

Академик АН КазССР М. И. КОРСУНСКИЙ, Я. Е. ГЕНКИН,
В. Г. ЗАВОДИНСКИЙ

О КРИТИЧЕСКОЙ ТЕМПЕРАТУРЕ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ РЯДА ИТТРИЙ — ПАЛЛАДИЙ

В работе ⁽¹⁾ сделана оценка относительных значений параметров сверхпроводящего состояния некоторых металлов ряда с использованием модели КЛЮ ⁽²⁾, подразумевающей разделение валентных электронов на коллективизированные, локально связующие и остовные. Успешное применение модели КЛЮ к расчету фононного спектра ниобия ⁽³⁾ привело к возможности оценки абсолютных значений параметров сверхпроводимости, что и явилось предметом настоящей работы.

Критическая температура T_c связана с параметром электронфоонного взаимодействия λ , согласно ⁽⁴⁾, следующим образом:

$$T_c = \frac{\theta}{1,45} \exp \left[-\frac{1,04 (1 + \lambda)}{\lambda - \mu^* (1 + 0,62\lambda)} \right], \quad (1)$$

где θ — характеристическая температура, μ^* — параметр кулоновского отталкивания. При этом

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

где $N(0)$ — плотность электронных состояний с одинаковым направлением спина на поверхности Ферми, $\langle \omega^2 \rangle^{1/2}$ — средняя фононная частота, M — масса иона, $\langle g^2 \rangle$ — усредненный по поверхности Ферми матричный элемент рассеяния электрона на смещенном ионе.

Как и в ⁽¹⁾, для вычисления λ в настоящей работе использовано приближение свободных электронов, которое дает

$$N(0) = \frac{mk_0}{2\pi^2 \hbar^2}, \quad g^2 = \frac{U^2(q)}{\varepsilon^2(q) v_{\text{ат}}}, \quad \varepsilon(q) \simeq 1 + \frac{8\pi e^2 N(0)}{q^2},$$

где $\hbar k_0$ — импульс Ферми, U — потенциал иона, образованный точечным остовом и локально связующими электронами. Плотность локально связующих электронов, окружающих остов, принята того же вида, что и в ⁽³⁾,

$$\rho(r) = Ar^2 e^{-\beta r},$$

где A — нормировочная константа, β выбирается так, чтобы максимум плотности находился между ближайшими соседями. При этом потенциал

$$U(q) = -\frac{4\pi e^2 Z}{q^2} + \frac{4\pi e^2 (Z - n)}{q^2} \frac{\beta^6 (\beta^2 - q^2)}{(\beta^2 + q^2)^4}, \quad (3)$$

где n — число коллективизированных электронов на атом, Z — сумма чисел коллективизированных и локально связующих электронов.

Усреднение по поверхности Ферми произведено, как и в ⁽⁵⁾, заменой переменных $q^2 = 4k_0^2 x^2$ и интегрированием по x^2 . В пренебрежении процессами переброса электрон-фононное взаимодействие обрывается при не-

котором $q_0 \simeq q_d$, где q_d — дебаевский вектор, поэтому

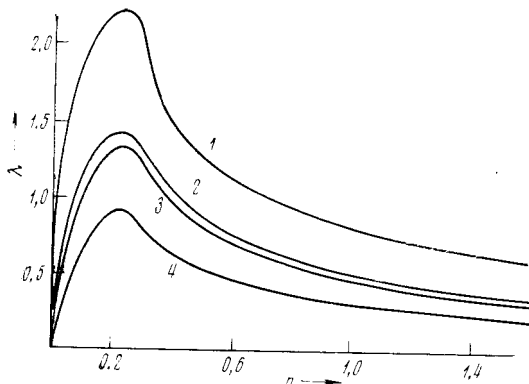
$$\lambda = \frac{2e^4 m}{M \hbar^2 k_0 \langle \omega^2 \rangle v_{\text{ат}}} \int_0^{x_0^2} \frac{Z^2(x^2) x^2 dx^2}{(a^2 + x^2)^2}, \quad (4)$$

где

$$Z(x^2) = Z - \frac{(Z-n)b^6(b^2-x^2)}{(b^2+x^2)^4},$$

$$b^2 = \frac{\beta^2}{4k_0^2}, \quad a^2 = \frac{8\pi e^2 N(0)}{4k_0^2}, \quad x_0^2 = (4n)^{-2/3}.$$

Так как функция $Z^2(x^2)$ меняется значительно медленнее, чем остальные члены подынтегрального выражения, ее можно заменить средним значением



$$\langle Z^2(x^2) \rangle = \frac{1}{x_0^2} \int_0^{x_0^2} Z^2(x^2) dx^2.$$

Тогда

$$\frac{e^4 n \langle Z^2(x^2) \rangle}{M \hbar^2 k_0 \langle \omega^2 \rangle v_{\text{ат}}} \left[\ln \frac{a^2 + x_0^2}{a^2} - \frac{x_0^2}{a^2 + x_0^2} \right]. \quad (5)$$

Рис. 1. Зависимость параметра электрон-фононного взаимодействия λ от числа n коллективизированных электронов: 1 — Nb, 2 — Zr, 3 — Mo, 4 — Ru

о величинах $\langle \omega^2 \rangle$ отсутствуют, принято $\langle \omega^2 \rangle^{1/2} \simeq 0,8\omega_d$, что соответствует дебаевскому приближению.

Величины λ вычислены для Zr, Nb, Mo и Ru по формуле (5) как функции числа коллективизированных электронов n ; результаты приведены на рис. 1. Оказалось, что величины λ проходят через максимум в точке $n = 0,25$ при прочих постоянных параметрах. Немонотонная (с максимумом) зависимость T_c от числа коллективизированных электронов наблюдалась экспериментально в соединениях переходных металлов ⁽⁶⁾; возможность такой зависимости для обычных сверхпроводников обсуждалась в работе ⁽⁷⁾.

В табл. 1 сопоставлены значения $\lambda_{\text{расч}}$ (рассчитанные согласно кривым, изображенным на рис. 1, для чисел коллективизированных электронов n , полученных в ^(2, 8) на основе рентгеноспектральных данных) со значе-

Т а б л и ц а 1

Параметры сверхпроводимости и числа коллективизированных электронов для Zr, Nb, Mo и Ru

Металл	$T_c, ^\circ\text{K}$	$\langle \omega^2 \rangle^{1/2}, ^\circ\text{K}$	n	$\lambda_{\text{расч}}$	$\lambda_{\text{эксп}}$	λ (*)
Zr	0,55	202	$1,4 \pm 0,2$	0,38—0,43	0,41	0,37
Nb	9,22	230	$1,2 \pm 0,2$	0,66—0,81	0,82	0,47
Mo	0,92	310	$1,0 \pm 0,4$	0,36—0,70	0,41	0,38
Ru	0,49	480	$0,8 \pm 0,2$	0,32—0,46	0,38	—

ниями $\lambda_{\text{эксп}}$, вычисленными в ⁽⁴⁾ по формуле (1) с использованием экспериментальных значений T_c . Там же приведены результаты Морела и Андерсона ⁽⁹⁾, вычисленные с использованием данных об электронной теплоемкости в предположении, что все электроны коллективизированы. Сравнение показывает, что рассчитанные в настоящей работе величины согласуются с экспериментальными в целом лучше, чем результаты работы ⁽⁹⁾.

Институт ядерной физики
Академии наук КазССР
Алма-Ата

Поступило
20 I 1972

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

¹ М. И. Корсунский, Я. Е. Генкин, В. Г. Заводинский, ФТТ, **13**, 1241 (1971). ² М. И. Корсунский, Я. Е. Генкин, ДАН, **142**, 1276 (1962); Матер. международн. симпозиума по рентгеновским спектрам и электронной структуре вещества, Киев, **1**, 1969, стр. 138. ³ М. И. Корсунский, Я. Е. Генкин и др., ФТТ, **13**, 2138 (1971). ⁴ W. L. McMillan, Phys. Rev., **167**, 331 (1968). ⁵ D. Pines, Phys. Rev., **109**, 280 (1958). ⁶ А. Н. Головашкин, Н. С. Левченко и др., Письма ЖЭТФ, **10**, 545 (1969). ⁷ В. З. Кресин, ФТТ, **13**, 2937 (1971). ⁸ М. И. Корсунский, Я. Е. Генкин, Сборн. Электронная структура переходных металлов и их сплавов, Киев, 1968, стр. 21. ⁹ P. Morel, P. W. Anderson, Phys. Rev., **125**, 1263 (1962).