Письма в ЖЭТФ, том 27, вып.11, стр. 612 – 615   *5 июня 1978 г.*

ОБ ОСОБЕННОСТЯХ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ "ЩЕЛИ" СВЕРХПРОВОДНИКА

В.И.Макаров

Предсказывается существование особенностей в энергетической "щели" $\Delta(\mathbf{p}, \omega)$ в $\mathbf{p}$, ω -пространстве. Показано, что в общем случае особенности в $\Delta(\mathbf{p}, \omega)$ связаны с изменением топологии линии пересечения поверхности Ферми изоэнергетическими поверхностями фононов.

Известно, что величина энергетической "щели" $\Delta(\mathbf{p}, \omega)$ как функция импульса $\mathbf{p}$ и частоты ω является обобщенным параметром порядка в сверхпроводнике, который находится из решения уравнений Элиашберга [1]. Экспериментально усредненное значение "щели" $\Delta(\omega) = \langle\Delta(\mathbf{p}, \omega)\rangle_{\mathbf{p}}$ обычно определяется по туннельным характеристикам поликристаллов [2]. Известно, что величина $\Delta(\omega)$ как функция параметра ω имеет особенности [2]. Предполагалось [3], что особенности в $\Delta(\omega)$ могут быть обусловлены только нерегулярной добавкой к плотности числа состояний фононов при изменении топологии изоэнергетических поверхностей фононов. Проявление различных изоэнергетических поверхностей фононов реализуется внешним параметром ω. Естественно, особенности $\Delta(\omega)$ являются следствием особенностей $\Delta(\mathbf{p}, \omega)$. В данной работе с единой точки зрения исследована природа возможных особенностей $\Delta(\mathbf{p}, \omega)$ в $\mathbf{p}$, ω-пространстве.

Как известно, величина $\Delta(\mathbf{p}, \omega) = \phi(\mathbf{p}, \omega)/Z(\mathbf{p}, \omega)$ находится из решения системы уравнений для функции $\phi(p, \omega)$ и параметра $Z(\mathbf{p}, \omega)$ [1, 3, 4]. Реальные и мнимые части функций $\phi(\mathbf{p}, \omega)$ и $Z(\mathbf{p}, \omega)$ удовлетворяют соотношению Коши [1, 3, 4]. Поэтому для определения особенностей в $\Delta(\mathbf{p}, \omega)$ достаточно определить их для мнимых частей $\phi(\mathbf{p}, \omega)$ и $Z(\mathbf{p}, \omega)$. В связи с тем, что структура особенностей в $\phi(\mathbf{p}, \omega)$ и $Z(\mathbf{p}, \omega)$ одинакова, мы ограничимся изучением их в $\phi(\mathbf{p}, \omega)$.

Пусть для определенности $\omega > 0$. Тогда, следуя работам [1, 3, 4], функцию $\mathrm{Im}\,\phi(\mathbf{p}, \omega)$ представим в виде

$$\mathrm{Im}\,\phi(\mathbf{p},\omega) = -\int_0^{\omega} d\omega'\,\mathrm{th}\frac{\omega'}{2T}\int\frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3}\,\mathrm{Im}\left\{\frac{\phi(\mathbf{p}',\omega')}{Q(\mathbf{p}',\omega')}\right\}\sum_{\lambda}|g^{\lambda}_{\mathbf{p},\mathbf{p}'}|^2\,\delta(\omega_{\lambda}(\mathbf{p}-\mathbf{p}') + \omega' - \omega), \qquad (1)$$

$$Q(\mathbf{p},\omega) = \omega^2 Z^2(\mathbf{p},\omega) - \phi^2(\mathbf{p},\omega) - \xi^2(\mathbf{p});\ \xi(\mathbf{p}) = \epsilon(\mathbf{p}) - \mu\,.$$

Здесь $\epsilon(\mathbf{p})$ – неперенормированная энергия электрона, g – параметр электрон-фононного взаимодействия, μ – химпотенциал, T – температура, λ – номер ветви фононного спектра. Для исследования особенностей в $\phi(\mathbf{p}, \omega)$ удобно перейти от интегрирования по dp' к интегрированию по переменным $\epsilon(\mathbf{p}')$, $\omega_\lambda(\mathbf{p}-\mathbf{p}')$ и $l^\lambda_{\mathbf{p}'}$ – длине контура линии пересечения поверхностей $\epsilon(\mathbf{p}')=\epsilon$ и $\omega_\lambda(\mathbf{p}-\mathbf{p}')=\omega$ (ниже для кратности "$l^\lambda_{\mathbf{p}'}$ – линия") и отказаться от обычно принятого в теории сверхпроводимости [1,3,4] перехода к переменным $\epsilon(\mathbf{p}')$ и любой ортогональной системе координат на поверхности $\epsilon(\mathbf{p}')=\epsilon$. В общем случае таких $l^\lambda_{\mathbf{p}'}$ – линий может быть несколько, вследствие многозначности и периодичности функции $\epsilon(\mathbf{p}')$ и $\omega_\lambda(\mathbf{p}-\mathbf{p}')$. Заметим, что длина $l^\lambda_{\mathbf{p}'}$ – линии зависит от внешних параметров $\mathbf{p}$ и ω. Выполнив интегрирование в формуле (1), получим выражение для $\mathrm{Im}\,\phi(\mathbf{p},\omega)$ в виде

$$\mathrm{Im}\,\phi(\mathbf{p},\omega)=\pi\int_0^\omega d\omega'\,\mathrm{th}\frac{\omega'}{2T}\sum_\lambda\int\frac{dl^\lambda_{\mathbf{p}'}\,|g^\lambda_{\mathbf{p}\,\mathbf{p}'}|^2}{|S^\lambda_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}(\omega-\omega')|\,|v_{\mathbf{p}'}(\mu)|\sin\theta_{\mathbf{p}'}}\times$$

$$\times\,\mathrm{Re}\left\{\frac{\Delta(\mathbf{p}',\omega')}{\sqrt{\omega^2-\Delta^2(\mathbf{p}',\omega')}}\right\}. \qquad (2)$$

Здесь $\theta_{\mathbf{p}'}$ – угол между векторами $\mathbf{v}_{\mathbf{p}'}(\epsilon)=\vec{\nabla}_{\mathbf{p}'}\epsilon(\mathbf{p}')|_{\epsilon(\mathbf{p})=\epsilon}$ и $\mathbf{S}^\lambda_{\mathbf{q}}(\omega)=\vec{\nabla}_{\mathbf{q}}\omega_\lambda(\mathbf{q})|_{\omega_\lambda(\mathbf{q})=\omega}$ зависящий от $\mathbf{p}$ и ω.

Из формулы (2) следует, что при изменении внешних параметров p, ω при $\mathbf{p}=\mathbf{p}^*$ и $\omega=\omega^*$, $\phi(\mathbf{p},\omega)$ может иметь следующие особенности: (1) в точках $\mathbf{p}'=\mathbf{p}'_o$, в которых $\sin\theta_{\mathbf{p}'_o}=0$, (2) в точках $\mathbf{p}'=\mathbf{p}^*-\mathbf{q}_k$, в которых $S^\lambda_{\mathbf{q}_k}(\omega^*)=0$. Геометрическая интерпретация этих случаев следующая. В первом случае поверхности $\epsilon(\mathbf{p}'_o)=\mu$ и $\omega_\lambda(\mathbf{p}^*-\mathbf{p}'_o)=\omega^*$ касаются в точке $\mathbf{p}'_o$. Это – аналог Коновской особенности [5 – 7]. Своеобразие Коновских особенностей в данном случае в том, что кроме выполнения обычного условия $q=2p^*_{\mathrm{extr}}$ необходимо, чтобы вектора $\mathbf{v}_{\mathbf{p}^*}(\mu)$ и $\mathbf{S}^\lambda_{\mathbf{q}}(\omega)$ были параллельны или антипараллельны ($2p^*_{\mathrm{extr}}$ – экстремальный диаметр поверхности Ферми). Эти условия выполняются, например, в случае $q_{\mathrm{extr}}=2p^*_{\mathrm{extr}}$ ($2q_{\mathrm{extr}}$ – экстремальный диаметр поверхности $\omega_\lambda(\mathbf{q})=\omega^*$). Во втором случае поверхность $\epsilon(\mathbf{p}')=\mu$ пересекает поверхность $\omega_\lambda(\mathbf{q})=\omega$ вблизи направлений $\mathbf{q}_k$, где происходит изменение топологии изоэнергетических поверхностей фононов. Топологические особенности фононного спектра проявляются, если поверхности $\epsilon(\mathbf{p}^*)=\mu$ и $\epsilon(\mathbf{p}^*-\mathbf{q}_k)=\mu$ имеют либо линию пересечения, либо точку касания.

В рассмотренных случаях $l^\lambda_{\mathbf{p}'}$ – линия в бесконечно малой окрестности точек $\mathbf{p}'=\mathbf{p}'_o$ и $\mathbf{p}'=\mathbf{p}^*-\mathbf{q}_k$ изменяет свою топологию. Наиболее характерные топологические изменения – $l^\lambda_{\mathbf{p}'}$ – линия либо вырождается в точку (эллиптическая точка), либо имеет точку самопересечения (гиперболическая точка).

Заметим, что особенности интеграла по $dl^\lambda_{\mathbf{p}'}$ подобны особенностям коэффициента поглощения ультразвука в металлах [7,8].

Вычисления показывают, что при $\mathbf{p} = \mathbf{p}^*$ и $\omega = \omega^*$ интеграл по $dl^\lambda_\mathbf{p}$, имеет особую часть, аналитическое выражение для которой существенно зависит от характера топологических особенностей $l^\lambda_\mathbf{p}$-линии. Заметим, что интегрирование по ω не снижает особенностей интеграла по $dl^\lambda_\mathbf{p}$, благодаря корневой сингулярности подынтегральной функции $[\omega^2 - \Delta^2(\mathbf{p}, \omega)]^{1/2}$, которая пропорциональна плотности числа состояний квазичастиц в сверхпроводнике.

Для того, чтобы установить вид особенности в $\operatorname{Im} \phi(\mathbf{p}, \omega)$, вычислим ее производную $\partial \operatorname{Im} \phi(\mathbf{p}, \omega)/\partial \omega$ при $T = 0$:

$$\frac{\partial \operatorname{Im} \phi(\mathbf{p}^*, \omega)}{\partial \omega} \sim \begin{cases} \pm[(\omega - \omega^*)^2 - \Delta^{*2}]^{-1/2}\, \theta[(\omega^* + \Delta^*) - \omega] \\ -[\Delta^{*2} - (\omega - \omega^*)^2]^{-1/2}\, \theta[\omega - (\omega^* + \Delta^*)] \end{cases}, \quad (3)$$

где величина $\Delta^* = \Delta(\mathbf{p}', \Delta(\mathbf{p}'))$ находится из решения уравнения $\omega^2 - \Delta^2(\mathbf{p}', \omega) = 0$, импульс $\mathbf{p}'$ принимает значения либо $\mathbf{p}_0'$, либо $\mathbf{p}^* - \mathbf{q}_k$. Для наглядности мы привели результаты расчета для двух случаев топологических особенностей $l^\lambda_\mathbf{p}$ – линии: верхняя строчка формулы (3) – эллиптическая точка ("+" – соответствует возникновению $l^\lambda_\mathbf{p}$-линии при увеличении ω, "–" – ее исчезновению), нижняя – гиперболическая точка. Из формулы (3) следует, что $\partial \operatorname{Im}\phi(\mathbf{p}, \omega)/\partial\omega$ имеет корневую особенность при $\omega = \omega^* + \Delta^*$. Используя соотношение Коши, можно показать, что особая часть $\partial \operatorname{Re} \phi(\mathbf{p}, \omega)/\partial \omega$ тоже имеет корневую особенность.

Таким образом, согласно проведенного рассмотрения, в общем случае величина $\Delta(\mathbf{p}, \omega)$ в $\mathbf{p}, \omega$-пространстве может иметь особенности, связанные с изменением топологии линии пересечения поверхности Ферми изоэнергетическими поверхностями фононов. Эти особенности [3] в $\Delta(\mathbf{p}, \omega)$ приводят к более широкому классу особенностей в $\Delta(\omega)$, чем предполагалось ранее. Заметим, что особенности в $\Delta(\omega)$, обусловленные изменением топологии $l^\lambda_\mathbf{p}$-линии вблизи q_k, имеют тот же вид, что и в работе [3] только в том случае, когда поверхности $\epsilon(\mathbf{p}) = \mu$ и $\epsilon(\mathbf{p} - \mathbf{q}_k) = \mu$ имеют линию пересечения.

Если в качестве внешнего параметра рассмотреть, кроме $\mathbf{p}$, ω, давление P, то при фазовых переходах $2\frac{1}{2}$ рода [9], в величине $\Delta(\mathbf{p}, \omega)$ в $\mathbf{p}, \omega$-пространстве возникнут особенности, обусловленные изменением топологии $l^\lambda_\mathbf{p}$-линии вблизи направлений $\mathbf{p}' = \mathbf{p}_k$, где происходит изменение топологии поверхности Ферми. Эти особенности будут наблюдаться при $P \approx P^*$ для всех значений $\mathbf{p}$, ω, удовлетворяющих условиям $\omega_\lambda(\mathbf{p} - \mathbf{p}_k) = \omega$ и $\epsilon(\mathbf{p}) = \mu$. Значение P^* соответствует давлению, когда $|\mu - \epsilon_k| \sim mS^2/2$, где m – масса электрона, S – скорость звука, $\epsilon_k = \epsilon(\mathbf{p}_k)$ – критическая энергия.

Рассмотренные особенности в энергетической "щели" $\Delta(\mathbf{p}, \omega)$, по-видимому, экспериментально можно наблюдать при исследовании туннельных эффектов в сверхпроводниках на монокристаллах. Наблюдение этих особенностей открывало бы новые возможности в исследовании особенностей как фононного, так и электронного спектров сверхпроводников.

Автор считает своим долгом поблагодарить А.А.Слуцкина за полезные советы и дискуссии, Л.П.Горькова, Н.В.Заварицкого, М.И.Каганова и Б.Г.Лазарева за обсуждение полученных результатов.

Физико-технический институт
Академии наук Украинской ССР

Поступила в редакцию
3 марта 1978 г.

Литература

[1] Г.М.Элиашберг. ЖЭТФ, 38, 966, 1960.

[2] W.L.McMillan, J.M.Rowell. Superconductivity 1, New York Marcel Dekker, 1969.

[3] D.J.Scalapino, P.W.Anderson. Phys. Rev., 133, 921, 1964.

[4] D.J.Scalapino, I.R.Schriffer, I.M.Wilkins. Phys. Rev., 148, 263, 1966.

[5] W.Kohn. Phys. Rev. Lett., 3, 393, 1959.

[6] А.М.Афанасьев, Ю.М.Каган. ЖЭТФ, 43, 1456, 1962.

[7] М.И.Каганов. А.И.Семененко. ЖЭТФ, 50, 630, 1966.

[8] В.Н.Давыдов, М.И.Каганов. Письма в ЖЭТФ, 16, 133, 1972; ЖЭТФ, 67, 1491, 1974.

[9] И.М.Лифшиц. ЖЭТФ, 38, 1569, 1960.