Краткие сообщения по физике № 6 июнь 1971

СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ ПОД ДАВЛЕНИЕМ

Д. И. Хомский

Исследование сверхпроводников под давлением служит одним из важных средств изучения самого явления сверхпроводимости и проверки справедливости тех или иных теоретических моделей. Поведение непереходных металлов под давлением удовлетворительно объясняется существующей теорией /1/, свойства же переходных металлов пока не объяснены. Цель настоящей заметки - рассмотреть этот вопрос исходя из экспериментальных данных и появившихся недавно теоретических рассмотрений.

Будем исходить из выражения для критической температуры /2,4/

$$T_c = \langle\theta^2\rangle^{1/2} \exp\left\{-(1+\lambda)/(\lambda-\mu^*)\right\}. \qquad (1)$$

(Малосущественные факторы в показателе экспоненты опущены). Здесь $\langle\theta^2\rangle^{1/2}$ - средняя частота фононов, μ^* - кулоновский псевдопотенциал, λ- константа электрон-фононного взаимодействия

$$\lambda = \frac{\eta}{M\langle\theta^2\rangle}, \qquad \eta = \frac{\hbar}{k}\left|\frac{dU}{dz}\right|^2 N_p(0). \qquad (2)$$

Величина $\frac{dU}{dz}$ в (2) - средний градиент атомного потенциала, а $N_p(0)$ - плотность состояний с угловым моментом $L = 1$ на поверхности Ферми (на 1 элементарную ячейку). Для непереходных металлов вместо $N_p(0)$ (2) входит полная плотность состояний $N(0)$.

Изменение T_c под давлением для непереходных металлов удается удовлетворительно объяснить /1/, считая, что преимущественно оно связано с изменением фононных частот $\langle \theta^2 \rangle$ в (1), (2), то-есть, считая параметр η в (2) постоянным. Качественно слабое изменение η под давлением можно понять, заметив, что $(dU/dz)^2 \sim U^2/r^2$ (r – межатомное расстояние). Плотность же состояний на ячейку N(0) в приближении почти свободных электронов

$$N(0) \sim p_F r^3 \sim r^2.$$

Таким образом, зависимость от параметра решетки в η выпадает.

В переходных металлах ситуация сложнее. Так, изменение $N_p(0)$ будет связано с относительным движением узкой d-зоны и широкой s-p-полосы: из-за высокой плотности состояний в d-зоне уровень Ферми будет двигаться вместе с ней; при этом изменение $N_p(0)$ может быть сильным и, вообще говоря, любого знака.

В другой модели /3/, исходящей из описания d-зоны в приближении сильной связи, параметр η оказывается пропорциональным ширине зоны или интегралу перехода между соседними центрами

$$\eta \sim j(r), \quad j(r) = \exp(-\varkappa r). \tag{3}$$

В этом случае при сжатии параметр η растет

$$\zeta = -\,d\ln\eta/d\ln v = \varkappa r/3. \tag{4}$$

В /3/ для $\varkappa$ взято значение $\varkappa \approx 0{,}9\ \text{Å}^{-1}$; если же воспользоваться правилами Слэтера /5,8/, то для d-орбит переходных металлов более разумно выбрать $\varkappa \approx 2{,}7\ \text{Å}^{-1}$. (Различие может быть обусловлено тем, что в /3/ величина $\varkappa$ определялась исходя из энергии связи металла; фактически же d-электроны ответственны только за некоторую часть полной энергии связи, и учет этого обстоятельства увеличит значение параметра $\varkappa$). Если принять $\varkappa = 2{,}7\ \text{Å}^{-1}$, то для ζ получается величина $\zeta \approx 2{,}3$.

Оба подхода не позволяют получить достоверную численную оценку изменения соответствующих параметров под давлением, и мы поступим здесь обратным образом: найдем значение $\zeta = -\, d\ln\eta / d\ln v$ для различных веществ, исходя из экспериментальных данных. Из (1) и (2)

$$\frac{d\ln T_c}{d\ln v} = -\gamma_G + \frac{\lambda(1+\mu^*)}{(\lambda-\mu^*)^2}(2\gamma_G - \zeta). \qquad (5)$$

Здесь $\gamma_G = -\, d\ln\langle\theta^2\rangle^{1/2}/d\ln v$ – постоянная Грюнайзена. Из выражения (5), зная экспериментальные значения величин $d\ln T_c/d\ln v$ /1/, γ_G /6/ и λ /4,2/, найдем ζ. Соответствующие результаты приведены в таблице.

Таблица 1

	Ti	V	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Ta	Re	Os	Ir	V_3Si
$\frac{d\ln T_c}{d\ln v}$	-15	-3,4	-21,6	0	4,0	4,6	0	1,2	5,1	11,8	18,5	-3,26
γ_G	1,33	1,55	0,82	1,74	1,65	2,75	3,25	1,82	2,68	2,02	2,40	(1,55)
λ	0,38	0,60	0,41	0,82	0,41	0,71	0,38	0,65	0,46	0,30	0,34	0,82
ζ	4,66	3,70	5,15	2,31	2,34	3,75	6,02	2,53	3,69	1,91	1,54	3,98
η	1,47	2,53	1,53	3,74	3,85			3,44	4,33			

При расчете бралось значение $\mu^* = 0{,}13$ (именно при таком выборе μ^* получены и сами значения λ /4/).

Результаты расчета показывают, прежде всего, что, не смотря на значительный разброс самих значений $d\ln T_c/d\ln v$ (отличающихся и знаком) значения ζ оказываются весьма близкими; они обнаруживают вполне регулярное изменение в периодической системе, хорошо коррелирующее с изменением самих величин η, а также с изменением атомного объема /6/. По порядку величины экспериментальные значения ζ неплохо согласуются с теоретическим результатом, полученным из (4) при нашем выборе параметра $\varkappa$. Расхождение больше для элементов в начале периода, что и естественно, так как именно для них применимость приближения сильной связи наиболее сомнительна.

Очень интересно, что подход Хопфилда /2/ позволяет связать результаты различных экспериментов. Так, в работе /2/ получена разумная оценка критической температуры для веществ типа V_3Si в предположении, что при переходе от V к V_3Si величина η растет, $\eta_{V_3Si} = 1{,}77\eta_V$. Объем же, приходящийся на атом V в V_3Si, на 15–20% меньше соответствующего объема в чистом V. Найденное отсюда изменение η при изменении атомного объема

$$\zeta = 0{,}77/(0{,}15 \div 0{,}20) = 3{,}8 \div 5{,}1$$

хорошо соответствует значению $\zeta = 3{,}7$, полученному выше из изменения T_c в V под давлением. Более того, ту же величину можно найти и из dT_c/dP для V_3Si /7/. Соответствующее значение, полученное в предположении $\gamma_{GV_3Si} = \gamma_{GV} = 1{,}55$, оказывается равным 3,98, опять в хорошем согласии с предыдущими результатами. Такое совпадение может служить добавочным доказательством справедливости основных положений теории Хопфилда, согласно которым сверхпроводимость переходных металлов в значительной мере определяется "атомными" характеристиками вещества.

Итак, можно сделать вывод, что в переходных металлах существенную роль играет увеличение параметра η в (2), (3) с давлением. Это, в противоположность изменению фононных частот, ведет к росту T_c; результирующее изменение T_c, в соответствии с (5), определяется соотношением этих двух факторов. Величина ζ, характеризующая первый эффект, примерно постоянна; ее поведение в периодической системе хорошо коррелирует с эмпирически найденными закономерностями изменения самого η /2,4/. В этом подходе удается также численно связать результаты различных экспериментов.

В заключение выражаю благодарность за полезное обсуждение В. Л. Гинзбургу, Ю. В. Копаеву и Е. Г. Максимову.

Поступила в редакцию
2 апреля 1971 г.

Литература

1. R. I. Boughton, J. L. Olsen, C. Palmy. Progress in Low Temp. Physics, vol. IV, p.163, 1970.
2. J. J. Hopfield. Phys. Rev., 186, 443 (1969).
3. S. Barišić, J. Labbé, J. Friedel. Phys. Rev. Lett., 25, 919 (1970).
4. W. L. McMillan. Phys. Rev., 167, 331 (1968).
5. П. Гомбаш. Проблема многих частиц в квантовой механике. ИЛ, Москва, 1953 г.
6. K. A. Geschneider. Solid State Phys., 16, 350 (1964).
7. T. F. Smith. Phys. Rev. Lett., 25, 1482 (1970).
8. P. W. Anderson. "Concepts in Solids". W. A. Benjamin, N.-Y.-Amsterdam, 1963.