

# СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ В ДВУХЗОННЫХ СИСТЕМАХ С ПЕРЕМЕННОЙ ПЛОТНОСТЬЮ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА. СЛУЧАЙ $\text{MgB}_2$

*М. Е. Палистрант\*, В. А. Урсу*

*Институт прикладной физики Академии наук Молдовы  
2028, Кишинев, Молдова*

Поступила в редакцию 7 июля 2006 г.

Развита теория термодинамических свойств двухзонного сверхпроводника при пониженной плотности носителей заряда на основе фононного механизма сверхпроводимости с сильной электрон-фононной связью. Эта теория приспособлена для описания изменения критической температуры  $T_c$ , энергетических щелей  $\Delta_1$ ,  $\Delta_2$ , а также относительного скачка электронной теплоемкости  $(C_S - C_N)/C_N$  в точке  $T = T_c$  с изменением плотности носителей заряда соединения  $\text{MgB}_2$  при введении в систему примесей замещения различной валентности. Показано, что, в соответствии с механизмом заполнения энергетических зон  $\sigma$  и  $\pi$ , перекрывающихся на поверхности Ферми, величины  $T_c$ ,  $\Delta_1$  и  $\Delta_2$  убывают при допировании этого соединения электронами и остаются постоянными либо слабо меняются при допировании дырками. Теория качественно согласуется с экспериментальными данными. Показано также, что учет процессов внутризонного и межзонного рассеяний электронов на примесном потенциале улучшает это согласие.

PACS: 74.20.Fg, 74.70.Ad

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Около пяти лет назад была открыта сверхпроводимость в соединении  $\text{MgB}_2$  с температурой перехода  $T_c \approx 39$  К [1]. Это открытие вызвало большой интерес и привлекло внимание многих исследователей — как теоретиков, так и экспериментаторов. Такой интерес объясняется большими значениями  $T_c$ , высокими значениями верхнего критического поля  $H_{c2}$  и критического тока  $j_c$  в этом соединении, что ставит это относительно простое вещество в один ряд со сложными оксидными высокотемпературными соединениями. В результате многочисленных исследований стало ясно, что сверхпроводящие свойства  $\text{MgB}_2$  невозможно описать теорией БКШ–Элиашберга. Свойства этого вещества характеризуются целым рядом аномалий, которые не вписываются в эту теорию (см., например, [2, 3]). Важную роль при этом играет анизотропия системы, в частности, перекрытие энергетических зон на поверхности Ферми, приводящее к возникновению двух и более щелей в энергетическом спектре. Такое

перекрытие энергетических зон подтверждается зонной структурой  $\text{MgB}_2$  [4, 5]. Возможность описания этого соединения путем применения двухзонной теории сверхпроводимости была высказана авторами ряда работ (см., например, [6]). Модель же сверхпроводника с перекрывающимися на поверхности Ферми энергетическими зонами была предложена задолго до открытия высокотемпературных сверхпроводников [7, 8]. Историю развития теории многозонных сверхпроводников можно проследить, в частности, по обзорам [9–12]. Модель Москаленко для двухзонной системы [7] предполагает образование куперовских пар в каждой зоне и туннелирование этих пар как целого из одной зоны в другую. Модель позволяет получить высокие значения  $T_c$ , две энергетические щели ( $\Delta_1$  и  $\Delta_2$ ) (при этом могут выполняться условия  $2\Delta_1/T_c > 3.5$  и  $2\Delta_2/T_c < 3.5$ , в однозонном случае  $2\Delta/T_c = 3.5$ ), малые значения относительного скачка электронной теплоемкости в точке  $T = T_c$  (для  $\text{MgB}_2$  этот скачок равен 0.8, в однозонном случае — это универсальная величина, равная 1.43), аномальную температурную зависимость теплоемкости в сверхпроводящей фазе, положительную

\*E-mail: mepalistrant@yandex.ru

кривизну зависимости верхнего критического поля  $H_{c2}$  от температуры и др. [9]. Такими свойствами обладает соединение  $\text{MgB}_2$ , и двухзонная модель [7] описывает качественную картину поведения различных физических характеристик этого соединения.

Наряду с чистым  $\text{MgB}_2$  представляет интерес и довольно интенсивно исследуется влияние химического замещения атомов бора и магния другими элементами (например, С, Li, Cu и др. [13, 14]) на термодинамические свойства  $\text{MgB}_2$ . Термодинамические свойства двухзонного сверхпроводника с пониженной (переменной) плотностью носителей заряда в предположении слабой связи при нефононном механизме сверхпроводимости исследованы в работе [15]. Более общий случай, когда учитываются всевозможные спаривания электронов (внутризонные и межзонные), рассмотрен в работе [16], а также в обзоре [12].

В настоящее время опубликовано много работ, в которых свойства соединения  $\text{MgB}_2$  исследуются на основе уравнения Элиашберга с учетом наличия двух энергетических щелей. Тем самым это вещество рассматривается с точки зрения сильного электрон-фононного взаимодействия (см., например, работы [17, 18] и ссылки в них).

Целью настоящей работы является развитие теории термодинамических свойств сверхпроводящего состояния соединения  $\text{MgB}_2$  с переменной плотностью носителей заряда. В основу положена двухзонная модель [15] и электрон-фононный механизм сверхпроводимости, присущий этому соединению. При этом учитывается относительное расположение энергетических зон, а оценка параметров теории выполняется с поправкой на сильное электрон-фононное и кулоновское взаимодействия. Такой подход позволяет проследить за заполнением энергетических зон и, следовательно, определить влияние на сверхпроводимость в  $\text{MgB}_2$  химического замещения магния и бора другими элементами. Наряду с этим учитывается также межзонное рассеяние носителей заряда на примесном потенциале, присущее двухзонным сверхпроводникам [19].

Работа построена следующим образом. В разд. 2 на основании гамильтониана Фрелиха получены уравнения для температурных функций Грина и массовых операторов — диагонального  $M(x, x')$  и недиагонального  $\Sigma(x, x')$ . Выполнен переход к зонному представлению ( $n\mathbf{k}\Omega$ ) путем разложения функций Грина и массовых операторов по блоховским функциям. Получена система уравнений для параметров порядка  $\Delta_1$  и  $\Delta_2$  с перенормированными константами электрон-фононного взаимодействия  $\lambda_{nm}$

( $n, m = 1, 2$ ) за счет учета зависимости массового оператора  $M_n(\mathbf{k}, \Omega)$  от этих констант. Эта система уравнений дополнена выражением, определяющим химический потенциал  $\mu$ . В разд. 3 рассмотрены предельные случаи  $T \sim T_c$  и  $T = 0$ . В каждой из этих температурных областей определены основные уравнения теории сверхпроводимости. Найдены аналитические выражения для критической температуры  $T_c$ , энергетических щелей  $\Delta_1$  и  $\Delta_2$  в определенной области значений носителей заряда (химического потенциала  $\mu$ ). Получены также выражения для скачка электронной теплоемкости  $C_S - C_N$  в точке  $T = T_c$ . В разд. 4 выполнена оценка параметров теории для соединения  $\text{MgB}_2$  и построена зависимость термодинамических величин от плотности носителей заряда на основании механизма заполнения энергетических зон.

В последнем разделе учитывается дополнительный механизм влияния примеси на сверхпроводимость, а именно, межзонное рассеяние электронов на примесном потенциале [19]. Изучена зависимость величины  $T_c$  от концентрации вводимой примеси замещения С, Li и Cu. Полученные результаты сравниваются с экспериментальными данными.

## 2. ГАМИЛЬТониАН СИСТЕМЫ И ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Гамильтониан рассматриваемой системы имеет вид

$$H = H_0 + H_1, \quad (1)$$

где  $H_0$  — гамильтониан невзаимодействующих электронов и фононов, а  $H_1$  — гамильтониан электрон-фононного взаимодействия, определяемый выражением

$$H_1 = g \sum_{\sigma} \int d\mathbf{x} \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{x}) \psi_{\sigma}(\mathbf{x}) \varphi(\mathbf{x}). \quad (2)$$

Здесь  $g$  — константа электрон-фононного взаимодействия,  $\psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{x})$  и  $\psi_{\sigma}(\mathbf{x})$  — операторы рождения и уничтожения электронов со спином  $\sigma$  в точке  $\mathbf{x}$ ,  $\varphi(\mathbf{x})$  — фононный оператор.

Применяя диаграммный метод теории возмущений [20] для нормальной  $G(xx')$  и аномальной  $F(xx')$  температурных электронных функций Грина, получаем систему уравнений

$$G(x, x') = G^0(x, x') + \int \int dx_1 dx_2 G^0(x, x_1) M(x_1, x_2) G(x_2, x') - \int \int dx_1 dx_2 G^0(x, x_1) \Sigma(x_1, x_2) \tilde{F}(x_2, x'), \quad (3)$$

$$\tilde{F}(x, x') = \int dx_1 dx_2 G_0(x_1, x) \tilde{\Sigma}(x_1, x_2) G(x_2, x') + \int dx_1 dx_2 G^0(x_1, x) M(x_2, x_1) \tilde{F}(x_2, x'), \quad (4)$$

где знак «тильда» означает комплексное сопряжение соответствующей величины,  $G^0(x, x_1)$  — электронная функция Грина свободных электронов.

Диагональный  $M(x_1, x_2)$  и недиагональный  $\Sigma(x_1, x_2)$  массовые операторы имеют вид

$$M(x_1, x_2) = -g^2 D(x_1, x_2) G(x_1, x_2), \quad (5)$$

$$\Sigma(x_1, x_2) = -g^2 D(x_1, x_2) F(x_1, x_2). \quad (6)$$

Здесь  $D(x_1, x_2)$  — фононный пропагатор.

Перейдем в выражениях (3)–(6) к  $n\mathbf{k}\Omega$ -представлению, выполнив разложения входящих в эти формулы величин по блоховским функциям [21]. Тогда нетрудно получить систему уравнений для функций Грина  $G_{nm}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \Omega)$  и  $F_{nm}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \Omega)$ , а также выражения для массовых операторов  $M_{mm'}(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \Omega)$  и  $\Sigma_{mm'}(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \Omega)$ . Такой подход позволяет исследовать термодинамические свойства двухзонных систем с учетом всевозможных внутризонных и межзонных спариваний электронов. Предел слабой электрон-фононной связи в этих системах рассмотрен в работах [12, 16].

Здесь мы будем рассматривать более простой случай, ограничившись приближением диагональных по индексам зон функций Грина, приводящий к двухзонной модели, предложенной в работах [7, 8]:

$$\begin{aligned} G_{n_1 n_2}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \Omega) &= G_{n_1}(\mathbf{k}_1, \Omega_1) \delta_{n_1 n_2} \delta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}, \\ F_{n_1 n_2}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \Omega) &= F_{n_1}(\mathbf{k}_1, \Omega_1) \delta_{n_1 n_2} \delta_{\mathbf{k}_1, -\mathbf{k}_2}, \\ M_{mm'}(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \Omega) &= M_m(\mathbf{p}, \Omega) \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \delta_{mm'}, \\ \Sigma_{mm'}(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \Omega) &= \Sigma_m(\mathbf{p}, \Omega) \delta_{\mathbf{p}_1, -\mathbf{p}'} \delta_{mm'}. \end{aligned} \quad (7)$$

В этом приближении решения системы уравнений (3), (4) для функций Грина имеют вид

$$G_n(\mathbf{k}, \Omega) = -\frac{iZ_n(\Omega)\Omega + \tilde{\varepsilon}_n}{A_n(\mathbf{k}, \Omega)}, \quad (8)$$

$$F_n(\mathbf{k}, \Omega) = \frac{\Sigma_n(\mathbf{k}, \Omega)}{A_n(\mathbf{k}, \Omega)}, \quad \tilde{F}_n(\mathbf{k}, \Omega) = \frac{\tilde{\Sigma}_n(\mathbf{k}, \Omega)}{A_n(\mathbf{k}, \Omega)}, \quad (9)$$

где

$$\begin{aligned} A_n(\mathbf{k}, \Omega) &= \Omega^2 Z_n^2(\Omega) + \tilde{\varepsilon}_n^2(\mathbf{k}) + \Sigma_n(\mathbf{k}, \Omega) \tilde{\Sigma}_n(\mathbf{k}, \Omega), \\ Z_n(\Omega) &= 1 - \frac{1}{\Omega} \text{Im} M_n(\mathbf{k}, \Omega), \\ \tilde{\varepsilon}_n(\mathbf{k}) &= \varepsilon_n(\mathbf{k}) + \text{Re} M_n(\mathbf{k}, \Omega). \end{aligned} \quad (10)$$

Выражения для массовых операторов  $M_n(\mathbf{p}, \Omega)$  и  $\Sigma_n(\mathbf{p}, \Omega)$  приводятся к виду

$$M_n(\mathbf{p}, \Omega) = -\frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{\Omega_1} \sum_{n_1} g_{nn_1}^2(\mathbf{p}, \mathbf{k}_1) \times \times D(\mathbf{p} - \mathbf{k}_1, \Omega - \Omega_1) G_{n_1}(\mathbf{k}_1, \Omega_1), \quad (11)$$

$$\Sigma_n(\mathbf{p}, \Omega) = -\frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{\Omega_1} \sum_{n_1} g_{nn_1}^2(\mathbf{p}, \mathbf{k}_1) \times \times D(\mathbf{p} - \mathbf{k}_1, \Omega - \Omega_1) F_{n_1}(\mathbf{k}_1, \Omega_1), \quad (12)$$

где

$$g_{mn}^2(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = g^2 |\chi(m\mathbf{p}_F, n\mathbf{p}'_F)|^2,$$

$$\chi(m\mathbf{p}_F, n\mathbf{p}'_F) = \int_{V_0} d\mathbf{r} U_{m\mathbf{p}_F}^*(\mathbf{r}) U_{n\mathbf{p}'_F}(\mathbf{r}), \quad (13)$$

$U_{n\mathbf{p}}(\mathbf{r})$  — амплитуда функции Блоха,  $\Omega$  — мацубаровская частота для электронов,  $V_0$  — объем элементарной ячейки.

Введем определение

$$\Delta_n(\Omega) = Z_n(\Omega) \Delta_n(\Omega)$$

и упростим уравнения (11) и (12), пренебрегая эффектами запаздывания. Выполним затем интегрирование по  $\Omega_1$  и перейдем к интегрированию по энергии в соответствии с законом дисперсии энергии электронов для  $n$ -й зоны:

$$\varepsilon_n(\mathbf{k}) = \zeta_n + \frac{k^2}{2m_n} - \mu. \quad (14)$$

Тогда на основании соотношений (9)–(12) получаем систему уравнений

$$\begin{aligned} \Delta_1 &= \bar{\lambda}_{11} \int_{-d_1}^{d_{c_1}} d\varepsilon_1 \frac{\text{th} \beta E_1 / 2}{2E_1} \Delta_1 + \\ &+ \bar{\lambda}_{12} \int_{-d_2}^{d_{c_2}} d\varepsilon_2 \frac{\text{th} \beta E_2 / 2}{2E_2} \Delta_2, \\ \Delta_2 &= \bar{\lambda}_{21} \int_{-d_1}^{d_{c_1}} d\varepsilon_1 \frac{\text{th} \beta E_1 / 2}{2E_1} \Delta_1 + \\ &+ \bar{\lambda}_{22} \int_{-d_2}^{d_{c_2}} d\varepsilon_2 \frac{\text{th} \beta E_2 / 2}{2E_2} \Delta_2, \end{aligned} \quad (15)$$

где

$$\lambda_{nm} = g_{nm}^2 N_m, \quad E_n = \sqrt{(\bar{\varepsilon}_n - \mu)^2 + \Delta_n^2},$$

$$\bar{\varepsilon}_n = \frac{\varepsilon_n}{Z_n}, \quad \bar{\lambda}_{nm} = \frac{\lambda_{nm}}{Z_n},$$

$$d_n = \mu - \zeta_n, \quad d_{cn} = \zeta_{cn} - \mu, \quad n, m = 1, 2, \quad (16)$$

$N_m$  — плотность электронных состояний на  $m$ -й полосе поверхности Ферми,  $\zeta_{cn}$  — энергия обрезания в  $n$ -й зоне. В соответствии с определением (10) и законом дисперсии (14) для величин  $Z_n$  получаем

$$Z_1 = 1 + \lambda_{11} + \lambda_{12}, \quad Z_2 = 1 + \lambda_{22} + \lambda_{21}. \quad (17)$$

Поскольку мы рассматриваем систему с переменной (в том числе и низкой) плотностью носителей заряда, дополним систему уравнений (15) соотношением, определяющим химический потенциал  $\mu$  (плотность носителей заряда  $\tilde{n}$ ):

$$\tilde{n} = \sum_m N_m \int_{-d_m}^{d_{cn}} d\varepsilon_m \left[ \frac{E_m(\mathbf{k}) - |\varepsilon_m(\mathbf{k}) - \mu|}{E_m(\mathbf{k})} + \frac{2|\bar{\varepsilon}_m(\mathbf{k}) - \mu|}{E_m(\mathbf{k})} \frac{1}{1 + \exp \beta E_m(\mathbf{k})} \right]. \quad (18)$$

При низких значениях плотности носителей заряда  $\tilde{n}$  ( $\mu \sim \Delta_n$ ) необходимо самосогласованно решать систему (15) и соотношение (18).

Рассмотрим фононный механизм сверхпроводимости, присущий соединению  $\text{MgB}_2$ . В соответствии с этим в уравнении (15) при интегрировании по энергии выполняются обрезания в каждой зоне по характерной фононной частоте  $\omega_{0n}$ . С учетом изменения химического потенциала  $\mu$  и закона дисперсии (14) эти обрезания имеют вид ( $\mu_n = \mu - \zeta_n$ )

$$d_n = \begin{cases} \omega_{0n}, & \mu_n \geq \omega_{0n}, \\ \mu_n, & \mu_n < \omega_{0n}, \end{cases}, \quad (19a)$$

$$d_{cn} = \begin{cases} \omega_{0n}, & \zeta_{cn} - \mu \geq \omega_{0n}, \\ \zeta_{cn} - \mu, & \zeta_{cn} - \mu < \omega_{0n}. \end{cases} \quad (19b)$$

### 3. ПРЕДЕЛЬНЫЕ СЛУЧАИ $T \sim T_c$ И $T = 0$

Исследуем систему уравнений (15) при  $T \sim T_c$ . С этой целью выполним разложение параметров  $\Delta_n$  по разности  $(\beta - \beta_c)$ , где  $\beta = 1/T$ :

$$\Delta_n = c_n(\beta - \beta_c)^{1/2} + c_n^{(1)}(\beta - \beta_c)^{3/2} + \dots \quad (20)$$

Подставляя это разложение в уравнения (15) и приравнявая выражения при одинаковых степенях разности  $(\beta - \beta_c)$ , получаем систему уравнений для определения коэффициентов  $c_n$  и  $c_n^{(1)}$  ( $n = 1, 2$ ):

$$\begin{aligned} c_1 &= -\bar{\lambda}_{11} I_1(\mu) c_1 - \bar{\lambda}_{12} I_2(\mu) c_2, \\ c_2 &= -\bar{\lambda}_{21} I_1(\mu) c_1 - \bar{\lambda}_{22} I_2(\mu) c_2, \end{aligned} \quad (21)$$

$$\begin{aligned} c_1^{(1)} &= \frac{\bar{\lambda}_{11}}{\beta_c} [\theta_1(\mu) - \beta_c^3 F_1(\mu) c_1^2] c_1 - \bar{\lambda}_{11} I_1(\mu) c_1^{(1)} + \\ &+ \frac{\bar{\lambda}_{12}}{\beta_c} [\theta_2(\mu) - \beta_c^3 F_2(\mu) c_2^2] c_2 - \bar{\lambda}_{12} I_2(\mu) c_2^{(1)}, \\ c_2^{(1)} &= \frac{\bar{\lambda}_{21}}{\beta_c} [\theta_1(\mu) - \beta_c^3 F_1(\mu) c_1^2] c_1 + \\ &+ \frac{\bar{\lambda}_{22}}{\beta_c} [\theta_2(\mu) - \beta_c^3 F_2(\mu) c_2^2] c_2 - \bar{\lambda}_{22} I_2(\mu) c_2^{(1)}, \end{aligned} \quad (22)$$

где

$$I_n(\mu) = - \int_{-\bar{d}_n}^{\bar{d}_{cn}} \frac{\text{th} \beta_c \varepsilon / 2}{2\varepsilon} d\varepsilon,$$

$$F_n = \frac{1}{8} \int_{-\bar{d}_n \beta_c}^{\bar{d}_{cn} \beta_c} dx \frac{\text{sh} x - x}{x^3 \text{ch}^2 x / 2},$$

$$\begin{aligned} \theta_n(\mu) &= \frac{1}{2} \left[ \text{th} \frac{\beta_c \bar{d}_{cn}}{2} + \text{th} \frac{\beta_c \bar{d}_n}{2} \right], \\ \bar{d}_{cn} &= \frac{d_{cn}}{Z_n}, \quad \bar{d}_n = \frac{d_n}{Z_n}. \end{aligned} \quad (23)$$

Приравнявая нулю определитель  $D$  системы (21), получаем уравнение для температуры сверхпроводящего перехода  $T_c$ , а на основании (18) — соотношение, связывающее  $\tilde{n}$  и  $\mu$ :

$$1 + \bar{\lambda}_{11} I_1(\mu) + \bar{\lambda}_{22} I_2(\mu) + \bar{a} I_1(\mu) I_2(\mu) = 0,$$

$$\tilde{n} = \sum_n N_n [\bar{\zeta}_{cn} - \bar{\zeta}_n - |\bar{\zeta}_{cn} - \bar{\mu}| + |\bar{\zeta}_n - \bar{\mu}|], \quad (24)$$

где

$$\bar{a} = \bar{\lambda}_{11} \bar{\lambda}_{22} - \bar{\lambda}_{12} \bar{\lambda}_{21}. \quad (25)$$

На основании системы уравнений (21) нетрудно определить отношение параметров  $z_c = \Delta_1 / \Delta_2$  при  $T = T_c$ :

$$z_c = \frac{c_1}{c_2} = - \frac{\bar{\lambda}_{12} I_2(\mu)}{1 + \bar{\lambda}_{11} I_1(\mu)} = - \frac{1 + \bar{\lambda}_{22} I_2(\mu)}{\bar{\lambda}_{21} I_1(\mu)}. \quad (26)$$

Величина  $z_c$  зависит от плотности носителей заряда (химического потенциала) неявно через зависимость величины  $T_c$  от этого параметра, а также явно благодаря пределам интегрирования в формулах (23).

Решения системы уравнений (22) можно представить в виде

$$c_1^{(1)} = D_1/D, \quad c_2^{(1)} = D_2/D,$$

где  $D, D_1$  и  $D_2$  — соответствующие определители этой системы. Условие  $D = 0$  соответствует разрешимости системы уравнений (21) для температуры сверхпроводящего перехода. Следовательно, необходимо наложить условие

$$D_1 = D_2 = 0.$$

Из этого условия вытекает соотношение

$$c_1^2 = \frac{1}{\beta_c^3} \frac{N_1 \Theta_1(\mu) + N_2 \Theta_2(\mu)/z_c^2}{N_1 F_1(\mu) + N_2 F_2(\mu)/z_c^4}. \quad (27)$$

Будем полагать для определенности

$$\zeta_1 < \zeta_2 < \zeta_{c1} < \zeta_{c2}.$$

Как следует из закона дисперсии энергии электронов (14), эти параметры определяют взаимное расположение энергетических зон.

В области значений

$$\bar{d}_n/T_c, \bar{d}_{cn}/T_c \gg 1$$

уравнение (23) позволяет получить аналитическое выражение для температуры сверхпроводящего перехода  $T_c$ . Полагая

$$\omega_{01} = \omega_{02} = \omega_0$$

и выполняя обрезание при интегрировании по энергии согласно (19), на основании (24) получаем

$$T_c = \frac{2\omega_0\gamma}{\pi} e^{-\xi_c}, \quad (28)$$

где

$$\xi_c = \frac{\bar{\lambda}_{11} + \bar{\lambda}_{22} - \bar{a}\varphi \pm \sqrt{(\bar{\lambda}_{11} + \bar{\lambda}_{22} - \bar{a}\varphi)^2 - 4\psi}}{2\bar{a}}. \quad (29)$$

Здесь величины  $\varphi$  и  $\psi$  определяются значением химического потенциала  $\mu$ .

1. При  $\bar{\mu}' - \bar{\zeta}_2 < \omega_0$  и  $\bar{\zeta}_{c1} - \bar{\mu} > \omega_0$  имеем

$$\varphi = \frac{1}{2} \ln \frac{\bar{\mu}' - \bar{\zeta}_2}{\omega_0}, \quad \psi = 1 - \bar{\lambda}_{22} \frac{1}{2} \ln \frac{\bar{\mu}' - \bar{\zeta}_2}{\omega_0}. \quad (30)$$

2. При  $\bar{\mu} - \bar{\zeta}_2 > \omega_0$  и  $\bar{\zeta}_{c1} - \bar{\mu} > \omega_0$  имеем

$$\varphi = 0, \quad \psi = 1. \quad (31)$$

3. При  $\bar{\mu}' - \bar{\zeta}_2 > \omega_0$  и  $\bar{\zeta}_{c1} - \bar{\mu} < \omega_0$  имеем

$$\varphi = \frac{1}{2} \ln \frac{\bar{\zeta}_{c1} - \bar{\mu}}{\omega_0}, \quad \psi = 1 - \bar{\lambda}_{11} \frac{1}{2} \ln \frac{\bar{\zeta}_{c1} - \bar{\mu}}{\omega_0}, \quad (32)$$

$$\bar{\mu} = \frac{\mu}{Z_1}, \quad \bar{\mu}' = \bar{\mu} Z_1/Z_2.$$

В точках  $\mu = \zeta_2$  и  $\mu = \zeta_{c1}$  имеем, соответственно,

$$\xi_c = \frac{2\bar{\lambda}_{11} + \bar{\lambda}_{22} \pm \sqrt{(2\bar{\lambda}_{11} - \bar{\lambda}_{22})^2 + 8\bar{\lambda}_{12}\bar{\lambda}_{21}}}{2\bar{a}}, \quad (33)$$

$$\xi_c = \frac{\bar{\lambda}_{11} + 2\bar{\lambda}_{22} \pm \sqrt{(\bar{\lambda}_{11} - 2\bar{\lambda}_{22})^2 + 8\bar{\lambda}_{12}\bar{\lambda}_{21}}}{2\bar{a}}. \quad (34)$$

При  $\zeta_1 < \mu < \zeta_2$  и  $\zeta_{c1} < \mu < \zeta_{c2}$  величина  $T_c$  определяется электрон-фононным взаимодействием в первой и второй зонах, соответственно. При этом зависимость от  $\mu$  имеет место при  $\bar{\mu} - \bar{\zeta}_1 < \omega_0$  и  $\bar{\zeta}_{c2} - \bar{\mu}' < \omega_0$ :

$$T_c = \frac{2\gamma}{\pi} \sqrt{(\bar{\mu} - \bar{\zeta}_1)\omega_0} e^{-1/\bar{\lambda}_{11}^0}, \quad (35)$$

$$T_c = \frac{2\gamma}{\pi} \sqrt{(\bar{\zeta}_{c2} - \bar{\mu}')\omega_0} e^{-1/\bar{\lambda}_{22}^0}.$$

Здесь и ниже  $\bar{\lambda}_{11}^0 = \bar{\lambda}_{11}$  при  $N_2 = 0$  и  $\bar{\lambda}_{22}^0 = \bar{\lambda}_{22}$  при  $N_1 = 0$ .

Для скачка теплоемкости в точке  $T = T_c$  имеем [15]

$$\frac{C_S - C_N}{V} = \beta_c^5 \sum_n N_n F_n(\mu) c_n^4. \quad (36)$$

Используя соотношения (27) и (26), приведем скачок теплоемкости к виду

$$\frac{C_S - C_N}{V} = T_c \frac{[N_1 \Theta_1(\eta) + N_2 \Theta_2(\eta)/z_c^2]^2}{N_1 F_1(\mu) + N_2 F_2(\mu)/z_c^4}. \quad (37)$$

При этом относительный скачок теплоемкости имеет вид

$$\frac{C_S - C_N}{C_N} = \frac{[N_1 \Theta_1(\mu) + N_2 \Theta_2(\mu)/z_c^2]^2}{4[N_1 F_1(\mu) + N_2 F_2(\mu)/z_c^4][N_1 \varphi_1(\mu) + N_2 \varphi_2(\mu)]}, \quad (38)$$

где

$$\varphi_n(\mu) = \int_{-(\mu - \zeta_n)}^{\infty} \frac{x^2 dx}{(1 + e^x)(1 + e^{-x})}. \quad (39)$$

При  $T = 0$  на основании приведенных выше выражений (15) и (18) нетрудно получить систему уравнений, определяющую параметры порядка  $\Delta_m(0) = \Delta_m$  и химический потенциал  $\mu(0) = \mu$ . Эта система имеет вид

$$\Delta_m = \frac{1}{2} \sum_n \bar{\lambda}_{mn} \Delta_n \ln \frac{\bar{d}_{cn} + \sqrt{\bar{d}_{cn}^2 + \Delta_n^2}}{-\bar{d}_n + \sqrt{\bar{d}_n^2 + \Delta_n^2}}, \quad (40)$$

$$\tilde{n} = \sum_n N_n \left[ \bar{\zeta}_{cn} - \bar{\zeta}_n - \sqrt{(\bar{\zeta}_{cn} - \bar{\mu})^2 + \Delta_n^2} + \sqrt{(\bar{\zeta}_n - \bar{\mu})^2 + \Delta_n^2} \right]. \quad (41)$$

При аналитических исследованиях будем рассматривать определенные области значений химического потенциала, когда выполняются неравенства

$$\Delta_n / \bar{d}_{cn}, \Delta_n / \bar{d}_n \ll 1.$$

Используем определение величин  $\bar{d}_n$  и  $\bar{d}_{cn}$  в соответствии с обрезанием интегралов по энергии при электрон-фононном взаимодействии (19). На основании системы уравнений (40) в области перекрытия энергетических зон ( $\zeta_2 < \mu < \zeta_{c1}$ ) нетрудно получить

$$\Delta_1 = 2D_0 e^{-\xi_0}, \quad \xi_0 = \frac{\bar{\lambda}_{22} - \bar{\lambda}_{12}/z}{\bar{a}}, \quad z = \frac{\Delta_1}{\Delta_2}. \quad (42)$$

Здесь  $D_0$  и  $z$  определяются значением химического потенциала  $\mu$ . В области значений  $\zeta_2 < \mu < \zeta_{c1}$  получаем следующие соотношения.

1) При  $\bar{\mu}' - \bar{\zeta}_2 < \omega_0$ ,  $\bar{\zeta}_{c1} - \bar{\mu} > \omega_0$ ,  $D_1 = \omega_0$  имеем

$$\bar{a} \ln z = \bar{\lambda}_{11} - \bar{\lambda}_{22} - \bar{\lambda}_{21}z + \frac{\bar{\lambda}_{12}}{z} - \bar{a} \frac{1}{2} \ln \left( \frac{\bar{\mu}' - \bar{\zeta}_2}{\omega_0} \right). \quad (43)$$

2) При  $\bar{\mu}' - \bar{\zeta}_2 > \omega_0$ ,  $\bar{\zeta}_{c1} - \bar{\mu} > \omega_0$ ,  $D_0 = \omega_0$  имеем

$$\bar{a} \ln z = \bar{\lambda}_{11} - \bar{\lambda}_{22} - \bar{\lambda}_{21}z + \frac{\bar{\lambda}_{12}}{z}. \quad (44)$$

3) При  $\bar{\mu}' - \bar{\zeta}_2 > \omega_0$ ,  $\bar{\zeta}_{c1} - \bar{\mu} < \omega_0$ ,  $D_0 = \sqrt{\omega_0(\bar{\zeta}_{c1} - \bar{\mu})}$  имеем

$$\bar{a} \ln z = \bar{\lambda}_{11} - \bar{\lambda}_{22} + \frac{\bar{\lambda}_{12}}{z} - \bar{\lambda}_{21}z - \bar{a} \frac{1}{2} \ln \frac{\omega_0}{\bar{\zeta}_{c1} - \bar{\mu}}. \quad (45)$$

В области отсутствия перекрытия энергетических полос при  $\mu < \zeta_2$  и  $\mu > \zeta_{c1}$  существует одна энергетическая щель — соответственно  $\Delta_1$  и  $\Delta_2$ . При этом для малых ( $\bar{\mu} - \bar{\zeta}_1 < \omega_0$ ) и больших ( $\bar{\zeta}_{c2} - \bar{\mu}' < \omega_0$ ) значений химического потенциала имеем

$$\begin{aligned} \Delta_1 &= 2\sqrt{\omega_0(\bar{\mu} - \bar{\zeta}_1)} e^{-1/\bar{\lambda}_{11}^0}, \\ \Delta_2 &= 2\sqrt{\omega_0(\bar{\zeta}_{c2} - \bar{\mu}')} e^{-1/\bar{\lambda}_{22}^0}. \end{aligned} \quad (46)$$

Формулы (46) показывают, что параметр  $\Delta_1$  растет с ростом химического потенциала  $\mu$  в начале заполнения первой энергетической зоны, а параметр  $\Delta_2$  убывает в конце заполнения второй энергетической зоны. В области перекрытия энергетических зон  $\zeta_2 < \mu < \zeta_{c1}$  картина более сложная и может быть получена в результате численных оценок приведенных выше выражений. В случае малых значений параметров  $\bar{d}_n$  ( $\bar{d}_n \sim \Delta_n$ ) необходимо самосогласованное решение системы уравнений (40) и (41) численными методами. Отметим, что аналитические выражения для  $\Delta_n$  и  $\mu$  на основании этих уравнений были получены в работе [22] для состояния глубокой бозе-конденсации локальных пар ( $\mu < 0$ ,  $(\Delta_n/\mu_n)^2 \ll 1$ ).

#### 4. ПРИМЕНЕНИЕ МОДЕЛИ К ИЗУЧЕНИЮ СВЕРХПРОВОДЯЩИХ СВОЙСТВ ДОПИРОВАННОГО MgB<sub>2</sub>

Полученные выше уравнения для  $T_c$  (24), (28) и для  $\Delta_n$  (40) содержат переменную плотность носителей заряда  $\tilde{n}$  (химический потенциал  $\mu$ ) и, следовательно, могут описывать поведение соответствующих величин двухзонного сверхпроводника при химическом замещении его атомов другими элементами.

В частности, представляют большой интерес соединения MgB<sub>2-x</sub>C<sub>x</sub>, Mg<sub>1-x</sub>Cu<sub>x</sub>B<sub>2</sub> и др. [13, 14]. Многочисленные теоретические и экспериментальные исследования доказывают, что аномалии наблюдаемых физических величин в сверхпроводящем соединении MgB<sub>2</sub> можно понять на основе учета перекрытия энергетических зон на поверхности Ферми и наличия двух энергетических щелей (см., например, [3–6]). В научной литературе имеются различные подходы к изучению соединения MgB<sub>2</sub>, что приводит к неоднозначным значениям параметров теории.

Согласно современным исследованиям [2–6, 18, 23], соединение MgB<sub>2</sub> является двухзонным сверхпроводником с сильной электрон-фононной связью. На поверхности Ферми перекрываются две энергетические зоны: двумерная  $\sigma$ -зона и трехмерная  $\pi$ -зона. В дальнейшем мы будем называть  $\sigma$ -зону первой зоной, а  $\pi$ -зону — второй. В соответствии с этим обозначим константы электрон-фононного взаимодействия  $\lambda_{11}$  и  $\lambda_{22}$  — внутризонные,  $\lambda_{12}$  и  $\lambda_{21}$  — межзонные.

В таблице приведены значения этих параметров, а также параметров кулоновского взаимодей-

	$\lambda_{11}$	$\lambda_{22}$	$\lambda_{12}$	$\lambda_{21}$	$\mu_{11}^*$	$\mu_{22}^*$	$\mu_{12}^*$	$\mu_{21}^*$	$\bar{\lambda}_{11}$	$\bar{\lambda}_{22}$	$\bar{\lambda}_{12}$	$\bar{\lambda}_{21}$	$\omega_0$ , мэВ	$T_c$ , К
<i>a</i>	1.017	0.448	0.213	0.155	0.21	0.172	0.095	0.069	0.362	0.172	0.054	0.053	65	39.4
<i>b</i>	0.96	0.28	0.16	0.22									89	39.4
<i>c</i>	1.5	0.4		0.5	0.1	0.1	0.1	0.1						40
<i>d</i>									0.302	0.135	0.04	0.038	75	39.4

ствия  $\mu^*$ , полученные на основании уравнений Элиашберга авторами работ [18, 23] (*a*), [24] (*b*) и [6] (*c*). Как видно из этой таблицы, значения величин  $\lambda_{nm}$  и перенормированных величин  $\bar{\lambda}_{nm}$  не однозначны. Общим для них является соотношение  $\bar{\lambda}_{11} > \bar{\lambda}_{22}, \bar{\lambda}_{12}, \bar{\lambda}_{21}$ , что говорит о существенной роли двумерной зоны  $\sigma$  при образовании куперовских пар в  $\text{MgB}_2$ .

Решение уравнений Элиашберга для чистого  $\text{MgB}_2$  на основании этих параметров позволяет получить значение для температуры сверхпроводящего перехода  $T_c$ , близкое к 40 К [18].

Мы ставим перед собой задачу исследовать влияние примеси замещения на термодинамические свойства двухзонного сверхпроводника. Поскольку введение примеси не может изменить картину фононного спектра настолько, чтобы это изменение радикально повлияло на сверхпроводимость, при решении этой задачи мы будем использовать приведенные выше ренормированные уравнения двухзонной теории (24) и (40), в которых перенормированные константы электрон-фононного взаимодействия двухзонной теории определены соотношениями

$$\begin{aligned} \bar{\lambda}_{11} &= \frac{\lambda_{11} - \mu_{11}^*}{1 + \lambda_{11} + \lambda_{12}}, & \bar{\lambda}_{22} &= \frac{\lambda_{22} - \mu_{22}^*}{1 + \lambda_{22} + \lambda_{21}}, \\ \bar{\lambda}_{12} &= \frac{\lambda_{12} - \mu_{12}^*}{1 + \lambda_{11} + \lambda_{12}}, & \bar{\lambda}_{21} &= \frac{\lambda_{21} - \mu_{21}^*}{1 + \lambda_{22} + \lambda_{21}}, \end{aligned} \quad (47)$$

где  $\mu_{nm}^*$  — параметр кулоновского взаимодействия электронов.

Величины  $\bar{\lambda}_{nm}$  определяем из условия, чтобы значения  $T_c$  (28), (29), (31) и  $\Delta_1, \Delta_2$  (42), (44) отвечали экспериментальным данным.

Отметим, что экспериментальные значения термодинамических величин соединения  $\text{MgB}_2$  неоднозначны и находятся в определенном интервале значений [18]. Выбираем значения  $T_c = 39.4$  К,  $\Delta_1 = 7.1$  мэВ,  $\Delta_2 = 2.7$  мэВ,  $z = \Delta_1/\Delta_2 = 2.63$ ,  $N_1/N_2 = 0.73$  и  $\omega_0 = 75$  мэВ, полученные в работе [23] и вписывающиеся в этот интервал. Полученные таким образом эффективные константы электрон-электронного взаимодействия приведены

в таблице (случай *d*). Используем эти значения  $\bar{\lambda}_{nm}$  для вычисления на основании (31) отношения  $z_c = \Delta_1/\Delta_2$  и относительного скачка электронной теплоемкости  $(C_S - C_N)/C_N$  (38) при  $T = T_c$ . Получаем

$$z_c = 3.2, \quad (C_S - C_N)/C_N = 0.79.$$

Следовательно,  $z < z_c$ , а скачок теплоемкости мал по сравнению с однозонными сверхпроводниками и близок к экспериментальному значению [2].

Приведенная выше теория позволяет построить зависимость термодинамических характеристик от химического потенциала  $\mu$  (плотности носителей заряда  $\tilde{n}$ ) в широком интервале его значений.

Однако при изучении допирования соединений  $\text{MgB}_2$  представляет интерес рассматривать  $\mu$  вблизи значения  $\mu_0 \approx 0.74$  эВ, соответствующего случаю чистого  $\text{MgB}_2$ .

Как следует из зонного расчета [4],  $\mu_0$  лежит в области значений, близких к полному заполнению энергетической зоны  $\sigma$ . Выбираем для определенности параметры  $\zeta_1 = \zeta_2 = 0$ ,  $\zeta_{c1} = 0.8$  эВ,  $\zeta_{c2} = 1.0$  эВ. Основной вклад в сверхпроводимость дает область перекрытия на поверхности Ферми двух энергетических зон  $\zeta_2 < \mu < \zeta_{c1}$ . Удобно представить зависимость термодинамических величин от величины

$$\delta = \frac{\mu - \mu_0}{\mu_0} = \frac{\tilde{n} - \tilde{n}_0}{\tilde{n}_0},$$

определяющей относительное изменение плотности носителей заряда в результате введения примеси замещения в  $\text{MgB}_2$ . При  $\delta > 0$  происходит увеличение плотности электронов, а при  $\delta < 0$  — дырок. Такой подход позволяет выполнить сравнение с экспериментальными данными (см. рис. 4 в работе [13]), поскольку из этих данных можно определить относительное изменение зарядовой плотности  $\delta$ .

На рис. 1 приведена зависимость величины  $T_c$  от параметра  $\delta$ , полученная на основании приведенной выше теории (кривая 1). На этом же рисунке показаны точки, соответствующие экспериментальным значениям  $T_c$  для различных замещений ато-

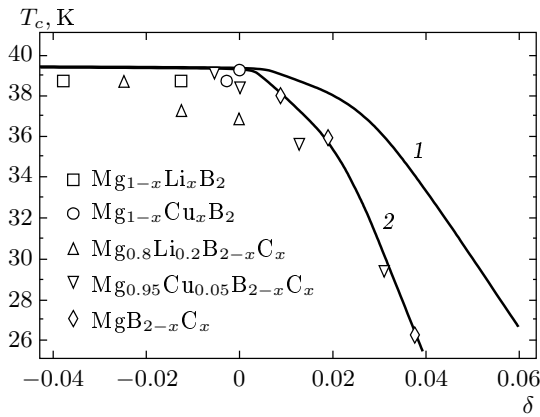


Рис. 1. Зависимости температуры сверхпроводящего перехода  $T_c$  от относительного изменения плотности носителей заряда  $\delta$  в соединении  $\text{MgB}_2$ . Кривая 1 — теоретическая, кривая 2 — экспериментальная [13]. Символы соответствуют различным соединениям

мов Mg и B, взятые из рис. 4 экспериментальной работы [13], а также экспериментальная зависимость  $T_c(\delta)$  (кривая 2). Из рис. 1 следует, что температура сверхпроводящего перехода  $T_c$  убывает с ростом плотности электронов ( $\delta > 0$ ) и остается постоянной величиной при введении в  $\text{MgB}_2$  дырок ( $\delta < 0$ ).

Убывание величины  $T_c$  с ростом  $\delta$  подтверждается показанными на этом же рисунке экспериментальными данными для соединений  $\text{MgB}_{2-x}\text{C}_x$  и  $\text{Mg}_{0.95}\text{Cu}_{0.05}\text{B}_{2-x}\text{C}_x$ , для которых значения параметра  $\delta$  определяются в соответствии с валентностью элементов, входящих в рассматриваемые соединения, соотношениями  $\delta = x/8$  и  $\delta = (x - 0.05)/8$ , соответственно. В случае соединений  $\text{Mg}_{1-x}\text{Li}_x\text{B}_2$ ,  $\text{Mg}_{1-x}\text{Cu}_x\text{B}_2$ ,  $\text{Mg}_{0.8}\text{Li}_{0.2}\text{B}_{2-x}\text{C}_x$  для величин  $\delta$  имеем соответственно  $\delta = -x/8$ ,  $-x/8$ ,  $(-0, 2+x)/8$ . При условии  $\delta < 0$ , которое имеет место при любом  $x$  для первых двух соединений и при  $x < 0.2$  для последнего из них, данная теория дает постоянное значение критической температуры  $T_c = 39.4$  К с изменением параметра  $\delta$ . Рисунок 1 демонстрирует качественное согласие нашей теории, основанной на учете двухзонности системы и фактора заполнения энергетических зон, с экспериментом. Теоретическая кривая лежит выше экспериментальных точек. Это отличие связано с двумя факторами: во-первых, параметры теории были определены, исходя из значения  $T_c = 39.4$  К для чистого  $\text{MgB}_2$ , а в экспериментальной работе [13]  $T_c = 39$  К; во-вторых, не учитывалось межзонное рассеяние электронов на примеси.

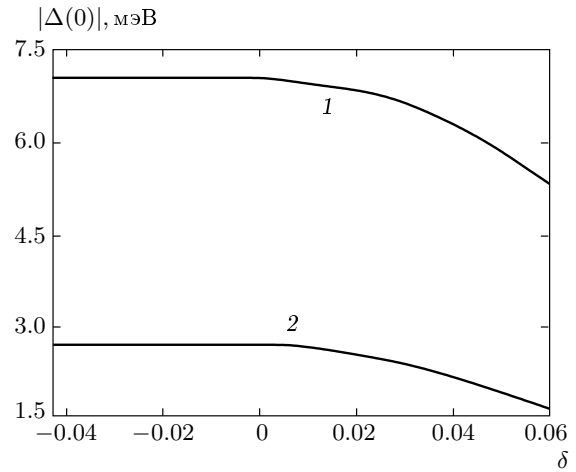


Рис. 2. Зависимости энергетических щелей  $\Delta_1$  и  $\Delta_2$  (кривые 1 и 2, соответственно) от относительного изменения плотности носителей заряда  $\delta$  при допировании соединения  $\text{MgB}_2$  электронами и дырками

На рис. 2 приведены теоретические зависимости энергетических щелей  $\Delta_1$  и  $\Delta_2$  от параметра  $\delta$  в области значений, интересных для сравнения с экспериментальными данными. Значения этих величин для чистого  $\text{MgB}_2$  соответствуют  $\Delta_1 = 7.05$  мэВ,  $\Delta_2 = 2.68$  мэВ, остаются постоянными при дырочном допировании и убывают при увеличении числа электронов в системе, т. е. картина поведения этих величин как функция от параметра  $\delta$  аналогична поведению величины  $T_c$ .

На рис. 3 представлены зависимости отношений  $2\Delta_1/k_B T_c$  (кривая 1) и  $2\Delta_2/k_B T_c$  (кривая 2) от относительной плотности зарядов  $\delta$ . Для чистого  $\text{MgB}_2$  ( $\delta = 0$ ) имеем  $2\Delta_1/k_B T_c = 4.18$ ,  $2\Delta_2/k_B T_c = 1.58$ . Эти значения остаются постоянными при  $\delta < 0$  и убывают при  $\delta > 0$ .

На рис. 4 показано изменение относительного скачка электронной теплоемкости в точке  $T = T_c$  в результате допирования соединения  $\text{MgB}_2$ . Как следует из этого рисунка, допирование приводит к слабому росту этой величины при  $\delta < 0$  и более сильному росту при  $\delta > 0$ . Как следовало ожидать, если  $\zeta_{c1} < \mu$ , значение скачка  $(C_S - C_N)/C_N = 1.43$  при  $T = T_c$ , что отвечает наличию одной энергетической зоны.

Для определенности на рис. 5 показана зависимость химического потенциала  $\mu$  от параметра  $\delta$  в  $\text{MgB}_2$ , построенная на основании второго уравнения из (24). Это соотношение позволило перейти от зависимости приведенных выше термодинамических ве-



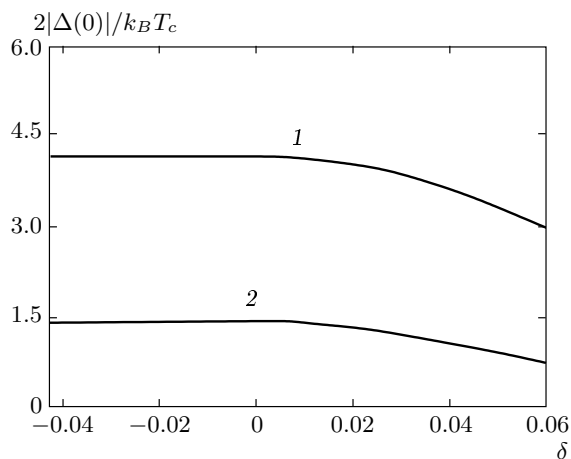


Рис. 3. Зависимости отношений  $2\Delta_{1,2}/k_B T_c$  (кривые 1 и 2, соответственно) от относительного изменения плотности носителей заряда  $\delta$  в соединении  $MgB_2$

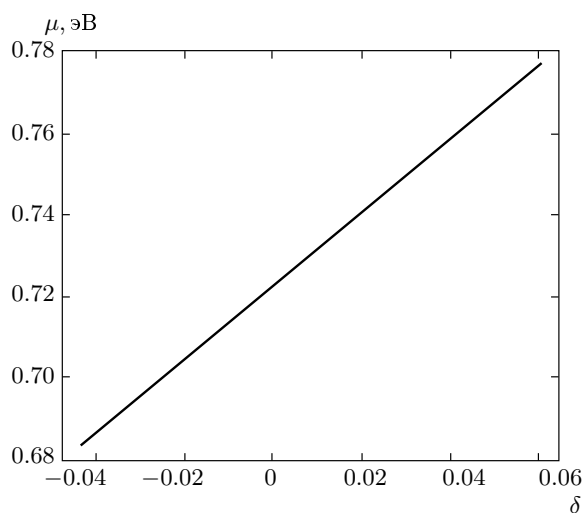


Рис. 5. Химический потенциал  $\mu$  как функция параметра  $\delta$

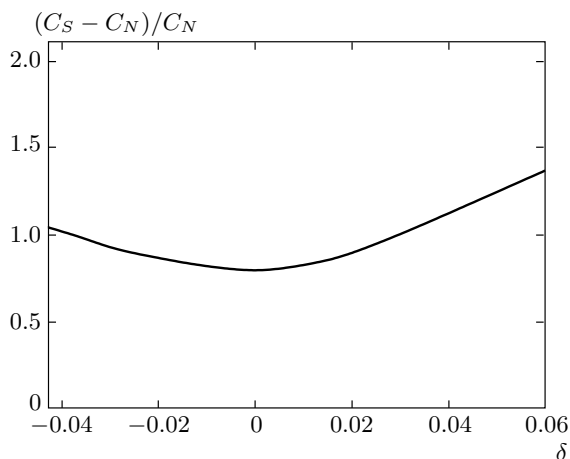


Рис. 4. Относительный скачок электронной теплоемкости  $(C_S - C_N)/C_N$  в точке  $T = T_c$  как функция параметра  $\delta$  в соединении  $MgB_2$

личин (химического потенциала  $\mu$ ) к плотности носителей заряда, а также к относительной величине  $\delta = (\tilde{n} - \tilde{n}_0)/\tilde{n}_0$ . Такой переход позволяет проводить сравнение нашей двухзонной теории с экспериментальными данными при замещении Mg и В другими элементами таблицы Менделеева.

### 5. УЧЕТ РАССЕЯНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ НА ПРИМЕСНОМ ПОТЕНЦИАЛЕ

В предыдущих разделах на основании фононного механизма построена теория сверхпроводимости в двухзонных системах с пониженной плотностью носителей заряда и немагнитной примесью. При этом влияние примеси определяется изменением химического потенциала системы  $\mu$  (плотностью носителей заряда), что приводит к проявлению эффекта заполнения энергетических зон. Согласно с экспериментом можно улучшить, если учесть процессы внутрizonного и межзонного рассеяния электронов на примесном потенциале. Эти процессы оказывают влияние не только на значение химического потенциала  $\mu$ , но и на термодинамические характеристики двухзонной системы [9, 19, 21].

В дальнейшем мы будем опираться на результаты исследования [25], в котором решается проблема влияния немагнитной примеси на температуру сверхпроводящего перехода двухзонных систем с пониженной плотностью носителей заряда. С точностью до членов, линейных по концентрации примеси, имеем

$$n_0 + \nu n_i = \sum_m N_m \left[ \zeta_{cm} + x_m - \mu - (\zeta_m + x_m - \mu) - \right. \\ \left. - |\zeta_{cm} + x_m - \mu| + |\zeta_m + x_m - \mu| + \right. \\ \left. + \frac{2}{\pi} y_m \ln \frac{|\zeta_{cm} - \mu|}{|\mu - \zeta_m|} \right], \quad (48)$$

где  $\tilde{n}_0$  — плотность носителей заряда чистого веще-

ства,  $\nu$  — разность валентности атомов вводимой примеси и основного вещества,  $n_i$  — концентрация примеси, а величины  $x_m$  и  $y_m$  с точностью до членов, линейных по концентрации примеси, определяются соотношениями

$$x_m = -\frac{1}{2\pi} \sum_n \frac{1}{\tau_{mn}} \ln \left| \frac{\zeta_{cn} - \mu}{\mu - \zeta_n} \right|, \quad (49)$$

$$y_m = \sum_n \frac{1}{2\tau_{mn}}.$$

Как следует из выражения (48), химический потенциал  $\mu$  зависит от концентрации примеси явно, а также через параметры  $\tau_{mn}$ , определяемые соотношениями ( $m, n = 1, 2$ )

$$\frac{1}{2\tau_{mn}} = \tilde{n}_i \eta_{mn}, \quad (50)$$

где  $\tilde{n}_i = n_i/2N_1$ , а  $\eta_{mn}$  определяется потенциалами примесного рассеяния электронов: внутризонным ( $n = m$ ) и межзонным ( $n \neq m$ ) потенциалами [25], которые зависят от блоховских функций и объема элементарной ячейки.

Для температуры сверхпроводящего перехода получаем

$$T_c = \bar{T}_{c_0} - \alpha^\pm \frac{\pi}{8\tau_{12}} \left( 1 + \frac{N_2}{N_1} \right), \quad (51)$$

где  $\bar{T}_{c_0}$  определяется формулами (28), (29), взятыми в соответствующих областях значений химического потенциала  $\mu$  (области 2 и 3), связанных с  $n_i$  соотношением (48), а  $\alpha$  определяется выражением [9, 19, 25]

$$\alpha^\pm = \frac{1}{2} \left\{ 1 \pm \left[ \frac{N_1 - N_2}{N_1 + N_2} (\bar{\lambda}_{11} - \bar{\lambda}_{22}) + 2 \frac{N_1}{N_1 + N_2} \bar{\lambda}_{12} + 2 \frac{N_2}{N_1 + N_2} \bar{\lambda}_{21} \right] \times \right. \\ \left. \times [(\bar{\lambda}_{11} - \bar{\lambda}_{22})^2 - 4\bar{\lambda}_{12}\bar{\lambda}_{21}]^{-1/2} \right\}. \quad (52)$$

Здесь  $\alpha^\pm < 1$  (знак «+» или «-» выбираем из условия максимальности величины  $T_c$ , обеспечивающего более устойчивое сверхпроводящее состояние по сравнению с нормальным). Выражение (51) справедливо при условии  $(2\tau_{nm}\pi T_c)^{-1} \ll 1$ , которое выполняется при малых значениях концентрации примеси  $n_i$  либо параметров  $\eta_{nm}$ .

На рис. 6 показаны зависимости критической температуры сверхпроводника  $T_c$  от относительной плотности носителей заряда  $\delta$ , полученные на основании выражения (51). Кривая 1 на этом рисунке отвечает случаю отсутствия рассеяния электронов на

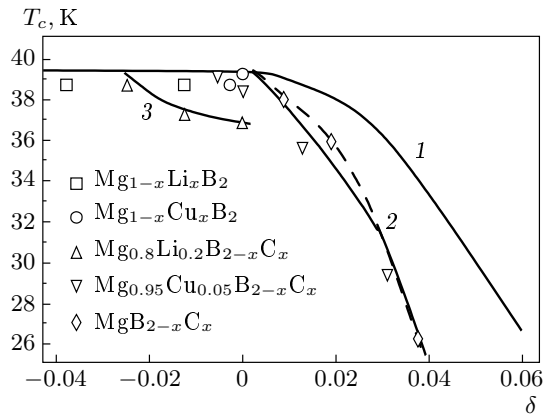


Рис. 6. Зависимости температуры сверхпроводящего перехода от относительной плотности носителей заряда  $\delta$  в соединении  $\text{MgB}_2$ . Кривая 1 соответствует отсутствию рассеяния на примесном потенциале ( $\eta_{11} = \eta_{21} = 0$ ); кривые 2 и 3 — значениям параметров  $\eta_{11} = 0.65$ ,  $\eta_{21} = 0.09$  и  $\eta_{11} = 0.5$ ,  $\eta_{21} = 0.06$ , соответственно. Штриховая кривая — экспериментальная зависимость [13]. Символы соответствуют различным соединениям

примеси ( $\eta_{nm} = 0$ ,  $n, m = 1, 2$ ) и совпадает с кривой 1 на рис. 1. Кривая 2 отвечает значениям  $\eta_{11} = 0.65$ ,  $\eta_{21} = 0.09$ . Штриховая кривая — экспериментальная зависимость [13]. Как следует из этого рисунка, учет двух механизмов — заполнения энергетических зон и рассеяния электронов на примесном потенциале — приводит к хорошему согласию теории с экспериментом для случая допирования системы электронами, если рассматривать соединения  $\text{Mg}_{0.95}\text{Cu}_{0.05}\text{B}_{2-x}\text{C}_x$  и  $\text{MgB}_{2-x}\text{C}_x$ . При замещении атомов Mg атомами Li и Cu мы не учитываем рассеяния электронов на примеси, полагая, что в слоистых соединениях  $\text{MgB}_2$  основной вклад в сверхпроводимость дают заряды, связанные с бором. Замещение бора атомами С приводит к нарушению периодичности решетки в этом слое и возникновению процессов рассеяния на примеси. Замещение же атомов Mg атомами Cu или Li (соединения  $\text{Mg}_{1-x}\text{Li}_x\text{B}_2$ ,  $\text{Mg}_{1-x}\text{Cu}_x\text{B}_2$ ) приводит лишь к изменению эффективной валентности бора, ответственного за сверхпроводимость.

Эта идея подтверждается зависимостью температуры сверхпроводящего перехода  $T_c$  от  $\delta$  в соединении  $\text{Mg}_{0.8}\text{Li}_{0.2}\text{B}_{2-x}\text{C}_x$ . На рис. 6 эта зависимость представлена кривой 3, которая проходит вблизи экспериментальных точек для этого соединения. Убывание  $T_c$  с уменьшением дырок обязано рассеянию зарядов на примеси благодаря замещению бора атомами С. Кривая 3 на этом рисунке постро-

ена на основании выражения (51), в котором взято значение  $\bar{T}_c$ , равное 39.4 К, и подобраны параметры  $\eta_{11} = 0.5$ ,  $\eta_{21} = 0.06$ . Отличие этих параметров от параметров для соединения  $\text{MgB}_{2-x}\text{C}_x$ , возможно, связано с различием объема элементарных ячеек этих соединений [13].

Отметим, что при построении данной теории не учитывалось влияние допирования на плотности электронных состояний  $N_1$  и  $N_2$ , а также на характерную фононную частоту  $\omega_0$ . Учет этого влияния, по-видимому, может изменить значения параметров  $\eta_{nm}$ .

## 6. ВЫВОДЫ

Представленная в данной работе теория термодинамических свойств двухзонных сверхпроводников с переменной плотностью носителей заряда на основе фононного механизма сверхпроводимости может описывать поведение таких величин, как  $T_c$ ,  $\Delta_1$ ,  $\Delta_2$ ,  $(C_S - C_N)/C_N$  при  $T = T_c$  как функций плотности носителей заряда в  $\text{MgB}_2$  при замещении Mg и В другими элементами таблицы Менделеева.

Для этого необходимо выполнить следующие действия.

1. Исходить из уравнения типа БКШ для двухзонной модели [7] с константами электрон-фононного взаимодействия, перенормированными из-за сильной электрон-фононной связи и кулоновского взаимодействия электронов.

2. Рассмотреть область перекрытия на поверхности Ферми двумерной  $\sigma$ - и трехмерной  $\pi$ -зон. Построить зависимости указанных выше величин от химического потенциала  $\mu$ , учитывая близость значения  $\mu = \mu_0 \approx 0.74$  эВ для  $\text{MgB}_2$  к верхнему краю энергетической зоны  $\sigma$ , ответственной за сверхпроводимость [4].

3. Ввести относительную плотность носителей заряда  $\delta = (\mu - \mu_0)/\mu_0$ , которая совпадает с соответствующей величиной, вычисленной на основании учета валентностей элементов, входящих в соединения  $\text{Mg}_{1-x}\text{Li}_x\text{B}_2$ ,  $\text{Mg}_{1-x}\text{Cu}_x\text{B}_2$ ,  $\text{Mg}_{0.8}\text{Li}_{0.2}\text{B}_{2-x}\text{C}_x$ ,  $\text{Mg}_{0.95}\text{Cu}_{0.05}\text{B}_{2-x}\text{C}_x$  и  $\text{MgB}_{2-x}\text{C}_x$  при различных значениях  $x$ . Построенные таким образом зависимости величины  $T_c$  от  $\delta$  позволяют сравнить теоретические и экспериментальные данные (см. рис. 1).

Полученные в работе теоретические результаты качественно согласуются с результатами экспериментов [13]. А именно, введение в  $\text{MgB}_2$  электронов ( $\delta > 0$ ) приводит к убыванию критической температуры  $T_c$  ( $\text{MgB}_{2-x}\text{C}_x$  и  $\text{Mg}_{0.95}\text{Cu}_{0.05}\text{B}_{2-x}\text{C}_x$ ), а

при допировании дырками ( $\delta < 0$ ) величина  $T_c$  ( $\text{Mg}_{1-x}\text{Li}_x\text{B}_2$ ,  $\text{Mg}_{1-x}\text{Cu}_x\text{B}_2$ ) с изменением параметра  $\delta$  не изменяется. В эту схему не вписывается соединение  $\text{Mg}_{0.8}\text{Li}_{0.2}\text{B}_{2-x}\text{C}_x$  [13], в котором  $T_c$  при  $\delta = -0.02$  достигает значения 39.4 К (что соответствует  $\text{MgB}_2$ ) и убывает с уменьшением плотности дырок.

Полученные результаты демонстрируют также количественное согласие предложенной в работе теории с экспериментальными данными для температуры сверхпроводящего перехода  $T_c$  (см. рис. 6). При этом наряду с учетом фактора заполнения энергетических зон (изменения химического потенциала  $\mu$ ) необходимо учитывать рассеяние электронов на примесном потенциале при введении в слоистую структуру атомов С вместо атомов В, ответственного за сверхпроводимость. При учете этих двух механизмов мы получаем зависимость (кривая 2), неплохо описывающую экспериментальные данные ( $\text{MgB}_{2-x}\text{C}_x$  и  $\text{Mg}_{0.95}\text{Cu}_{0.05}\text{B}_{2-x}\text{C}_x$ ). Допирование дырками  $\delta < 0$  ( $\text{Mg}_{1-x}\text{Li}_x\text{B}_2$ ,  $\text{Mg}_{1-x}\text{Cu}_x\text{B}_2$ ) не меняет величину  $T_c$ , поскольку в слой, ответственный за сверхпроводимость, примесь не вводится, а введенные вместо Mg элементы Li и Cu способствуют лишь изменению эффективной валентности В. Убывание величины  $T_c$  (кривая 3) в  $\text{Mg}_{0.8}\text{Li}_{0.2}\text{B}_{2-x}\text{C}_x$  связано с рассеянием электронов на примесном потенциале атомов С.

## ЛИТЕРАТУРА

1. J. Nagamatsu, N. Nakagawa, T. Muranaka et al., Nature (London) **410**, 63 (2001).
2. F. Bouquet, I. Wang, I. Sheikin et al., Physica C **385**, 192 (2003); E-print archives, cond-mat/0210706.
3. P. C. Confield, S. L. Bud'ko, and D. K. Finemore, Physica C **385**, 1 (2003).
4. J. Kortus, I. I. Mazin, K. D. Belashchenko et al., Phys. Rev. Lett. **86**, 4656 (2001).
5. J. M. An and W. E. Pickett, Phys. Rev. Lett. **86**, 4366 (2001).
6. S. V. Shulga, S. L. Drechsler, H. Eschrig et al., E-print archives, cond-mat/0103154.
7. V. A. Moskalenko, Fiz. Met. Metalloved. **8**, 503 (1959); Phys. Met. Metallogr. **8**, 25 (1959).
8. H. Suhl, B. T. Matthias, and L. R. Walker, Phys. Rev. Lett. **3**, 552 (1959).

9. В. А. Москаленко, М. Е. Палистрант, В. М. Вакалюк, УФН **161**, 155 (1991); E-print archives, cond-mat/03099671.
10. М. Е. Palistrant, E-print archives, cond-mat/0305496; Moldavian J. Phys. Sci. **3**, 133 (2004).
11. L. Z. Kon, E-print archives, cond-mat/0309707.
12. М. Е. Palistrant, Int. J. Mod. Phys. **19**, 929 (2005); E-print archives, cond-mat/0312302.
13. S. Jemima Balaselvi, A. Bharathi, V. Sankara Sastry et al., E-print archives, cond-mat/0303022.
14. Z. Hofanova, P. Szabo, P. Samuely et al., Phys. Rev. B **70**, 064520 (2004).
15. М. Е. Palistrant and F. G. Kochorbe, Physica C **194**, 351 (1992).
16. Ф. Г. Кочорбэ, М. Е. Палистрант, ЖЭТФ **104**, 3084 (1993); ТМФ **96**, 459 (1993).
17. O. V. Dolgov, R. K. Kremer, J. Kortus et al., Phys. Rev. B **72**, 024504 (2005).
18. E. J. Nicol and J. P. Carbotte, Phys. Rev. B **71**, 054501 (2005).
19. В. А. Москаленко, М. Е. Палистрант, ДАН СССР **162**, 539 (1965); ЖЭТФ **39**, 770 (1965).
20. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, Наука, Москва (1962).
21. В. А. Москаленко, Л. З. Кон, М. Е. Палистрант, *Низкотемпературные свойства металлов с особенностями зонного спектра*, Штиинца, Кишинев (1989).
22. М. Е. Палистрант, ТМФ **105**, 491 (1995).
23. A. A. Golubov, J. Kortus, O. V. Dolgov et al., J. Phys.: Condens. Matter **14**, 1353 (2002).
24. A. Y. Liu, I. I. Mazin, J. Kortus et al., Phys. Rev. Lett. **87**, 087005 (2001).
25. М. Е. Палистрант, Ф. Г. Кочорбэ, ФНТ **26**, 1077 (2000).