Письма в ЖЭТФ, том 21, вып. 11, стр. 656 – 660. *5 июня 1975 г.*

О ЗАВИСИМОСТИ ФОНОННЫХ ЧАСТОТ В Nb_3Sn И V_3Si ОТ ТЕМПЕРАТУРЫ

Л.П.Горьков, О.Н.Дорохов

В модели [3] с двумя пиками в плотности состояний, в предположении, что уровень Ферми находится вблизи одного из пиков, объяснено смягчение частот фононов, наблюдавшееся в [1,2] для широкого интервала волновых векторов. Близость образца к мартенситному переходу благоприятствует сверхпроводимости, поскольку она отражает близость химического потенциала к положению одного из пиков.

В [1, 2] проведены нейтронные измерения зависимости фононных частот в Nb_3Sn и V_3Si от температуры для направлений [110] и [100]. Оказалось, что имеет место заметное уменьшение фононных частот при понижении температуры, захватывающее весь интервал волновых векторов фононов, вплоть до границ зоны Бриллюэна. В нашей статье мы покажем, что это явление следует из теории, предложенной одним из авторов [3], а также обсудим связь его с явлением сверхпроводимости.

В [3] электронный терм для цепочек атомов переходных элементов, двукратно вырожденный в пренебрежении перекрытием между ортогональными цепочками [4], расщепляется и сдвигается при учете последнего. Спектр имеет вид

$$\epsilon = -T^* a \pm \sqrt{v^2 p_z^2 + T^{*2} c^2}, \tag{1}$$

где

$$a = \cos^2\phi + \cos^2\psi; \quad c = \cos^2\phi - \cos^2\psi + d_1(\epsilon_{xx} - \epsilon_{yy}) \tag{1'}$$

и $(\phi, \psi) = (p_x a/2, \ p_y a/2)$ для нитей вдоль z. Величина T^* характеризует перекрытие между цепочками. Потенциал d_1 описывает взаимодействие электронов с деформациями решетки. Спектр (1) приводит к тонкой структуре плотности состояний зоны $\nu(\epsilon)$ с двумя логарифмическими пиками при $\epsilon = 0$ и $\epsilon = -2T^*$:

$$\nu(\epsilon) = \nu(0) \frac{2}{\pi^2} \ln \frac{T^*}{|\Delta\epsilon|}, \tag{2}$$

где $\nu(0)$ – плотность состояний изолированных цепочек. Согласно [3], аномальными свойствами обладают кристаллы, у которых уровень химического потенциала попадает в окрестность одной из особенностей (2). По оценкам, интервал $2T^*$ отвечает изменению состава в несколько процентов. Прямым указанием в пользу существования двух пиков в плотности состояний является поведение T_c в Nb_3Sn при доппировании элементами IV и V групп [5]. Полученная зависимость имеет вид "кратера" вблизи стехиометрического Nb_3Sn.

Взаимодействие с фононами d_1 в (1.1) приводит к электронным поправкам в фононных частотах. Последние даются поляризационным оператором $\Pi(q, \omega)$, который может быть представлен в форме

$$\Pi = \frac{\text{const}}{4\pi i} \iiiint d\phi d\psi dp_z dz \,\mathrm{th}\frac{z}{2T} \frac{1}{2} \mathrm{Sp}\{\hat{\tau}_x \hat{G}^R(p_+, z)\hat{\tau}_x \hat{G}^R(p_-, z) - \text{к.с.}\} \tag{3}$$

$(p_\pm, \phi_\pm, \psi_\pm) = (p_z, \phi \pm q_x a/2, \psi \pm q_y a/2)$. Функция Грина электронов является матрицей, поскольку исходный терм [4] двукратно вырожден, и в матрицах Паули имеет вид

$$\hat{G}(p, z) = [(z + a)\hat{e} + vp_z\tau_y - c\tau_x][(z + a)^2 - v^2p_z^2 - c^2]^{-1}. \tag{4}$$

Выражение (3) аддитивно по трем ортогональным системам цепочек.

Основные особенности фононного спектра, связанные с добавками (3) от электронов, могут быть качественно объяснены уже в приближении изолированных цепочек (в (1) $T^* = 0$). Интегрирование в (3) по p имеет логарифмический характер и, при малой величине проекции волнового вектора фонона на направление цепочки $q_z v << T^*$, обрезается при

$vp \sim T$. Соответствующий вклад пропорционален $d_1^2 \nu(0) \ln \sim (E_F/T)$, обуславливая смягчение упругого модуля C_s. Наоборот, при $q_z v >> T^*$ интегрирование происходит до $q_z v$ и температурные добавки от этой цепочки малы [4] ($\sim (T/q_z v)^2$). Рассмотрим фонон с произвольным волновым вектором $q = \{q_x q_y q_z\}$. В этом случае "выключены" все цепочки. При малом q_z, но произвольных q_x, q_y нетривиальный вклад в (3) связан с нитями z. Наконец, если q направлен вдоль одной из главных осей, надо ожидать заметного температурного вклада от двух остальных цепочек. Специфический вид члена $d_1(\epsilon_{xx} - \epsilon_{yy})$ в (1), обусловленный требованиями симметрии, приводит к дальнейшим ограничениям на тип решеточных колебаний, где проявляются описанные эффекты.

Величина критических значений проекции волнового вектора q_{crit} на ту или иную ось, при которой происходит "выключение" вклада от соответствующей цепочки, может быть указана довольно точно, используя положение "уступа" в спектре поперечных фононов, обнаруженного в [2]

$$q_{crit} \approx 0{,}1(2\pi/a). \tag{5}$$

Общая ситуация в V_3Si и Nb_3Sn, видимо, отвечает случаю $T << T^*$. В этом пределе (3) может быть разложено по степеням T/T^*, причем естественно, что основной вклад связан с низколежащими частями энергетического спектра. Если химический потенциал близок к $\epsilon = 0$, т. е. к положению одной из особенностей (2), температурные добавки в (3) определяются, в основном, первым из корней (1) в условиях, когда либо $\cos\phi$, либо $\cos\psi$ малы (т. е. вблизи ребер куба обратной ячейки). Вычисление (3) в этом случае облегчается, поскольку упрощаются соответствующие знаменатели в (4).

Мы приведем результаты. Закон дисперсии продольных фононов (ось [100]) определяется дисперсией модуля

$$C_{11}(q_x, T) = C_{11}^{(0)}(q_x) - d_1^2 \nu(0) \frac{4}{3\pi^2} \ln\frac{T^*}{T} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\phi \, \frac{|\cos\phi_+|\,|\cos\phi_-|}{|\cos\phi_+| + |\cos\phi_-|}. \tag{6}$$

Интегральный фактор меняется от единицы при $q_x = 0$ до 0,75 при $q_x = \pi/a$. Таким образом, "смягчение" велико и имеет тот же порядок величины, что и для сдвигового модуля [3]. При выходе в плоскость (x, y) при значениях q_y из (5) "выключается" температурный вклад от оси y. При q_x, $q_y > (\pi/a)\sqrt{T/T^*}$ температурные добавки связанные с осью z, пропорциональны $(T/T^*)^{3/2}$ и для всех q_x, q_y уменьшают частоты с уменьшением температуры. Результат удобно выразить как добавку к энергии упругой деформации с волновым вектором $q = (q_x q_y 0)$:

$$\delta\Omega = d_1^2 \nu(0) \frac{2\zeta(3/2)}{3\pi^{3/2}} \left(1 - \frac{1}{\sqrt{2}}\right) |\epsilon_{xx}(q) - \epsilon_{yy}(q)|^2 I_{\alpha\beta}, \tag{7}$$

где $\alpha = \sin\kappa_x$, $\beta = \sin\kappa_y$, и интеграл $I_{\alpha\beta}$:

$$I_{\alpha\beta} = -\left(\frac{\alpha}{\beta} - \frac{\beta}{\alpha}\right)^2\left(\frac{T}{T^*}\right)^{3/2}\int_0^\infty\int_0^\infty dx\,dy\left\{\frac{1}{\alpha\sqrt{y^2+1}+\beta\sqrt{x^2+1}} - \frac{1}{\alpha y+\beta x}\right\} > 0$$

возникает при выделении в (3) сингулярных членов $z^{1/2}$. Случай $\alpha = \beta$, т. е. q вдоль [110], требует дальнейшего анализа. Для сдвигового модуля $C_s(q)$, определяющего частоты фононов с $q = (2\pi/a)[\zeta\zeta 0]$ и поляризацией $e \parallel [110]$, имеем

$$C_s(q,\ T) = C_s^{(\circ)}(q) + d_1^2\nu(0)\frac{8}{9}\ \frac{T^2}{T^{*2}}\ \ln^2\sqrt{\frac{T}{T^*}}\ \frac{1}{\sin^2\zeta\pi}$$

Из данных [2] следует оценка $T^*_{Nb_3Sn} \sim 600K$.

В связи с результатами [1, 2] неоднократно поднимался вопрос о роли, которую играют мягкие фононные моды в явлении сверхпроводимости для этих соединений. Поскольку в нашей модели уже малые изменения положения химического потенциала вблизи особенности (2) ликвидируют мартенситный переход, то первый вопрос состоял бы в том, насколько меняется эффективная константа g_{eff} межэлектронного притяжения при изменении T_m на свой порядок величины. В теории БКШ g_{eff} индуцировано фононами и пропорционально среднему по поверхности Ферми от

$$g_{eff} \backsim \left\langle \frac{M(p-p')}{\omega^2(p-p')} \right\rangle,$$

где волновой вектор фонона $q = p - p'$ отвечает расстоянию между двумя точками на поверхности Ферми. Для линейных цепочек — в первом приближении эта поверхность есть плоскость. Поэтому $\delta g/g_{eff} \backsim$ $\backsim \langle \Delta\omega^2/\omega^2 \rangle$ может быть оценено по формулам (5), (6). Согласно (6), $\Delta\omega^2/\omega^2$ велико в узкой полосе шириной $\Delta q \sim \sqrt{T/T^*}$. Поэтому изменение $\delta g/g_{eff}$ имеет буквенную малость $\sqrt{T_m/T^*}$. Конечно, связь между T_c и T_m при малых изменениях состава не сводится к изменению константы g_{eff}, но включает также эффекты плотности состояний.

Другая постановка вопроса связана с изменением состава, при котором уровень химического потенциала существенно сдвигается относительно особенностей (2) (например стехиометрическому составу отвечает $\mu = -T^*$ и минимум плотности состояний). При этом, вообще говоря, мягких фононных мод вообще нет, т. е. фононные частоты изменяются на порядок самих себя. Поэтому близость к мартенситному переходу, поскольку она означает близость к одной из особенностей (2) и, следовательно, более "мягкие" моды (см. формулы (5) — (7)), благоприятствует сверхпроводимости. Буквенно изменение g_{eff} порядка единицы,однако, числовую оценку получить затруднительно. Согласно [5] эффект не слишком велик.

Институт теоретической физики
им. Л.Д.Ландау
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
24.апреля 1975 г.

Литература

[1] G.Sirane, J.D.Axe, R.J.Birgenean. Solid St. Comm., 9, 397, 1971.

[2] J.D.Axe, G.Shirane. Phys. Rev., B8, 1965, 1973.

[3] Л.П.Горьков. Письма в ЖЭТФ, 20, 571, 1974.

[4] Л.П.Горьков. ЖЭТФ, 10, 1965, 1973.

[5] J.K.Hulm, R.D.Blangher. Low Temperature Physics – LT13, ed. by K.D.Timmerhaus, W.J.Q'Sullivan, E.F.Hammel, Plenum Press, N.Y., 1974.