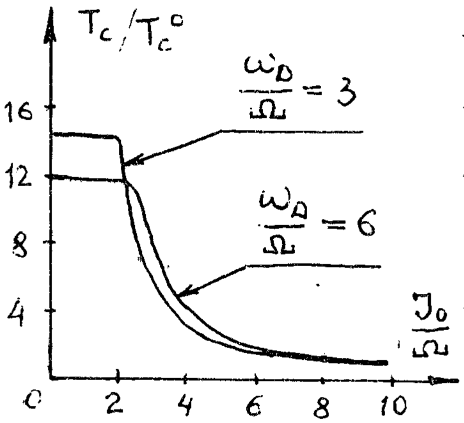

Рис.1. Зависимость T_c/T_c^0/ T_c^0 - температура сверхпроводящего перехода без взаимодействия электронов с ЛСВ/ от отношения $x=J_0/\Omega$ при $\lambda_{ph}=0{,}3$, $y=\omega_D/\Omega$ = 3 и 6.

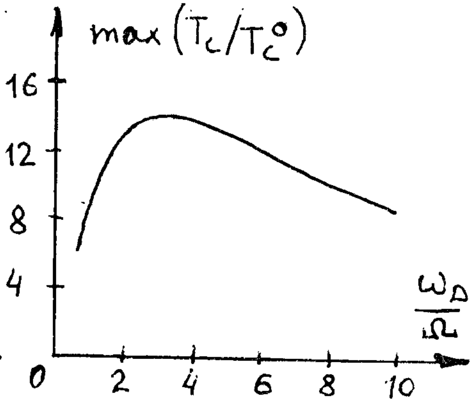

Рис.2. Зависимость $\max(T_c/T_c^0)$ от $y=\frac{\omega_D}{\Omega}$ при $\lambda_{ph}=0{,}3$.

где

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

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

Величины λ_s, ω_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 дает формула /45/. При уменьшении λ 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 $\lambda \leq 1$.

Таблица

Значения температуры фазового перехода в единицах ω_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/Ω		T_c/ω_D	T_c^0/ω_D	T_c/T_c^0	T_0^s/ω_D	λ_s
2,01	1/	$8{,}6\cdot10^{2}$	$5{,}9\cdot10^{-3}$	14,6	0,06	0,44
	2/	$2{,}0\cdot10^{-2}$	$4{,}7\cdot10^{-4}$	42,6		
2,5	1/	$5{,}3\cdot10^{-2}$	$5{,}9\cdot10^{-3}$	9,0	0,15	0,23
	2/	$9{,}4\cdot10^{-3}$	$4{,}7\cdot10^{-4}$	10,0		
3,0	1/	$3{,}3\cdot10^{-2}$	$5{,}9\cdot10^{-3}$	5,6	0,21	0,13
	2/	$4{,}5\cdot10^{-3}$	$4{,}7\cdot10^{-4}$	9,6		

6. ВЫВОДЫ

Как показано в настоящей работе на основе модели /7/, в сверхпроводниках, содержащих локально-неустойчивые структурные конфигурации, может возникать 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 ω_s и характерной фононной частоты ω_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.Commun., 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. Cochrane 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.

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.
Р2-12462	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. Минск, 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.