

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

95-191

P17-95-191

А.Ю.Черный*

ВЛИЯНИЕ КРИТИЧЕСКИХ ФЛУКТУАЦИЙ
ПРИ СТРУКТУРНОМ ФАЗОВОМ ПЕРЕХОДЕ
НА СВЕРХПРОВОДЯЩЕЕ СПАРИВАНИЕ

Направлено в журнал «Теоретическая и математическая физика»

*Постоянный адрес: 249020, Россия, г.Обнинск, Калужская обл.,
Студгородок, Институт атомной энергетики
E-mail: krasavin@thsun1.jinr.dubna.su

1995

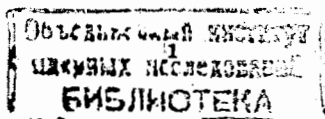
1. Введение

Исследованию изотопического эффекта (ИЭ) в новых оксидных сверхпроводниках посвящено большое количество работ (см. обзор [1]). Значение ИЭ в высокотемпературных сверхпроводниках (ВТСП) сильно зависит от концентрации примесей допирующих элементов, возрастая по мере удаления от их оптимальных значений, обеспечивающих максимально высокие T_c . При этом фактор ИЭ может возрастать до аномально высоких значений, превышающих 0,5, что необъяснимо в рамках теории БКШ.

Такое аномальное поведение изотопического эффекта по кислороду в высокотемпературных сверхпроводниках представляет значительный интерес для понимания микроскопического механизма сверхпроводимости, т.к. позволяет глубже понять роль динамики решетки в этом механизме. Предложено несколько объяснений аномального поведения ИЭ в рамках различных механизмов высокотемпературной сверхпроводимости [1].

В рамках ангармонической модели для ВТСП, предложенной Н.М.Плакидой с сотрудниками [2], удаётся объяснить не только значения $\alpha > \frac{1}{2}$, но и резкий скачок ИЭ, наблюдаемый в соединениях $La_{2-x}M_xCuO_4$ ($M=Ba, Sr$) на границе структурного фазового перехода (СФП) [3, 4]. Однако вычисления восприимчивости для динамики решётки проводились в этих работах в приближении среднего поля, что не позволяло исследовать область критических флуктуаций в окрестности температуры СФП.

В этой работе рассматривается электрон-фононная система с точно решаемой решёточной частью. Асимптотически точная решаемость модели СФП, изученной в [5, 6], позволяет исследовать влияние СФП на ИЭ в области критических флуктуаций для СФП. Отметим, что такое



исследование, проведенное автором (совместно с Н.М.Плакидой) в работе [7], не совсем точно учитывает влияние критических флуктуаций на ИЭ.

При расчётах мы считаем, что СФП обусловлен ангармоническим ион-ионным потенциалом, и поэтому мы пренебрегаем влиянием электронов на динамику решётки. При этих условиях в рамках стандартной теории Элиашберга получается общий результат: ИЭ при совпадении критических температур структурного и сверхпроводящего переходов определяется критическим индексом γ ($\chi^{-1}(q=q_1, \omega=0) \sim \tau^\gamma$, χ - статическая фоновая восприимчивость, q_1 - вектор обратной решётки для мягкой моды колебаний, $\tau = \frac{T-T_0}{T_0}$ - приведённая температура). Если $\gamma < 1$, то фактор ИЭ $\alpha = \epsilon$, где $\epsilon = -\frac{\partial \ln T_0}{\partial \ln M}$ - фактор ИЭ для температуры СФП. В случае $\gamma > 1$ $\alpha = \frac{1}{2}$ (если постоянная кулоновского взаимодействия $\mu^* = 0$).

В разделе 2 приводится гамильтониан электрон-фононной системы и выражение для температуры сверхпроводящего перехода в рамках теории Элиашберга, обобщённой на случай ангармонических колебаний решётки. Здесь же рассматривается вклад мягкой моды колебаний в постоянную электрон-фононной связи λ . Раздел 3 посвящен исследованию свойств решётки при структурном переходе и вычислению её восприимчивости, необходимой для расчёта постоянной электрон-фононного взаимодействия. В четвертом разделе вычисляется изотопический эффект для исходной модели, а также влияние СФП на ИЭ в области критических флуктуаций в зависимости от γ .

2. Гамильтониан модели. Температура сверхпроводящего перехода

Рассмотрим электрон-фононную систему с линейным электрон-фононным взаимодействием, описываемую гамильтонианом

$$H = \sum_{p\sigma} \epsilon_p a_{p\sigma}^+ a_{p\sigma} + \sum_{q\rho\sigma} v(q) a_{p\sigma}^+ a_{p-q\sigma} Q_q + H_1$$

Здесь ϵ_p - электронный ферми-жидкостный спектр, $v(q) = \frac{iqV(q)}{\sqrt{M}}$, где

$V(q)$ - матричный элемент экранированного электрон-фононного взаимодействия, M - масса иона, Q_q - нормальная фононная переменная, H_1 - энергия колебаний решетки, которая будет рассмотрена в следующем разделе.

При описании электронной части гамильтониана мы не рассматриваем прямого кулоновского взаимодействия между электронами, полагая, что оно может быть учтено стандартными методами [8] с помощью перенормировки постоянной электрон-фононного взаимодействия λ на величину μ^* .

В приближении Мигдала-Элиашберга, обобщённом на случай произвольных колебаний решётки (см. [9]), для постоянной электрон-фононного взаимодействия λ , определяющей температуру сверхпроводящего перехода в системе, получаем обычное выражение:

$$\lambda = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{\alpha^2 F(\omega)}{\omega} \quad (1)$$

где

$$\alpha^2 F(\omega) = \frac{1}{N(0)} \int_{s_f} \frac{d^2 p}{v_p} \int_{s_f} \frac{d^2 p'}{v_{p'}} \left[-\frac{1}{\pi} \text{Im} \langle \langle Q_q | Q_{-q} \rangle \rangle_{\omega+i\epsilon} \right] |v(p-p')|^2$$

Здесь $N(0)$ - плотность электронных состояний на поверхности ферми s_f , $v_p = |\nabla_p \epsilon_p|$ - групповая скорость электронов на поверхности ферми s_f , введена функция $\langle \langle Q_q | Q_{-q} \rangle \rangle_{\omega+i\epsilon} = -\chi_q(\omega)$, являющаяся фурье-образом временной запаздывающей функция Грина [10] и с точностью до знака совпадающая с комплексной фононной восприимчивостью.

Воспользовавшись дисперсионными соотношениями для функций Грина [10], после интегрирования по частоте в (1) получаем.

$$\lambda = \frac{1}{N(0)} \int_{S_f} \frac{d^2 p}{v_p} \int_{S_f} \frac{d^2 p'}{v_{p'}} \frac{|V(q)q|^2}{M} \chi_q(0), \quad (2)$$

где $q=p-p'$, $\chi_q(0) = -\langle\langle Q_q | Q_{-q} \rangle\rangle_{0, +i\epsilon}$ - статическая восприимчивость решётки.

В случае изотропной поверхности Ферми для оценки постоянной (2) можно использовать приближение Мак-миллана [11], согласно которому

$$\lambda = \frac{N(0)J^2}{M} \frac{1}{N} \sum_q \chi_q(0), \quad (3)$$

где J^2 - усредненный по поверхности Ферми квадрат абсолютного значения матричного элемента электрон-фононного взаимодействия $|V(q)q|^2$, а суммирование по q производится по зоне Бриллюэна.

Необходимо отметить, однако, что переход от выражения (2) к (3) приводит к изменению размерности интегрирования: от четырёхмерного в (2) к трёхмерному в (3). Поскольку мы интересуемся вкладом мягкой моды колебаний в постоянную λ , на этом необходимо остановиться более подробно.

Наличие мягких оптических мод колебаний с волновым вектором q_1 в фононном спектре приводит в общем случае к следующему виду статической восприимчивости в окрестности q_1 (см., например, [12]):

$$\chi_{q_1}(0) = \frac{1}{\Omega_0^2 + c^2(q - q_1)^2}, \quad (4)$$

где Ω_0^2 - зависящая от температуры щель в фононном спектре, которая обращается в нуль при температуре СФП.

В общем случае при $q_1 \neq 0$ матричный элемент $|V(q_1)q_1| \neq 0$, поэтому для вклада мягкой моды в λ получаем

$$\Delta\lambda \sim \int d^2 p d^2 p' \frac{1}{\Omega_0^2 + c^2(p - p' - q_1)^2},$$

где интегрирование проводится в окрестности q_1 .

Размерность участка интегрирования $q_1 = p - p'$, вообще говоря, одномерна, т.к. двумерные поверхности Ферми, сдвинутые на величину q_1 , пересекаются вдоль одномерной кривой. Переходя к новым переменным интегрирования, вдоль этой кривой (p_1) и перпендикулярно к ней (p_{tr}), получаем

$$\Delta\lambda \sim \int dp_1 d^3 p_{tr} \frac{1}{\Omega_0^2 + c^2(p - p' - q_1)^2} \sim \int dp_1 d^3 p_{tr} \frac{1}{\Omega_0^2 + c'^2 p_{tr}^2} \sim \int d^3 p_{tr} \frac{1}{\Omega_0^2 + c'^2 p_{tr}^2}.$$

Таким образом, усреднение по трёхмерной зоне Бриллюэна (3) приводит, качественно, к тем же результатам, что и двойное усреднение по поверхности Ферми (2).

Если считать выражение для восприимчивости (4) верным не только в окрестности q_1 , но и во всей зоне Бриллюэна (дебаевское приближение), то после подстановки его в (3) получаем

$$\lambda = \lambda_0 \left(1 - \frac{\Omega_0}{\omega_0} \arctg \frac{\omega_0}{\Omega_0} \right), \quad (5)$$

где $\lambda_0 = 3 \frac{N(0)J^2}{M\omega_0^2}$ - значение постоянной электрон-фононной связи при $\Omega_0 = 0$ и $\omega_0 = cq_0$ - дебаевский радиус.

Существенно, что выражение для λ (5) линейно по Ω_0 в первом порядке по Ω_0 . Этот эффект вклада мягкой моды в постоянную электрон-фононной связи является следствием трёхмерности интегрирования в выражении (3) и имеет место в общем случае, независимо от выбора конкретной модели СФП.

Для того чтобы правильно учесть вклад мягкой моды колебаний в выражение для температуры сверхпроводящего перехода, воспользуемся строгими результатами. Как можно показать, точное решение для T_c из линеаризованных уравнений Элиашберга имеет вид [13]:

$$T_c = \alpha_0 ((\lambda \langle \omega^2 \rangle)^{\frac{1}{2}})^{-1} \left[1 + \alpha_1 \frac{1}{\lambda \langle \omega^2 \rangle} \frac{\langle \omega^4 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle} + \frac{1}{(\lambda \langle \omega^2 \rangle)^2} \left(\alpha_{21} \frac{\langle \omega^6 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle} + \alpha_{22} \left(\frac{\langle \omega^4 \rangle}{\langle \omega^2 \rangle} \right)^2 \right) \right] + \dots \quad (6)$$

где $\langle g(\omega) \rangle = \frac{1}{\lambda} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega g(\omega) \frac{\alpha^2 F(\omega)}{\omega}$ - среднее по распределению $\frac{\alpha^2 F(\omega)}{\omega}$, при

этом величина, обратная постоянной электрон-фононной связи (1), играет роль нормировочного множителя.

Коэффициенты α зависят только от эффективной постоянной кулоновского взаимодействия μ^* , но не от формы спектра $\alpha^2 F(\omega)$. При этом разложение (6) сходится по λ при $\lambda \geq \lambda$, где λ - некоторая постоянная, зависящая от формы спектра и для металлических сверхпроводников обычно лежащая в пределах $1 < \lambda < 3$. Как можно строго показать, это выражение в принципе может быть аналитически продолжено в область малых λ , хотя на практике это довольно трудно осуществить.

Для изучения ИЭ (см. ниже раздел 4) важно выяснить, какую минимальную степень разложения по Ω_0 при малых Ω_0 содержит правая часть равенства (6). Несмотря на то, что выражение для λ (5) линейно по Ω_0 , разложение T_c по Ω_0 квадратично при малых Ω_0 .

Действительно, как легко видеть, λ входит в выражение (6) только в комбинации с множителем $\langle \omega^2 \rangle$, а в выражение для отношения моментов $\frac{\langle \omega^{2n} \rangle}{\langle \omega^2 \rangle}$ постоянная λ вообще не входит. При этом для средних значений (как показано выше на примере λ) может быть использовано приближение Мак-Миллана:

$$\langle g(\omega) \rangle = \frac{1}{\lambda} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega g(\omega) \frac{\alpha^2 F(\omega)}{\omega} = \frac{1}{\lambda} \frac{N(0)J^2}{M} \frac{1}{N} \sum_q \frac{g(\Omega_q)}{\Omega_q^2}$$

где Ω_q - перенормированный фононный спектр.

Отсюда находим, используя приближение Дебая:

$$\lambda \langle \omega^2 \rangle = \frac{N(0)J^2}{M},$$

$$\text{и} \quad \frac{\langle \omega^{2n} \rangle}{\langle \omega^2 \rangle} = \frac{3}{\omega_0^3} \int_0^{\omega_0} d\omega (\Omega_0^2 + \omega^2)^{n-1}.$$

Последнее выражение квадратично по Ω_0 при малых Ω_0 при $n \geq 2$, что доказывает наше утверждение.

Поскольку явного точного выражения для температуры сверхпроводящего перехода не существует, мы будем использовать предложенное Р.Комбескотом очень удачное аппроксимирующее выражение для T_c , которое обладает отмеченной выше качественной особенностью и даёт отклонение от точного значения в пределах 1% точности при $\mu^* = 0$ [14]:

$$1 = \int_0^{+\infty} d\omega \frac{\alpha^2 F(\omega)}{\omega} \ln \left[1 + \left(\frac{\omega}{aT_c} \right)^2 \right], \quad (7)$$

где $a = 3.9$.

В приближении Мак-Миллана уравнение на T_c (7) принимает вид:

$$1 = \frac{1}{2} \frac{N(0)J^2}{M} \frac{1}{N} \sum_q \frac{1}{\Omega_q^2} \ln \left[1 + \left(\frac{\Omega_q}{aT_c} \right)^2 \right]. \quad (8)$$

Таким образом, для дальнейшего исследования необходимо получить конкретное выражение квазифононного спектра Ω_q в рамках точно решаемой модели СФП.

3. Структурный фазовый переход в решётке

Рассмотрим модель СФП, описываемую решёточным гамильтонианом [16]:

$$H_1 = \sum_1 \frac{1}{2M} P_1^2 + U(\{X_1\}), \quad (9)$$

где $U(\{X_1\})$ - потенциальная энергия ионов решётки:

$$U(\{X_1\}) = \sum_1 -\frac{1}{2}AX_1^2 + \frac{1}{4} \sum_{11'} \Phi(1-1')(X_1 - X_{1'})^2 + \frac{B}{4} \frac{1}{N} \left(\sum_1 X_1^2 \right)^2. \quad (10)$$

Здесь X_1 и P_1 - соответственно локальные нормальные координата (ЛНК) и импульс для мягкой фононной моды колебаний в 1-ой примитивной ячейке, $A > 0$ - параметр, определяющий частоту неустойчивой в гармоническом приближении моды колебаний $\nu_0^2 = \frac{A}{M}$. B - постоянная, определяющая интенсивность ангармонического взаимодействия, M - эффективная масса, пропорциональная массе атома, $\Phi(1-1')$ - атомная силовая матрица второго порядка.

Сразу отметим, что в этой модели мягкая мода находится в центре зоны Бриллюэна ($\vec{q}=0$), однако с помощью выбора постоянных гармонического взаимодействия A и $\Phi(1-1')$ мы всегда можем добиться того, чтобы мягкая мода лежала на границе зоны Бриллюэна ($\vec{q} \neq 0$). Фактически эта процедура есть просто сдвиг фононных частот в \vec{q} -пространстве на величину \vec{q}_1 и на рассматриваемые физические свойства системы она не влияет. Поэтому мы будем использовать эту модель СФП, подразумевая, что полученные результаты справедливы для мягкой моды, лежащей на границе зоны Бриллюэна.

Для вычисления спектра квазифононных возбуждений Ω_q воспользуемся методом самосогласованных фононов [15]. В соответствии с этим методом вычисляем среднее значение потенциальной энергии по аппроксимирующему гамильтониану с псевдогармоническим взаимодействием, представляя локальную нормальную координату в виде

$$X_1 = x_1 + \langle X_1 \rangle = x_1 + c, \quad (11)$$

где x_1 - оператор смещения ЛНК из положения равновесия, а среднее значение ЛНК $\langle X_1 \rangle = c$ не зависит от 1, если волновой вектор для мягкой моды равен нулю.

Подставляя оператор (11) в выражение (10) и проводя усреднение по псевдогармоническому гамильтониану, получаем для среднего значения потенциальной энергии решётки:

$$\langle U \rangle = \frac{1}{2} \sum_{11'} (\Phi(0) - A + Bc^2) \langle x_1 x_{1'} \rangle \delta_{11'} + \sum_{11'} \left(-\frac{1}{2} \Phi(1-1') + \frac{Bc^2}{N} \right) \langle x_1 x_{1'} \rangle + \frac{B1}{4N} \left(\sum_1 \langle x_1^2 \rangle \right)^2 + \frac{B1}{2N} \sum_{11'} \langle x_1 x_{1'} \rangle^2 + N \left(-\frac{A}{2} c^2 + \frac{B}{4} c^4 \right), \quad (12)$$

где обозначено $\Phi(0) = \Phi(\vec{q}=0) = \sum_1 \Phi(1)$. При вычислении средних от слагаемых четвёртой степени мы воспользовались теоремой Вика.

Силовую матрицу псевдогармонического взаимодействия находим стандартным способом:

$$\tilde{\Phi}(1-1') = 2 \frac{\delta \langle U \rangle}{\delta \langle x_1 x_{1'} \rangle} = (\Phi(0) - A + B(c^2 + \langle x_1^2 \rangle)) \delta_{11'} - \Phi(1-1') + 2 \frac{B}{N} (c^2 + \langle x_1 x_{1'} \rangle). \quad (13)$$

Учитывая, что в статистическом пределе $N \rightarrow \infty$ и $\frac{N}{V} = \text{const}$ последнее слагаемое асимптотически равно нулю, а $\langle x_1^2 \rangle = \langle x^2 \rangle$ не зависит в силу трансляционной инвариантности от номера ячейки 1, получаем

$$\tilde{\Phi}(1-1') = (\Phi(0) - A + B(c^2 + \langle x^2 \rangle)) \delta_{11'} - \Phi(1-1'). \quad (14)$$

Отсюда находим спектр квазигармонических возбуждений:

$$\Omega_q^2 = \frac{\tilde{\Phi}(q)}{M} = -\frac{A}{M} + \frac{\Phi(0) - \Phi(q)}{M} + \frac{B}{M} (c^2 + \langle x^2 \rangle) \approx \Omega_0^2 + c^2 q^2,$$

где $\Phi(q) = \sum_1 \Phi(1) e^{-iq_1}$ и

$$\Omega_0^2 = \Omega_q^2(q=0) = -\frac{A}{M} + \frac{B}{M} (c^2 + \langle x^2 \rangle) \quad (15)$$

- квадрат мягкой моды колебаний.

Параметр порядка c определяется из условия минимума свободной энергии. Пренебрегая асимптотически малыми членами, получаем

$$\frac{\partial F^{aPP}}{\partial c} = \frac{\partial \langle U \rangle}{\partial c} = Nc (B(c^2 + \langle x^2 \rangle) - A) = 0.$$

Используя условие устойчивости $\frac{\partial^2 F^{aPP}}{\partial^2 c} = \frac{\partial^2 \langle U \rangle}{\partial^2 c} > 0$, находим

$$c=0, \quad \text{при } \langle x^2 \rangle > \frac{A}{B} \quad (16)$$

$$c = \frac{A}{B} - \langle x^2 \rangle, \quad \text{при } \langle x^2 \rangle < \frac{A}{B}.$$

Таким образом, условие $\langle x^2 \rangle = \frac{A}{B}$ определяет температуру СФП T_0 , ниже которой среднее значение ЛНК отлично от нуля.

Из уравнений (15) и (16) получаем самосогласованное уравнение для мягкой моды в высокосимметричной фазе ($c=0$), учитывая, что $\langle x^2 \rangle = \frac{1}{M} \sum_q \langle Q_{-q} Q_q \rangle$:

$$\Omega_0^2 + \frac{A}{M} = \frac{B}{M^2} \frac{1}{N} \sum_q \frac{1}{2\Omega_q} \text{cth} \frac{\Omega_q}{2T} \quad (17)$$

При температуре СФП T_0 мягкая мода (15), которая есть щель в фононном спектре колебаний решетки, обращается в нуль и в низкосимметричной фазе ($c \neq 0$) при всех $T < T_0$ остается равной 0 за счёт отличного от нуля среднего значения смещения ионов, что является аномальным свойством рассматриваемой модели СФП, возникающим за счёт асимптотической малости последнего слагаемого в выражении (13).

Статическая восприимчивость связана со спектром перенормированных фононных возбуждений стандартным соотношением

$$\chi_q(\omega=0) = -\langle \langle Q_q | Q_{-q} \rangle \rangle_{\omega=0} = \frac{1}{\Omega_q^2} \approx \frac{1}{\Omega_0^2 + c^2 q^2},$$

где последнее равенство справедливо в дебаевском приближении.

Как можно показать более строго, полученное решение является асимптотически точным для рассматриваемой модели [5, 6].

Поскольку уравнение (17) не решается аналитически во всей обла-

сти температур, рассмотрим его в высокотемпературном и низкотемпературном пределах.

В первом случае $\frac{\omega_0}{T} \ll 1$ (здесь $\omega_0 = cq_0 = \sqrt{\frac{\Phi(0)}{M}}$ - частота Дебая, q_0 - дебаевский радиус) уравнение (17) записывается в следующем виде:

$$M\Omega_0^2 + A = B \frac{T}{N} \sum_q \frac{1}{M\Omega_0^2 + \Phi(0) - \Phi(q)} \quad (18)$$

Из (18) получаем значение критической температуры СФП:

$$T_0 = \frac{A\omega_0^2 M}{3B} \quad (19)$$

И в наиболее интересном для нас случае низких температур $\frac{\omega_0}{T} \exp\left(-\frac{\omega_0}{T}\right) \ll 1$ получаем в дебаевском приближении при учете членов порядка не выше Ω_0^2 :

$$\left(g + \frac{1}{2} \ln \frac{\omega_0}{T}\right) \Omega_0^2 + \pi T \Omega_0 - \frac{\pi^2}{3} (T^2 - T_0^2) = 0, \quad (20)$$

где $g = \frac{2M^2}{3B} \omega_0^2$ и квадрат температуры СФП

$$T_0^2 = \frac{\omega_0}{\pi} \left(2 \frac{A}{B} M \omega_0 - \frac{3}{2}\right) \quad (21)$$

Решая квадратное уравнение (20), получаем явное выражение для щели в фононном спектре:

$$\Omega_0 = \frac{\pi T}{2P} \left[\left(1 + \frac{4}{3} \left(1 - \frac{T_0^2}{T^2} \right) P \right)^{\frac{1}{2}} - 1 \right], \quad (22)$$

где обозначено $P = g + \frac{1}{2} \ln \frac{\omega_0}{T}$.

В окрестности T_0 для статической восприимчивости решетки имеем:

$$\chi^{-1}(q=0, \omega=0) = \Omega_0^2 \sim \tau^\gamma$$

Здесь введена "безразмерная" температура $\tau = \frac{T - T_0}{T_0}$ и критический индекс γ .

Для рассматриваемой модели в области критических флуктуаций

$\gamma=2$, когда

$$\frac{4}{3} \left(g + \frac{1}{2} \ln \frac{\omega_0}{T_0} \right) \frac{T_0^2 - T^2}{T^2} \ll 1.$$

4. Влияние критических флуктуаций на изотопический эффект

Обратимся к вычислению температуры сверхпроводящего перехода, воспользовавшись при этом (8). Используя дебаевское приближение для фононного спектра, запишем (8) в виде

$$\frac{2}{\lambda} \frac{1}{\omega_0} \int_0^{\omega_0} d\omega \frac{\omega^2}{\Omega_0^2 + \omega^2} \ln \left[1 + \frac{\Omega_0^2 + \omega^2}{a^2 T_c^2} \right]. \quad (23)$$

Поскольку этот интеграл точно не берётся, ограничимся в расчётах разложением правой части до Ω_0^2 . Таким образом находим

$$f(\gamma) + \left(\frac{\Omega_0}{\omega_0} \right)^2 g(\gamma) = 2 \left(1 + \frac{1}{\lambda} \right), \quad (24)$$

где обозначено

$$y = \frac{\omega_0}{a T_c},$$

$$f(\gamma) = \ln(1 + y^2) + \frac{2}{\gamma} \arctg(\gamma),$$

$$g(\gamma) = y \arctg(\gamma) - \ln(1 + y^2).$$

Соотношение (24) представляет собой уравнение на температуру T_c , которая входит в это уравнение не только через величину y , но и через зависящую от температуры мягкую моду Ω_0 . Это уравнение позволяет численно определить T_c при заданных параметрах решётки. Будем полагать, что силовая постоянная A зависит от концентрации примесных атомов x , как в случае соединений допированного купрата лантана: $A(x) = A_0(1 - 4x)$ (см. обсуждение в [16]). При некотором значении x температуры сверхпроводящего и структурного переходов совпадают. Окрестность точки пересечения $T_0(x)$ и $T_c(x)$ на фазовой T - x диаграмме и будет областью критических флуктуаций, поскольку в этой точке $\Omega_0 = 0$ и T_c достигает своего максимального значения (см. рис.1). Это видно непосредственно как из уравнения (24) (пос-

кольку $g(\gamma) > 0$, а $f(\gamma) \geq 2$ - возрастающая функция), так и из физических соображений (температура сверхпроводящего перехода максимальна, когда решёточная восприимчивость максимальна).

Рассмотрим изотопический эффект. Хотя уравнение (24) решается только численно, тем не менее аналитическое выражение для ИЭ может быть получено с помощью дифференцирования его по массе. Рассматривая фононную щель как функцию $\Omega_0 = \Omega_0(T_c, T_0(M), M)$, где зависимость от массы через температуру структурного перехода выделена особо, получаем для фактора ИЭ:

$$\alpha = \frac{\frac{1}{2} - \frac{k}{\omega_0^2} \left(M \frac{\partial \Omega_0^2}{\partial M} - T_0 \frac{\partial \Omega_0^2}{\partial T_0} \right) \epsilon}{1 - \frac{k}{\omega_0^2} T_c \frac{\partial \Omega_0^2}{\partial T_c}}, \quad (25)$$

где $k = \frac{g(\gamma)}{y} \left(\frac{\partial f}{\partial y} - \frac{\partial g}{\partial y} \frac{\Omega_0^2}{\omega_0^2} \right)^{-1}$ и $\epsilon = -\frac{\partial \ln T_0}{\partial \ln M}$ - ИЭ для температуры СФП. При этом y и T_c - решение уравнения (24).

Рассмотрим ИЭ в области критических флуктуаций, где можно положить $\Omega_0^2 \sim \tau^\gamma$, $\tau = \frac{T_c}{T_0} - 1$ - приведённая температура.

Если $\gamma < 1$, то производные квадрата мягкой моды по температуре неограниченно возрастают:

$$\frac{\partial \Omega_0^2}{\partial T_c} \sim \tau^{\gamma-1} \frac{\partial \tau}{\partial T_c} \rightarrow \infty \text{ и } \frac{\partial \Omega_0^2}{\partial T_0} \sim \tau^{\gamma-1} \frac{\partial \tau}{\partial T_0} \rightarrow \infty \text{ при } \tau \rightarrow 0 \text{ (при этом } \Omega_0 \rightarrow 0),$$

а производная по массе $\frac{\partial \Omega_0^2}{\partial M} \rightarrow 0$ при $\tau \rightarrow 0$. Поэтому при $T_c = T_0$

$$\alpha = -\epsilon \left(T_0 \frac{\partial \tau}{\partial T_0} \right) / \left(T_c \frac{\partial \tau}{\partial T_c} \right) = \epsilon, \quad (26)$$

т.е. ИЭ для температуры сверхпроводящего перехода совпадает с ИЭ для структурного перехода. Заметим, что $\epsilon < 0$.

Если $\gamma > 1$, то все частные производные от Ω_0^2 стремятся к нулю при

$\Omega_0 \rightarrow 0$. Поэтому получаем при $T_c = T_0$ (напомним, что мы положили $\mu^* = 0$):

$$\alpha = \frac{1}{2}, \quad (27)$$

и, таким образом, в рассматриваемой точке фазовой диаграммы никаковлияния СФП на ИЭ не оказывает.

Полученный результат является общим и не зависит от выбранной модели для СФП. Для рассмотренной в разделе 3 модели с критическим индексом $\gamma=2$ выражение для ИЭ получим, подставляя в (25) значения частных производных от квадрата мягкой моды. Учитывая, что при выбранных параметрах модели (см. ниже) реализуется наиболее интересный случай низких температур $\frac{\omega_0}{T} \exp\left(-\frac{\omega_0}{T}\right) \ll 1$, находим из выражения (22):

$$M \frac{\partial \Omega_0^2}{\partial M} = \left(\frac{1}{2}g\right) \frac{\Omega_0^3}{D},$$

$$T_0 \frac{\partial \Omega_0^2}{\partial T_0} \varepsilon = -\frac{1}{2} \left(\frac{A}{A_{cr}} - 2 \right) \omega_0^2 \frac{\Omega_0}{D},$$

$$T_c \frac{\partial \Omega_0^2}{\partial T_c} = \frac{\Omega_0}{D} \left(\frac{4}{3} \pi^2 T_c^2 - 2\pi \Omega_0 T_c + \Omega_0^2 \right).$$

Здесь обозначено $D = 2\Omega_0 P + \pi T_c$, и $A_{cr} = \frac{3}{4} \frac{B}{M\omega_0}$ - значение гармонической постоянной, когда $T_0 = 0$.

Для численных оценок примем следующие значения параметров модели, которые можно сопоставить с экспериментальными данными для купрата лантана $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ [16]:

$$\omega_0 = 120K, E_0 = \frac{A^2}{4B} = 0.1eV, M = 16 \text{ а.е.м.}, N(0)J^2 = 1eV/A^2.$$

* Если выражение для $T_0^2 < 0$ (при $A < A_{cr}$), то подразумевается, что

$$T_0 \frac{\partial \Omega_0^2}{\partial T_0} \varepsilon = \frac{\partial \Omega_0^2}{\partial T_0^2} \frac{1}{2} \frac{\partial T_0^2}{\partial \ln M}.$$

Здесь E_0 - высота потенциального барьера для двуяного ангармонического потенциала в недопированном купрате лантана. Предполагается, что от примеси зависит только силовая постоянная $A(x)$. Значение $A_0 = A(0)$ и B определяются из численного значения E_0 и уравнения (19) при известной из эксперимента температуре СФП $T_0(x=0) = 530K$.

Графики зависимости T_c , T_0 и α от концентрации примеси x приведены на рис.1 и 2. Видно, что T_c достигает максимального своего значения, когда $T_c = T_0$, а α при этом, наоборот, минимально в этой точке фазовой диаграммы.

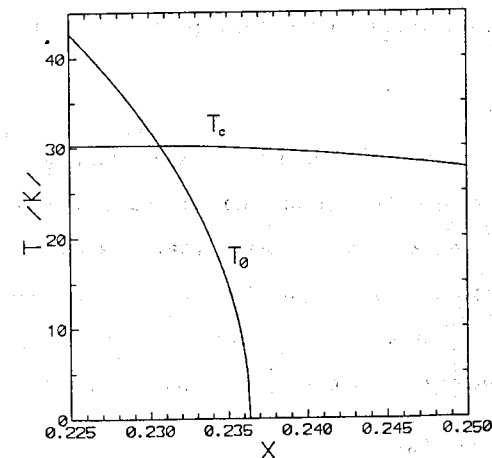


Рис.1. Фазовая T-x диаграмма для рассматриваемой модели. Верхняя кривая - температура структурного перехода, нижняя - сверхпроводящего в зависимости от концентрации примеси x.

Обсудим полученные результаты. В рамках данной модели СФП критический индекс $\gamma=2$ и влияние критических флуктуаций не столь существенно, как в случае моделей, где $\gamma < 1$.

Отметим, что в работах [3,4] мы использовали при расчётах динамики решётки приближение среднего поля, которое даёт классический критический индекс $\gamma=1$. Этим обусловлено отличие приведённых там

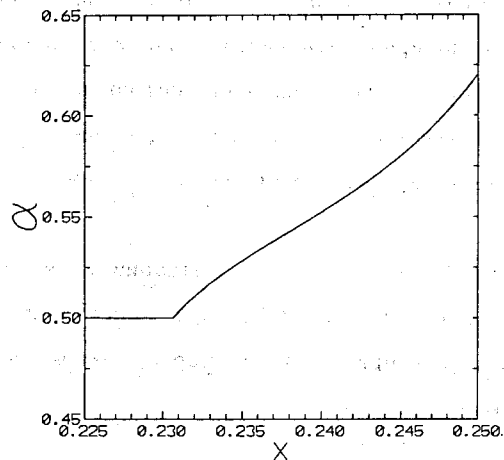


Рис.2. Зависимость изотопического фактора α от концентрации примеси x .

результатов от полученных в этой главе. Как видно из рис.2, изотопический фактор α возрастает в высокотемпературной фазе, превышая значение $\frac{1}{2}$. Заметим также, что по мере удаления от температуры СФП значение мягкой моды Ω_0 быстро растёт, и, как показывают численные расчёты, становится сравнимым с дебаевской частотой ω_0 уже при $x \geq 0.239$. При этом нарушается сделанное при выводе соотношений (20) и (24) предположение $\frac{\Omega_0}{\omega_0} \ll 1$, так что для корректных вычислений в этой области концентраций (что не являлось нашей целью) необходимо использовать другие приближения. Из физических соображений следует, что по мере удаления от СФП на Т-х диаграмме изотопический фактор будет медленно стремиться к $\frac{1}{2}$ (см. [3,4]).

В заключение отметим, что в экспериментах невозможно сколь угодно малое изменение массы изотопа, что фактически подразумевается при расчёте изотопического фактора как $\alpha = -\frac{\partial \ln T_c}{\partial \ln M}$. При этом на практике изотопический фактор при замене атомов кислорода $^{16}\text{O} \rightarrow ^{18}\text{O}$ рассчитывается как

$$\alpha = -\frac{M}{T_c(^{16}\text{O})} \frac{T_c(^{18}\text{O}) - T_c(^{16}\text{O})}{\Delta M} = -8 \frac{T_c(^{18}\text{O}) - T_c(^{16}\text{O})}{T_c(^{16}\text{O})}$$

В этом случае, если при изотопической замене приращение температуры сверхпроводящего перехода превышает характерный размер области критических флуктуаций, то соотношения (26) и (27) могут и не выполняться.

Автор хотел бы выразить благодарность профессору Н.М.Плакиде за многочисленные обсуждения и поддержку.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Frank J.P. in *Physical Properties of High-Temperature Superconductors*, v.4, ed. by D.M.Ginsberg (World Scientific, Singapore, 1994), p.189.
- [2] Plakida N.M., Aksenov V.L. and Drechsler S.L. *Europhys.Lett.* **4**, 1309-1314 (1987).
- [3] Плакида Н.М., Чёрный А.Ю. *Сверхпроводимость ФХТ* **4**, 1493-1502 (1991).
- [4] Cherny A.Yu. and Galbaatar T. *Physica C* **210**, 35-41 (1993).
- [5] Плакида Н.М., Тончев Н.С. *ТМФ* **63**, 270-279 (1985).
- [6] Плакида Н.М., Тончев Н.С., препринт ОИЯИ Р17-85-400, Дубна (1985).
- [7] Плакида Н.М., Чёрный А.Ю., *ТМФ* **84**, 120-127 (1990).
- [8] Боголюбов Н.Н., Толмачев В.В., Ширков Д.В. *Новый метод в теории сверхпроводимости* (М., Наука, 1977).
- [9] Вуйич Г.М., Петру З.К., Плакида Н.М. *ТМФ* **46**, 91-97 (1981).
- [10] Зубарев Д.Н. *Неравновесная статистическая термодинамика* (М., Наука, 1971).
- [11] McMillan W.L. *Phys.Rev.* **167**, 331-344 (1968).
- [12] Брус А.Д., Каули Р.А. *Структурные фазовые переходы* (М., Мир, 1984).

- [13] Allen P.B. and Mitrović B., in *Solid State Physics*, v.37, ed. by Seitz F. and Turnbull D. (Academic, N.Y., 1982) p.1-92.
- [14] R.Combescot, *Труды международного семинара по ВТСП*, Дубна, 3-6 июля, 1990 (Изд. ОИЯИ Е-17-90-472, Дубна, 1990) стр. 68-82.
- [15] Н.М.Плакида, в сб. *Статистическая физика и квантовая теория поля*, под ред. Н.Н.Боголюбова (М., Наука, 1973) стр.205-240.
- [16] Flax S., Plakida N.M. and Aksenov V.L. *Int.J.Mod.Phys. B* 4, 1955-1973 (1990).

Рукопись поступила в издательский отдел
24 апреля 1995 года.