

C.Z.U. 537.312.62.01

CALCULUL TEMPERATURII CRITICE ÎN TEORIA BIZONALĂ A SUPRACONDUCTIBILITĂȚII ÎN AFARA TEOREMEI MIGDAL

Vitalie Ursu

(Institutul de Fizică aplicată)

Este obținută expresia analitică pentru temperatura T_c de tranziție în starea supraconductoare, deosebită de cazul sistemelor obișnuite bizonale prin renormarea mărimilor din ea, datorită efectelor neadiabatică și a corelațiilor electronice puternice. Este cercetată dependența valorii T_c de parametrul Migdal $m = w_0/e_F$. Se demonstrează că evidența suprapunerii benzilor energetice pe suprafața Fermi și a efectelor neadiabatică în cazul valorilor mici ale impulsului transmis ($q \ll 2p_F$) permite obținerea unor valori mari ale temperaturii T_c chiar și în cazul interacțiunii slabe electron-fonon.

Introducere

Materialele cu temperaturi înalte de tranziție în stare supraconductoare, descoperite în ultimii ani [1], posedă o serie de particularități însemnate: anizotropie puternică a proprietăților cristaline, structură stratificată, corelații electronice și interacțiuni electron-fonon puternice, simetrie înaltă în spațiul impulsurilor, suprapunerea benzilor energetice la suprafața Fermi, valori mici ale energiei Fermi etc. Aceste particularități complică evidențierea mecanismului supraconductibilității la temperaturi înalte.

Problema evidențierii și elaborării teoriei supraconductibilității în sisteme neadiabate bizonale, pe calea depășirii limitei teoremei Migdal, este studiată de mai mulți autori [2]. Din aceste cercetări rezultă că funcțiile vertex în cazul $e_F \sim w_0$, unde e_F reprezintă energia Fermi și w_0 – frecvența Debaye, devin negative și nu duc la valori mari ale temperaturii T_c de tranziție în faza supraconductoare. În cazul când impulsul transmis q la interacțiunea electron-fonon este mic în comparație cu impulsul Fermi p_F ($q \ll 2p_F$), se obțin valori esențiale pentru T_c . Situația dată e posibilă, în particular, în sistemele cu corelații electronice puternice [3], [4]. Suprapunerea benzilor energetice la suprafața Fermi conduce la apariția a două salturi energetice care influențează esențial asupra supraconductibilității.

În ultimii ani se efectuează cercetări în căutarea unor noi materiale supraconductibile. Un interes deosebit prezintă compusul MgB_2 , care are temperatura de trecere la supraconductibilitate de circa $T_C \sim 40K$. Această substanță are un șir de anomalii a proprietăților fizice legate de anizotropia sistemului [9], în particular, prezența suprapunerii benzilor energetice pe suprafața Fermi. În anumite condiții pot apărea efecte neadiabatică, deoarece pentru compusul MgB_2 parametrul Migdal $m = w_0/e_F \approx 0,1$.

În lucrarea dată sînt prezentate ecuația și soluția ei pentru temperatura de tranziție T_c în faza supraconductoare cu evidența rolului neadiabaticității și al

corelațiilor electronice puternice în materialele cu temperatură înaltă de tranziție în faza conductoare. La fel sînt efectuate calculele corespunzătoare numerice, analiza lor, precum și calculul coeficientului izotopic α [8].

1. Temperatura critică T_c de tranziție în faza supraconductoare

Pornind de la hamiltonianul sistemului în considerația interacțiunilor electron-fonon și aplicînd metoda diagramelor din teoria perturbațiilor, se obține mai întîi sistemul de ecuații Green.

Constantele interacțiunilor electron-fonon, renormate corespunzător valorilor sale, se prezintă în forma:

$$\begin{aligned} \tilde{I}_{11} &= N_1 \tilde{V}_{11}(0, w_0) = I_{11} + I_{11}^2 \left[2P_{V1}(Q_c, w_0) + P_{C1}(Q_c, w_0) \right], \\ \tilde{I}_{12} &= V_{12} N_2, \quad \tilde{I}_{nn}^z = I_{nn} [1 + I_{nn} P_{Vn}(Q_c, w_0)] \end{aligned} \quad (1)$$

unde P_{Vn} și P_{Cn} sînt funcții vertexe pentru zona a n -a [5], N_n – densitatea stărilor a cavității n pe suprafața Fermi, iar V_{nm} – volumul celulei elementare a rețelei cristaline. Constantele intersecțiunii electron-fonon I_{nm} corespund interacțiunilor de tipul 11 (între particulele primei zone); 12 (între particulele din prima și a doua zonă) etc.

Expresiile pentru operatorii de masă $M_m(W)$ și $S_m(W)$ (diagonali și nediagonali), unde W reprezintă frecvența electronică Matsubara, în funcțiile lui Green, care, în reprezentarea nkW , sînt formulate ținîndu-se cont de diagramele cu intersecția a două linii de interacțiune electron-fonon (ieșire în afara teoremei Migdal), au forma:

$$M_m(\Omega) = \tilde{I}_{mm}^z \frac{1}{bN_m} \sum_{\mathbf{p}_1} \sum_{\Omega_1} D(\Omega, \Omega_1) G_m(\mathbf{p}_1, \Omega_1) - \frac{I_{mn}}{bN_n} \sum_{\mathbf{p}_1} \sum_{\Omega_1} D(\Omega, \Omega_1) G_n(\mathbf{p}_1, \Omega_1), \quad (2)$$

$$\Sigma_1(\Omega) = -\frac{\lambda_{11}^0}{\beta N_1} \sum_{\mathbf{p}_1} \sum_{\Omega_1} D(\Omega, \Omega_1) F_1(\mathbf{p}_1, \Omega_1) - \frac{\lambda_{12}}{\beta N_2} \sum_{\mathbf{p}_1} \sum_{\Omega_1} D(\Omega, \Omega_1) F_2(\mathbf{p}_1, \Omega_1), \quad (3)$$

$$\Sigma_2(\Omega) = -\frac{\lambda_{22}^0}{\beta N_2} \sum_{\mathbf{p}_1} \sum_{\Omega_1} D(\Omega, \Omega_1) F_2(\mathbf{p}_1, \Omega_1) - \frac{\lambda_{21}}{\beta N_1} \sum_{\mathbf{p}_1} \sum_{\Omega_1} D(\Omega, \Omega_1) F_1(\mathbf{p}_1, \Omega_1).$$

unde $b = T^{-1}$, $D(W, W_1)$ – funcția Green pentru fononi, G_m și F_m – funcțiile totale Green pentru starea supraconductibilă. Introducem definiția $\Sigma_n(\Omega) = Z_n(\Omega) \Delta_n(\Omega)$. Substituind în expresiile pentru funcțiile Green, în aproximația liniară, în raport cu Δ_n la limita $T \sim T_c$ și efectuînd integrarea în raport cu energia, corespunzător cu (3), obținem:

$$\begin{aligned}
\Sigma_1(\Omega) &= -\frac{\lambda_{11}^0}{Z_1} \frac{1}{\beta} \sum_{\Omega_1} \frac{\omega_0^2}{(\Omega - \Omega_1)^2 + \omega_0^2} \frac{\Delta_1(\Omega_1)}{|\Omega_1|} \varphi_1(\Omega_1) + \\
&+ \frac{\lambda_{12}}{Z_1} \frac{1}{\beta} \sum_{\Omega_1} \frac{\omega_0^2}{(\Omega - \Omega_1)^2 + \omega_0^2} \frac{\Delta_2(\Omega_1)}{|\Omega_1|} \varphi_2(\Omega_1), \\
\Sigma_2(\Omega) &= -\frac{\lambda_{22}^0}{Z_2} \frac{1}{\beta} \sum_{\Omega_1} \frac{\omega_0^2}{(\Omega - \Omega_1)^2 + \omega_0^2} \frac{\Delta_2(\Omega_1)}{|\Omega_1|} \varphi_2(\Omega_1) + \\
&+ \frac{\lambda_{21}}{Z_2} \frac{1}{\beta} \sum_{\Omega_1} \frac{\omega_0^2}{(\Omega - \Omega_1)^2 + \omega_0^2} \frac{\Delta_1(\Omega_1)}{|\Omega_1|} \varphi_1(\Omega_1),
\end{aligned} \tag{4}$$

unde

$$\begin{aligned}
j_n(\Omega_1) &= \operatorname{arctg} \frac{W_n - m_n}{Z_n(\Omega_1)} + \operatorname{arctg} \frac{m_n}{Z_n(\Omega_1)}, \\
Z_n &= Z_n(0) = 1 - \lim_{\Omega \rightarrow 0} \frac{1}{\Omega} \operatorname{Im} M_n(\Omega) = 1 + I_{nm}^z \frac{1}{2} \left[\frac{W_n - m_n}{W_n - m_n + w_0} + \frac{m_n}{m_n + w_0} \right] + \\
&+ I_{nm} \frac{1}{2} \left[\frac{W_n - m_n}{W_n - m_n + w_0} + \frac{m_n}{m_n + w_0} \right], \quad \tilde{m}_n = m_n - \operatorname{Re} M_n(0), \quad (m \neq n).
\end{aligned} \tag{5}$$

unde W_n reprezintă energia zonei n , m_n – potențialul chimic corespunzător zonei n .

Temperatura de tranziție în starea supraconductoare se determină în rezultatul rezolvării sistemului de ecuații:

$$\Delta_1 = \frac{\tilde{I}_{11}}{Z_1} \Delta_1 \Phi_1(T_c) + \frac{I_{12}}{Z_1} \Delta_2 \Phi_2(T_c), \quad \Delta_1 = \frac{I_{21}}{Z_2} \Delta_1 \Phi_1(T_c) + \frac{\tilde{I}_{22}}{Z_2} \Delta_2 \Phi_2(T_c). \tag{6}$$

unde $\Phi_n(T_c)$ reprezintă funcția de temperatură critică.

Considerînd determinantul acestui sistem de ecuații egal cu zero, obținem:

$$(\bar{I}_{11} \bar{I}_{22} - \bar{I}_{12} \bar{I}_{21}) \Phi_1(T_c) \Phi_2(T_c) - \bar{I}_{11} \Phi_1(T_c) - \bar{I}_{22} \Phi_2(T_c) + 1 = 0, \tag{7}$$

unde $\bar{I}_{11} = \tilde{I}_{11}/Z_1$; $\bar{I}_{22} = \tilde{I}_{22}/Z_2$; $\bar{I}_{12} = I_{12}/Z_1$; $\bar{I}_{21} = I_{21}/Z_2$.

Funcția $\Phi_n(T_c)$ se reduce la forma:

$$\begin{aligned}
\Phi_n(T_c) &= pT_c \sum_{\Omega_1} \frac{w_0^2}{\Omega_1^2 + w_0^2} \frac{1}{|\Omega_1|} - T_c \sum_{\Omega_1} \frac{w_0^2}{\Omega_1^2 + w_0^2} \frac{1}{|\Omega_1|} \left[\operatorname{arctg} \frac{|\Omega_1|}{W_n - \bar{m}_n} + \operatorname{arctg} \frac{|\Omega_1|}{\bar{m}_n} \right] - \\
&- T_c \sum_{\Omega_1} \frac{w_0^2 |\Omega_1|}{(\Omega_1^2 + w_0^2)^2} j_n(\Omega_1).
\end{aligned} \tag{8}$$

unde $m_n = m - z_n$ (z_n reprezintă nivelul energetic de jos a zonei n).

Primul termen al acestei expresii conține singularitate logaritmică în raport cu mărimea T_c și în aproximația legăturii slabe ($T_c/w_0 \ll 1$) devine egal cu:

$$pT_c \sum_{\Omega_1} \frac{w_0^2}{\Omega_1^2 + w_0^2} \frac{1}{|\Omega_1|} \approx \ln \frac{2w_0 g}{pT_c}. \tag{9}$$

În aceeași aproximație, în restul termenilor, integrarea în raport cu frecvența poate fi executată în limitele de la minus la plus infinit (analog cu cazul $T = 0$). Pentru $\Phi_n(T_c)$ obținem:

$$\Phi_n(T_c) = x_c + f_n, \quad x_c = \ln \frac{2w_0g}{pT_c}, \quad (10)$$

$$f_n = -\frac{1}{2} \left[\ln(1+m_n) + \ln(1+m'_n) - \frac{1}{2} + \frac{1}{4} \left(\frac{m_n}{1+m_n} + \frac{m'_n}{1+m'_n} \right) \right], \quad (11)$$

$$m_n = \frac{w_0}{\bar{W}_n - \bar{m}_n}, \quad m'_n = \frac{w_0}{\bar{m}_n}, \quad \bar{W}_n = \frac{W_n}{Z_n}, \quad \bar{m}_n = \frac{m_n}{Z_n}.$$

Substituind expresia (10) în ecuația (7), obținem:

$$\bar{a}x_c^2 - \bar{b}x_c + \bar{c} = 0, \quad (12)$$

unde

$$\begin{aligned} \bar{a} &= \bar{I}_{11}\bar{I}_{22} - \bar{I}_{12}\bar{I}_{21}; & \bar{b} &= \bar{I}_{11} + \bar{I}_{22} - \bar{a}(f_1 + f_2), \\ \bar{c} &= 1 - \bar{I}_{11}f_1 - \bar{I}_{22}f_2 + \bar{a}f_1f_2. \end{aligned} \quad (13)$$

La fel putem scrie:

$$T_c = \frac{2w_0g}{p} e^{-x_c}, \quad x_c = \frac{\bar{b} \pm \sqrt{\bar{b}^2 - 4\bar{a}\bar{c}}}{2\bar{a}}. \quad (14)$$

Formal expresia (14) coincide cu expresia corespunzătoare din cazul supraconductorului bizonal obișnuit [6]. Însă mărimile din ea sînt renormate și conțin contribuții suplimentare determinate de neadiabaticitatea sistemului.

2. Rezultatele calculelor numerice

Calculul numeric, efectuat conform expresiilor de mai sus (14), se simplifică pentru cazul particular cînd parametrul Migdal egal cu $m = m_1 = m_2$ ($m_n = \frac{2\omega_0}{W_n}$), iar

populația zonelor energetice $\mu_n = \frac{W_n}{2}$. În cazul sistemelor cercetate (cînd impulsul transmis la interacțiunea electron-fonon este mic ($q \ll 2p_F$)) parametrii teoriei sînt egali cu cei ai sistemelor reale ce posedă aceleași proprietăți [7]. Alegem parametrii astfel:

$$\lambda_{11} = 0,5; \quad \lambda_{22} = 0,3; \quad \lambda_{12} = 0,1; \quad \lambda_{21} = 0,05.$$

Valorile renormate ale parametrilor $\bar{\lambda}_{nm}$ în cazul $Q_c = 0,1$ și $Q_c = 0,9$, unde Q_c reprezintă frecvența critică Matsubara, se capătă în baza relațiilor (7), (1) și (5) sînt indicate în tabelele 1 și 2.

Dependența raportului T_c/w_0 de valorile parametrului Migdal m este indicată în figură. Comparînd curbele din figură, observăm că efectele neadiabaticității sistemului și corelațiile electronice puternice măresc esențial temperatura de tranziție în faza supraconductoare în cazul $Q_c \ll 1$.

Tabelul 1.

Valorile renormate ale parametrilor $\bar{\lambda}_{nm}$ în cazul $Q_c = 0,1$

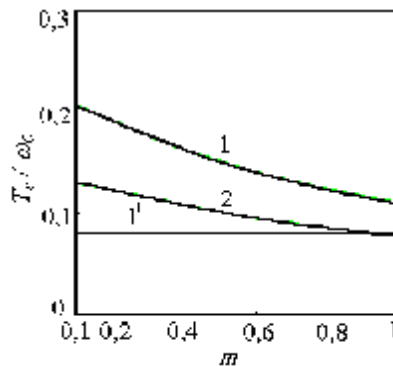
\bar{m}	P_{V_1}	P_{C_1}	$\bar{\lambda}_{11}$	$\bar{\lambda}_{22}$	$\bar{\lambda}_{12}$	$\bar{\lambda}_{21}$
0	0	0	0,312	0,240	0,065	0,038
0,1	0,679	0,656	0,590	0,350	0,058	0,036
0,3	0,565	0,553	0,584	0,344	0,064	0,038
0,6	0,426	0,425	0,568	0,333	0,069	0,040
0,9	0,342	0,342	0,556	0,320	0,073	0,042

Tabelul 2.

Valorile renormate ale parametrilor $\bar{\lambda}_{nm}$ în cazul $Q_c = 0,9$

\bar{m}	P_{V_1}	P_{C_1}	$\bar{\lambda}_{11}$	$\bar{\lambda}_{22}$	$\bar{\lambda}_{12}$	$\bar{\lambda}_{21}$
0	0	0	0,312	0,240	0,065	0,038
0,1	-0,053	-0,044	0,315	0,223	0,065	0,038
0,3	-0,012	-0,0096	0,322	0,227	0,068	0,039
0,6	-0,008	-0,112	0,339	0,236	0,073	0,041
0,9	-0,005	-0,113	0,360	0,245	0,076	0,042

Mai mult ca atât, valoarea maximă a acestei mărimi se atinge în domeniul valorilor mici ale parametrului m ($m \sim 0,1$). În cazul $Q_c \sim 1$ se observă micșorarea valorii T_c și dependența slabă a ei de m . Din materialele cu valori mici m ($m \sim 0,1$) face parte și supraconductorul bi-bandă MgB_2 . Prezența corelațiilor puternice ale electronilor sau particularitățile în spectrul energetic al electronilor în asemenea tipuri de sisteme poate stimula amplificarea influenței efectelor neadiabaticității asupra supraconductibilității.



Dependența temperaturii T_c de parametrul Migdal m . Curbele 1 și 1' corespund cazului sistemului neadiabatic pentru $Q_c = 0,1$ și $Q_c = 0,9$, corespunzător. Curba 2 - cazului sistemului adiabatic.

Bibliografie

1. Bernorz, J.G., Muller, K.A., *Supraleitfähigkeit in nonadiabtic systems*, *Zhuornal Physiksc*, 1986, B 64, p.189-197.

2. Danilenko, O.V., Dolgov, O.V., *Nonadiabatic contribution to the quasiparticle self-energy in systems with strong electron-phonon interaction* // arXiv, [http: xxx.lanl.gov/](http://xxx.lanl.gov/), 2000, preprint cond-mat 0007189, 20 p..
3. Kubic, M.L., Zeyher, R., *Anisotropic impurities in superconductors*, Physical Review, 1994, B 49, p. 4395 – 4404.
4. Zeyher, R., Kubic, M.L., *Statics and dynamics of charge fluctuations in the J model*, Physical Review, 1996, B 53, p. 2850 - 2863.
5. Pietronero L., Strassler S., Grimaldi C., *All substitution in crystals and influence on superconducting and structural properties*, Physical Review, 1995, B 52, p.10516 – 10523.
6. В.А. Москаленко, *Двухзонная теория сверхпроводников на основании уравнений Гинзбурга-Ландау*, Физика Металлов и Металловедение, 1959, т. 8, с.503-517.
7. Golubov, A.A., Kortus, J. at al., *Multiband model for penetration depth in MgB₂*, Journal of Physics: Condensed Matter, 2002, N. 14, p.1353-1365.
8. Palistrant, M.E., Ursu, V.A., *Superconductivity in two-band nonadiabatic systems* // arXiv, [http: xxx.lanl.gov/](http://xxx.lanl.gov/), 2006, preprint cond-mat 0602551, 17 p.
9. Alexandrov, A.S., Breakdown of the Migdal – Elirshbery theory in the strong – coupling adiabatic regime, // <http://www.lanl.gov/>

THE COMPUTATION OF THE CRITICAL TEMPERATURE IN THE TWO-BAND THEORY OF SUPRACONDUCTIVITY APART FROM THE MIGDAI THEOREM

Vitalie Ursu

(Institute of Applied Physics)

The analytic expression for the temperature T_c of transition in the superconductivity state differs from simple two-band systems by renormating dimensions, that are inside, thanks to nonadiabatical effects and to strong electronic correlations. The dependence of the T_c from the parameter Migdal $m=w_0/e_F$ has been investigated. It has been demonstrated that the presence of overlapping of energy bands of the surface Fermi and of nonadiabatical effects in the case of small values of the transmitted impulse ($q < 2p_F$) gives the possibility to get high values of the T_c , even in the case of small electron-phonon interactions.

Prezentat la redacție la 18.11.06