

537.312.62

КРИТИЧЕСКАЯ ТЕМПЕРАТУРА СВЕРХПРОВОДНИКОВ С СИЛЬНОЙ СВЯЗЬЮ

О. В. Долгов, Е. Г. Максимов

СОДЕРЖАНИЕ

1. Введение	95
2. Критерий сверхпроводимости для систем со слабой связью	96
3. Диэлектрическая проницаемость и проблема высокотемпературной сверхпроводимости	98
а) О возможности существования отрицательных значений статической диэлектрической проницаемости (98). б) Однородный электронный газ (99).	
в) Диэлектрическая проницаемость кристалла (103).	
4. Уравнения сверхпроводимости для систем с сильной связью	108
а) Общий анализ эффектов сильной связи (108). б) Вывод уравнений сверхпроводимости для систем с сильным взаимодействием (110).	
5. Исследование критической температуры сверхпроводников с сильным электрон-фононным взаимодействием	113
а) Вычисление критической температуры (113). б) Спектральная плотность электрон-фононного взаимодействия и зависимость T_c от свойств нормального металла (120).	
6. Заключение	125
Цитированная литература	126

1. ВВЕДЕНИЕ

Поиски сверхпроводников с высоким значением критической температуры являются одной из наиболее актуальных и привлекательных задач в физике твердого тела. Решение этой проблемы сулит столь большие практические выгоды, что вполне оправдывает не только существование большого числа оригинальных работ по данной проблеме, но и появление еще одного обзора на эту тему. Особенно активно исследования по проблеме высокотемпературной сверхпроводимости, однако, к сожалению, в основном лишь в теоретическом плане, начались с 1964 г. после известных предложений Литтла¹ и Гинзбурга² о возможности нефононных механизмов сверхпроводимости. Подробный обзор развития проблемы и ее состояния на тот момент времени был дан в 1977 г. в книге³. Целью настоящей статьи является обсуждение некоторых новых результатов, появившихся в проблеме за последние годы. Особенно это касается вопросов, связанных с выяснением роли эффектов локального поля и сильной связи в проблеме высокотемпературной сверхпроводимости, в том числе и для нефононных механизмов сверхпроводимости (см., в частности, ³⁻⁵).

Материал в обзоре распределен следующим образом. В гл. 2 обсуждается критерий эффективности механизмов сверхпроводимости. Этот вопрос не является новым и уже излагался ранее, поэтому мы старались уделить ему как можно меньше внимания и места.

В третьей главе подробно обсуждается вопрос об отрицательных значениях статической диэлектрической проницаемости (ДП) и, в частности, взаимосвязь между существованием $\epsilon(\mathbf{q}, 0) < 0$ и магнитной и структурной неустойчивостями системы. В четвертой главе излагается вывод уравнений сверхпроводимости для сильно взаимодействующих систем. Заключительная пятая глава посвящена рассмотрению сверхпроводников с сильным электрон-фононным взаимодействием. В ней обсуждаются возможные ограничения на T_c , существующие в рамках уравнений Элиашберга. Дано подробное рассмотрение микроскопического определения функции спектральной плотности электрон-фононного взаимодействия. В работе используется система единиц $\hbar, k_B = 1$.

2. КРИТЕРИЙ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ ДЛЯ СИСТЕМ СО СЛАБОЙ СВЯЗЬЮ

Наше рассмотрение проблемы высокотемпературной сверхпроводимости мы начнем с краткого повторения известных результатов для систем со слабым взаимодействием³. Это позволит нам, во-первых, четко сформулировать ряд основных вопросов, существенных и для более строгого обсуждения этой проблемы. Во-вторых, такое рассмотрение представляет интерес и само по себе, поскольку большая часть теоретических работ по проблеме высокотемпературной сверхпроводимости выполнена именно для систем со слабой связью.

Прежде всего, если записать эффективное межэлектронное взаимодействие в квазизотропной системе в виде

$$V_{\text{eff}}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{4\pi e^2}{q^2 \epsilon(\mathbf{q}, \omega)}, \quad (1)$$

где $\epsilon(\mathbf{q}, \omega)$ — полная диэлектрическая проницаемость системы, то можно выразить критическую температуру сверхпроводящего перехода T_c через функцию $\epsilon(\mathbf{q}, \omega)$ следующим образом³:

$$T_c = \frac{\bar{\omega}}{1,45} \exp \left(-\frac{1}{\lambda - \mu^*} \right), \quad (2)$$

где

$$\mu^* = \frac{\mu}{1 + \mu \ln(\omega_F/\bar{\omega})}, \quad (3)$$

λ и μ — константы притягивающего электрон-фононного (экситонного) и отталкивателяного кулоновского взаимодействий. При этом величины ω , λ и μ могут быть выражены через интегралы от спектральной плотности ДП $\text{Im } \epsilon^{-1}(\mathbf{q}, \omega)$. Мы не будем здесь приводить этих формул (они имеются в книге³), а приведем лишь очень существенное для дальнейшего соотношение, связывающее константы λ и μ :

$$\mu - \lambda = N(0) \left\langle \frac{4\pi e^2}{q^2} \epsilon^{-1}(\mathbf{q}, 0) \right\rangle, \quad (4)$$

здесь $N(0)$ — плотность состояний электронов на поверхности Ферми, а угловые скобки в правой части равенства (4) указывают на усреднение по импульсам \mathbf{q} .

Как впервые было замечено Коэном и Андерсоном⁶ (см. также⁷), формулы (2) — (4) позволяют установить довольно сильные ограничения на максимальные значения критической температуры сверхпроводящего

перехода T_c^{\max} . Так, если считать, что для величин λ и μ существует неравенство

$$\lambda \leq \mu, \quad (5)$$

то величина T_c , как функция средней фононной частоты $\bar{\omega}$, является ограниченной функцией и имеет максимальное значение T_c^{\max} при некоторой частоте ω_{op} . При этом в наиболее благоприятном случае $\lambda = \mu$ величина T_c^{\max} равна

$$T_c^{\max} = \frac{\varepsilon_F}{1.45} e^{-3/\lambda}, \quad (6)$$

где ε_F — энергия Ферми электронов. Простейший учет эффектов сильной связи, приводящий к перенормировке константы связи λ и ее замене на $\lambda/(1 + \lambda)$, дает даже еще более сильное ограничение на T_c^{\max} :

$$T_c^{\max} = \frac{\varepsilon_F}{1.45} e^{-3-(3/\lambda)}. \quad (7)$$

Взяв значение $\varepsilon_F \approx 1$ эВ и $\lambda = \mu = 1/2$, *), мы получаем для T_c^{\max} значение порядка 1 К. Следует подчеркнуть, что полученное ограничение в одинаковой мере относится к любым механизмам сверхпроводимости: к фононным и нефононным. Более того, как следует из формул (2) — (7), оптимальные средние частоты ω_{op} , отвечающие T_c^{\max} , лежат именно в области фононных частот кристалла. Это показывает, что в системах, где справедливо неравенство (5), любые нефононные механизмы сверхпроводимости окажутся совершенно неэффективными. Таким образом, неравенство, обратное (5), т. е.

$$\lambda > \mu, \quad (8)$$

можно рассматривать как критерий существования эффективного механизма сверхпроводимости с высокими значениями T_c .

Более тщательный анализ уравнений сверхпроводимости показывает, что существует еще одна причина понижения значений T_c , которая не была учтена в приведенном выше рассмотрении. Дело в том, что в уравнениях, описывающих сверхпроводимость в системах со слабым взаимодействием ⁷, решением которых является выражение (2) для T_c , не учитывалась возможность существования спиновых флуктуаций. Эти эффекты можно принять во внимание в рамках обобщенного приближения хаотических фаз, учитывающего, помимо прямого кулоновского отталкивания, еще обменное взаимодействие между электронами. Выражение для T_c в этом приближении может быть записано в виде ⁸

$$T_c = \frac{\bar{\omega}}{1.45} \exp \left[- \left(\lambda - \mu^* - \alpha \mu \ln \frac{1}{1-\mu} \right)^{-1} \right], \quad (9)$$

где α — численный коэффициент порядка 1. В этом приближении критерий сверхпроводимости имеет вид

$$\lambda > \mu^* + \alpha \mu \ln \frac{1}{1-\mu}. \quad (10)$$

Как видно из этого неравенства, при больших μ спиновые флуктуации очень сильно понижают значение T_c . Впервые вывод о разрушающем действии спиновых флуктуаций на сверхпроводимость был сделан в работе

*) $\mu = 1/2$ — наибольшее значение кулоновской константы в пределе слабой связи (см. ³).

Берка и Шриффера⁹; он часто используется для объяснения отсутствия сверхпроводимости в таких металлах, как палладий.

Таким образом, из результатов обсуждения, проведенного в этом разделе, следует, что в системах с положительной статической ДП (т. е. при $\epsilon(q, 0) > 0$) сверхпроводимость, если и может существовать, то лишь при очень низких температурах при условии, что $\lambda \leq \mu \leq 1$ (см. 9). К сожалению, эта ситуация не представляет существенного практического интереса. Отсюда следует, что кардинальным вопросом для всей проблемы высокотемпературной сверхпроводимости является возможность существования отрицательных значений статической ДП, а также выяснение природы появления отрицательного знака величины $\epsilon(q, 0)$.

3. ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ПРОНИЦАЕМОСТЬ И ПРОБЛЕМА ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ

а) О возможностях существования отрицательных значений статической диэлектрической проницаемости.

Вопрос о допустимых значениях статической ДП уже неоднократно обсуждался в литературе^{3-6, 10-13}. Подробный анализ этой проблемы был дан в работе Киржница¹³. Им было показано, что имевшиеся в литературе утверждения о допустимости лишь положительных значений величины $\epsilon(q, 0)$ на самом деле справедливы лишь без учета пространственной дисперсии, т. е. для величины $\epsilon(q, 0)$ при волновом векторе $q = 0$. Именно этот случай, например, и рассмотрен в книге Ландау и Лифшица¹⁰. Распространение этого утверждения на системы с пространственной дисперсией (т. е. для величин $\epsilon(q, 0)$ при $q \neq 0$), имеющееся в книге Пайнса и Нозьера¹¹ и в уже упоминавшейся работе Коэна и Андерсона⁶, вообще говоря, неверно. Киржничем¹³ было показано, что существование отрицательных значений статической ДП не противоречит условиям причинности и устойчивости системы. Однако вопрос о реальном существовании систем с $\epsilon(q, 0) < 0$ в работе¹³ практически не затрагивался. Близкие вопросы рассматривались также в более ранней статье Мартина¹². В ней исследовалась проблема существования соотношений Крамерса — Кронига для функции $\epsilon(q, \omega)$ и возможность нарушения этих соотношений. Проблема отрицательных значений величины $\epsilon(q, 0)$ в этой работе не упоминалась, хотя фактически нарушение соотношений Крамерса — Кронига для функции $\epsilon(q, \omega)$ и может означать возможность неравенства $\epsilon(q, 0) < 0$. Подробно вопрос о реальном существовании как изотропных, так и кристаллических систем с отрицательным значением статической ДП был изучен в работах^{4, 5, 14}. В этих работах была установлена физическая природа эффектов, приводящих к отрицательности величины $\epsilon(q, 0)$, и выяснены условия, необходимые для их реального существования в ряде систем. Было показано, что неравенство $\epsilon(q, 0) < 0$ может возникать только за счет эффектов локального поля, т. е. отличия эффективного поля действующего на частицы среды, от среднего поля в системе, по отношению к которому определяется ДП. Эффекты локального поля не представляют собой чего-либо принципиально нового в теории конденсированных систем и уже довольно давно, правда с другими целями, изучались как в рамках классической электродинамики¹⁵⁻¹⁷, так и в классической¹⁸ и в квантовой плазме¹⁹. В этом разделе мы кратко изложим результаты, полученные в работах^{4, 5, 14, 20} и обсудим некоторые выводы, вытекающие из этих исследований для проблемы высокотемпературной сверхпроводимости.

(б Однородный электронный газ

Наше рассмотрение начнем с простейшей модели — однородного взаимодействующего электронного газа на нейтрализующей подложке, в которой не существует никаких фононных возбуждений. Это позволит нам исследовать принципиальную возможность существования нефононных механизмов сверхпроводимости, предложенных Литтлом¹ и Гинзбургом², а также понять причины, вследствие которых получение реальных веществ с такими механизмами представляется крайне сложным делом.

Прежде всего сформулируем основные вопросы, которые нам следует обсудить для однородного электронного газа. Во-первых, необходимо доказать принципиальную возможность существования неравенства $\epsilon(\mathbf{q}, 0) < 0$. Во-вторых, установить, какие неустойчивости могут существовать во взаимодействующем электронном газе, и в какой мере эти неустойчивости могут препятствовать появлению отрицательных значений статической ДП.

Свойства взаимодействующего электронного газа могут быть полностью охарактеризованы одним безразмерным параметром r_s , связанным с плотностью электронов n соотношением

$$\frac{1}{n} = \frac{4\pi}{3} (a_B r_s)^3. \quad (11)$$

Параметр r_s определяет (в единицах боровского радиуса электрона $a_B = 1/m e^2$) радиус сферы, объем которой равен среднему объему, приходящемуся на один электрон. По порядку величины этот параметр совпадает с отношением потенциальной энергии электронов, взаимодействующих по закону Кулона, к их средней кинетической энергии.

Как хорошо известно (см., например, обзоры^{5,19}), при малых r_s ($r_s \ll 1$) свойства взаимодействующего электронного газа близки к свойствам идеального газа невзаимодействующих частиц, и статическая ДП при этом является величиной заведомо положительной ($\epsilon(\mathbf{q}, 0) > 1$). Никаких неустойчивостей в этих условиях в электронном газе также не проявляется. С увеличением в электронном газе параметра r_s , или, что то же самое, с уменьшением плотности, статическая ДП может стать отрицательной. В то же время при увеличении параметра r_s электронный газ может стать неустойчивым относительно образования в нем состояний с волновой плотности заряда (ВЗП) или спина (ВСП). Для нахождения значений r_s , при которых в электронном газе появляется отрицательный знак статической ДП, а также возникают неустойчивости относительно перехода в состояния с ВСП и ВЗП, мы запишем выражения для ДП, зарядовой ($\chi(\mathbf{q}, 0)$) и спиновой ($\chi_s(\mathbf{q}, 0)$) восприимчивостей. Эти формулы имеют вид^{5,20}

$$\epsilon(\mathbf{q}, 0) = 1 + \frac{V(\mathbf{q}) \chi_0(\mathbf{q}, 0)}{1 - V(\mathbf{q}) G(\mathbf{q}, 0) \chi_0(\mathbf{q}, 0)}, \quad (12)$$

$$\chi(\mathbf{q}, 0) = \frac{\chi_0(\mathbf{q}, 0)}{1 + V(\mathbf{q}) [1 - G(\mathbf{q}, 0)] \chi_0(\mathbf{q}, 0)}, \quad (13)$$

$$\chi_s(\mathbf{q}, 0) = \frac{\mu_B \chi_0(\mathbf{q}, 0)}{1 - V(\mathbf{q}) \tilde{G}(\mathbf{q}, 0) \chi_0(\mathbf{q}, 0)}; \quad (14)$$

здесь $V(\mathbf{q}) = 4\pi e^2/\mathbf{q}^2$, $G(\mathbf{q}, 0)$ — зарядовая функция поправок на локальное поле, $\tilde{G}(\mathbf{q}, 0)$ — спиновая функция поправок на локальное поле, μ_B — магнетон Бора и $\chi_0(\mathbf{q}, 0)$ — обычная функция Линдхарта.

$$\chi_0(\mathbf{q}, 0) = \frac{m k_F}{2\pi^2} \left[1 + \frac{(2k_F)^2 - q^2}{4k_F q} \ln \left| \frac{2k_F + q}{2k_F - q} \right| \right], \quad (15)$$

где k_F — импульс Ферми.

Прежде всего, как следует из формул (12) и (13), условие появления отрицательных значений статической ДП имеет вид

$$V(\mathbf{q}) G(\mathbf{q}, 0) \geq \frac{1}{\chi_0(\mathbf{q}, 0)}, \quad (16)$$

а условие неустойчивости относительно появления ВЗП ($\chi = \infty$) —

$$V(\mathbf{q}) G(\mathbf{q}, 0) \geq V(\mathbf{q}) + \frac{1}{\chi_0(\mathbf{q}, 0)}. \quad (17)$$

Учитывая, что величины $G(\mathbf{q}, 0)$ и $\chi_0(\mathbf{q}, 0)$ — монотонно растущие функции параметра r_s , из выражений (16) и (17) следует, что статическая диэлектрическая проницаемость становится отрицательной при r_s меньших, чем те, что отвечают спонтанному появлению ВЗП в системе.

Возникновение волн плотности заряда или, что то же самое, кристаллизации, происходит обычно фазовым переходом I рода, т. е. при r_s меньших, чем те, которые вытекают из условия (17). Это обстоятельство, однако, ни в коей мере не препятствует существованию отрицательных значений статической ДП. Во-первых, как это будет показано позже, у взаимодействующего электронного газа в состоянии с волновой плотностью заряда статическая ДП $\varepsilon(\mathbf{q}, 0)$ является отрицательной. Во-вторых, значение $r_s^{(1)}$, при котором $\varepsilon(\mathbf{q}, 0)$ становится отрицательной, и $r_s^{(2)}$, при котором электронный газ кристаллизуется, очень сильно отличаются по порядку величины ($r_s^{(1)} \ll r_s^{(2)}$). Статическая ДП электронного газа становится отрицательной при $r_s \lesssim 6,02$ ²⁰. Кристаллизация же электронного газа в соответствии как с расчетами, проведенными методом Монте-Карло^{21,22}, так и из различного рода приближенных оценок²³ происходит при $r_s \approx 70-100$.

Гораздо более сложен вопрос о взаимосвязи между отрицательностью статической ДП и неустойчивостью системы относительно спонтанного возникновения ВСП. В уже упоминавшемся обобщенном приближении хаотических фаз (учитывающем помимо прямого кулоновского лишь обменное взаимодействие электронов) зарядовая и спиновая функции поправок на локальное поле равны друг другу¹⁹.

$$G(\mathbf{q}, 0) = \tilde{G}(\mathbf{q}, 0) = \frac{1}{4} \frac{q^2}{k_F^2}. \quad (18)$$

Это означает, что отрицательные значения величины $\varepsilon(\mathbf{q}, 0)$ возникают при тех же значениях $r_s = 6,02$, при которых система становится абсолютно неустойчива относительно спонтанного возникновения ВСП.

Можно, однако, показать²⁰, что переход в ферромагнитное состояние взаимодействующего электронного газа всегда будет фазовым переходом 1-го рода, причем это будет переход в состояние с полной намагниченностью, когда спины всех электронов выстроются в одном направлении. В рамках обобщенного метода хаотических фаз этот переход будет иметь место^{20,24} при $r_s = (2\pi/5\alpha)(2^{1/3} + 1) \simeq 5,45$. В ферромагнитной фазе статическая ДП станет отрицательной, начиная с $r_s = 7,61$. Ясно, однако, что в этом случае даже при наличии отрицательных значений величины $\varepsilon(\mathbf{q}, 0)$ не может быть никакой речи о существовании обычного сверхпроводящего состояния со спаренными электронами с антипараллельными спинами. В ферромагнитном состоянии однородного электронного газа с отрицательной статической ДП можно было бы ожидать существования сверхпроводимости с триплетным спариванием электронов, в чем-то сходной со сверхтекучестью жидкого ^3He . Однако однородного электронного газа в природе не существует. Наиболее близкой к рассматриваемой нами системе является электронная жидкость в простых металлах, в частности,

в цезии, где параметр $r_s = 5,64$. Это значение r_s больше, чем $r_s = 5,45$, отвечающее переходу однородного электронного газа в ферромагнитное состояние в обобщенном приближении хаотических фаз. Однако экспериментально в цезии не наблюдается никаких магнитных аномалий. Уже этот факт показывает неадекватность данного приближения для описания свойств взаимодействующего электронного газа.

Рассмотрим проблему взаимосвязи отрицательных значений величины $\varepsilon(\mathbf{q}, 0)$ и неустойчивости системы относительно спонтанного возникновения ВСП с учетом как обменных, так и корреляционных эффектов. Зарядовая и спиновая функции поправок на локальное поле $G(\mathbf{q}, 0)$ и $\tilde{G}(\mathbf{q}, 0)$ могут быть записаны в следующем виде^{5,25}:

$$G(\mathbf{q}, 0) = \frac{1}{2} [G_p(\mathbf{q}, 0) + G_a(\mathbf{q}, 0)], \quad (19)$$

$$\tilde{G}(\mathbf{q}, 0) = \frac{1}{2} [G_p(\mathbf{q}, 0) - G_a(\mathbf{q}, 0)]. \quad (20)$$

Здесь $G_p(\mathbf{q}, 0)$ — функция поправок на локальное поле для электронов с параллельными спинами, и $G_a(\mathbf{q}, 0)$ — то же самое для электронов с антипараллельными спинами. Все эти функции, так же как и $G(\mathbf{q}, 0)$ и $\tilde{G}(\mathbf{q}, 0)$, являются положительно определенными⁵. Учет только обменного взаимодействия означает пренебрежение эффектами корреляций между электронами с противоположными спинами. Как уже отмечалось, в этом случае $G(\mathbf{q}, 0) = \tilde{G}(\mathbf{q}, 0)$. При учете корреляционных эффектов, как видно из формул (12) и (14) с учетом (19) и (20), статическая ДП становится отрицательной при значениях r_s меньших, чем r_s , отвечающих появлению спиновой неустойчивости

$$V(\mathbf{q}) \tilde{G}(\mathbf{q}, 0) = \frac{1}{\chi_0(\mathbf{q}, 0)}. \quad (21)$$

Для определения конкретных значений r_s необходимо вычислить каким-либо способом функции поправок на локальное поле. Существует огромное число работ, посвященных решению этой задачи²⁶⁻²⁸ (см. также обзоры^{19,29}). Подробный анализ этой проблемы был дан в работе²⁰ в рамках метода функционала плотности. Наиболее распространенный подход к расчету корреляционных эффектов в этом методе — это использование локального приближения для функционала обменно-корреляционной энергии:

$$E_{XC}\{n(\mathbf{r})\} = \int d\mathbf{r} \varepsilon_{XC}(n(\mathbf{r}), s(\mathbf{r})) n(\mathbf{r}). \quad (22)$$

В этом приближении функции $G(\mathbf{q}, 0)$ и $\tilde{G}(\mathbf{q}, 0)$ имеют вид²⁰

$$G(\mathbf{q}, 0) = -\frac{q^2}{4\pi e^2} \frac{\partial^2}{\partial n^2} [\varepsilon_{XC}(n, s)n] \quad (23)$$

и

$$\tilde{G}(\mathbf{q}, 0) = -\frac{q^2}{4\pi e^2} \frac{1}{n} \frac{\partial^2}{\partial s^2} [\varepsilon_{XC}(n, s)]. \quad (24)$$

Используя для обменно-корреляционной энергии $\varepsilon_{XC}(n, s)$ выражения, вытекающие из микроскопических расчетов³⁰⁻³³, которые используют различные приближения для учета корреляционных эффектов, в работе²⁰ были вычислены функции $G(\mathbf{q}, 0)$ и $\tilde{G}(\mathbf{q}, 0)$ в пределе малых \mathbf{q} . В результате были рассчитаны энергия основного состояния системы, величина

$\lim_{q \rightarrow 0} (q^2 \epsilon(q, 0))^{-1}$, определяющая знак статической ДП при малых импульсах q , а также магнитная восприимчивость при различных значениях параметра r_s . В табл. I²⁰ приведены значения параметра $r_s^{(1)}$, при котором

Таблица I

	По ³³	По ³⁰	По ³¹	По ³²
$r_s^{(1)}$	5,145	5,109	5,06	5,225
$r_s^{(2)}$	16,33	10,25	8,82	7,72
$r_s^{(3)}$	18,10	11,16	9,82	8,46

статическая ДП становится отрицательной, и $r_s^{(2)}$, при котором происходит фазовый переход в ферромагнитное состояние, а также точка абсолютной неустойчивости парамагнитного состояния $r_s^{(3)}$, в которой расходится спиновая магнитная восприимчивость для различных приближений³⁰⁻³³.

Как видно из табл. I, все четыре использованных приближения приводят примерно к одинаковым значениям $r_s^{(1)}$. Видно также, что учет корреляционных эффектов приводит к уменьшению значения $r_s^{(1)}$ по сравнению с $r_s^{(1)} = 6,02$, получающимся в обобщенном приближении хаотических фаз. Что касается перехода в ферромагнитное состояние, то значения $r_s^{(2)}$ при учете корреляционных эффектов возрастают по сравнению с чисто обменной ситуацией. Это показывает, что корреляционные эффекты уменьшают как стремление однородного электронного газа к переходу в ферромагнитное состояние, так и роль спиновых флуктуаций. Таким образом, формула (9) для критической температуры сверхпроводящего перехода, полученная в обобщенном приближении хаотических фаз, заведомо завышает влияние спиновых флуктуаций на величину T_c . Недавно Пёрдью и Датта³⁴ получили довольно близкие результаты, касающиеся расчета $r_s^{(3)}$. Возможность фазового перехода I рода и отрицательных значений статической ДП в этой работе не обсуждалась.

Значения $r_s^{(2)}$ (ферромагнитный переход), полученные во всех этих наиболее распространенных в современной литературе схемах, заведомо нереалистичны. Как было показано в недавней работе Боско, Вилка и Нукаир³⁵, приближения для зависимости функции $\epsilon_{xc}(n, s)$ от плотности спинов s , использованные в работах³⁶⁻³⁹, являются неудовлетворительными в интервале металлических плотностей ($1 \leq r_s \leq 6$). В этой работе была получена¹ интерполяционная формула для $\epsilon_{xc}(n, s)$, вычисленная из сравнения с численными данными, даваемыми методом Монте-Карло^{21,22}. Используя эту формулу, в работе²⁰ были получены следующие значения: $r_s^{(1)} = 5,28$, $r_s^{(2)} = 79,7$, $r_s^{(3)} = 99,1$.

Таким образом, результаты, полученные для $r_s^{(2)}$ и $r_s^{(3)}$ с использованием приближения для $\epsilon_{xc}(n, s)$, предложенного в³⁵, существенно отличаются от приведенных ранее. В частности, эти результаты показывают, что однородный электронный газ при плотностях, отвечающих реальным металлам, находится очень далеко от перехода в ферромагнитное состояние. Влияние спиновых флуктуаций на физические характеристики такого газа при $r_s \ll 80$ также пренебрежимо мало. Максимальные же значения r_s , встречающиеся в металлах, составляют соответственно 5,18 для Rb и 5,64 для Cs. Существуют, правда, некоторые указания³⁶ на то, что в Cs статическая ДП при малых импульсах q действительно является отри-

цательной. Однако если это и так, то никакого реального значения для высокотемпературной сверхпроводимости это обстоятельство иметь не может. Если возвратиться к критерию существования отрицательных значений статической ДП (16), то из него видно, что из-за уменьшения функции $\chi_0(\mathbf{q}, 0)$ с ростом импульса \mathbf{q} , соответствующее минимальное значение r_s , определенное нами как $r_s^{(1)}$, отвечает появлению отрицательных значений статической ДП при $\mathbf{q} \rightarrow 0$. С ростом импульса \mathbf{q} для существования отрицательных значений величины $\epsilon(\mathbf{q}, 0)$ требуются все большие и большие значения r_s . Таким образом, даже в Cs с $r_s = 5,64$, статическая ДП если и является отрицательной, то лишь в очень малой области импульсного пространства. По этой причине соответствующая константа взаимодействия является в целом положительный (т. е. $\mu \geq \lambda$), поскольку она определяется интегралом по всему импульльному пространству. Эффективная сверхпроводимость с нефононным механизмом могла бы существовать в однородном электронном газе только при довольно больших значениях $80 \gg r_s \gg 6$. К сожалению, о существовании в природе таких объектов нам неизвестно. Можно поставить вопрос и более резко — возможно ли вообще существование таких систем?

До сих пор все наше рассмотрение было основано на модели однородного взаимодействующего газа на жесткой несжимаемой подложке. В этой модели существование отрицательных значений статической ДП, как это уже неоднократно подчеркивалось, вполне допустимо и не противоречит никаким общим условиям причинности и устойчивости систем. Что произойдет, если мы слегка изменим модель и будем учитывать возможность сжатия подложки? Наиболее просто этот вопрос рассмотреть в довольно популярной в теории металлов модели «желе», в которой ионы рассматриваются как однородная непрерывная заряженная среда. Фононные колебания этой системы следующим образом выражаются через ДП электронов $\epsilon_{el}(\mathbf{q}, 0)$:

$$\omega^2(\mathbf{q}) = \frac{\Omega_{pl}^2}{\epsilon_{el}(\mathbf{q}, 0)}, \quad (25)$$

где $\Omega_{pl} = \sqrt{4\pi N z^2 e^2 / M}$ — плазменная частота ионов. Мы также ввели у ДП индекс «el», чтобы подчеркнуть, что это ДП именно электронного газа, а не всей системы электронный газ плюс однородная ионная жидкость. Как видно из формулы (25), в такой системе в принципе невозможно существование отрицательных значений статической ДП электронного газа, а следовательно, и каких-либо эффективных нефононных механизмов сверхпроводимости. В самом деле, появление отрицательных значений $\epsilon_{el}(\mathbf{q}, 0)$ в такой системе немедленно приведет к неустойчивости фононного спектра ($\omega^2(\mathbf{q}) < 0$). Только к этой модели и относится доказательство невозможности существования отрицательных значений статической ДП, имеющееся в книге Пайнса и Нозьера¹¹. Отметим, что в этой модели за счет колебаний ионов осуществляется полная экранировка: $\epsilon_{tot}^{-1}(\mathbf{q}, 0) = 0$ (т. е. $\lambda = \mu$).

в) Диэлектрическая проницаемость кристалла

В однородных и изотропных моделях, которые мы до сих пор рассматривали, ДП является функцией лишь одного импульса (отвлекаясь от ее частотной зависимости). В кристаллах все функции диэлектрического отклика становятся матрицами в пространстве векторов обратной решетки. Условие устойчивости системы в этом случае необходимо формулировать уже на языке знакопостоянства соответствующих квадратичных форм от этих функций. В частности, условием устойчивости системы относительно

зарядовых возмущений является отрицательная определенность матрицы восприимчивости^{5,37} $\chi(\mathbf{q} + \mathbf{K}, \mathbf{q} + \mathbf{K}', 0)$, где \mathbf{K} и \mathbf{K}' — векторы обратной решетки. Эта величина связана с матрицей ДП:

$$\chi(\mathbf{q} + \mathbf{K}, \mathbf{q} + \mathbf{K}', \omega) = \frac{|\mathbf{q} + \mathbf{K}|^2}{4\pi e^2} [\epsilon^{-1}(\mathbf{q} + \mathbf{K}, \mathbf{q} + \mathbf{K}', \omega) - \delta_{\mathbf{KK}'}]. \quad (26)$$

В свою очередь критерием эффективности механизмов сверхпроводимости является отрицательная определенность матрицы $\epsilon^{-1}(\mathbf{q} + \mathbf{K}, \mathbf{q} + \mathbf{K}', 0)$, что соответствует межэлектронному притяжению.

Можно показать³⁷, что необходимым условием выполнения этого критерия является отрицательность статической макроскопической ДП $\epsilon_m(\mathbf{q}, 0)$, определяемой следующим образом:

$$\epsilon_m(\mathbf{q}, 0) = \frac{1}{\epsilon^{-1}(\mathbf{q} + 0, \mathbf{q} + 0, 0)}. \quad (27)$$

Чтобы в дальнейшем не осложнять обсуждения не очень существенными для дела деталями, мы будем рассматривать в этом разделе возможность существования в кристаллах отрицательных значений именно макроскопической ДП.

В простых металлах, где недиагональные матричные элементы матрицы ДП $\epsilon(\mathbf{q} + \mathbf{K}, \mathbf{q} + \mathbf{K}', 0)$ с $\mathbf{K} \neq \mathbf{K}'$ малы в меру малости электро-ионного псевдопотенциала $V_{ie}(\mathbf{K} - \mathbf{K}')$, макроскопическую ДП можно представить в следующем виде:

$$\epsilon_m(\mathbf{q}, 0) = \epsilon(\mathbf{q} + 0, \mathbf{q} + 0, 0) - \sum_{\mathbf{K} \neq 0} \frac{\epsilon(\mathbf{q} + 0, \mathbf{q} + \mathbf{K}, 0) \epsilon(\mathbf{q} + \mathbf{K}, \mathbf{q} + 0, 0)}{\epsilon(\mathbf{q} + \mathbf{K}, \mathbf{q} + \mathbf{K})}. \quad (28)$$

Формула (28) показывает, что макроскопическая ДП всегда меньше, чем диагональный элемент матрицы ДП $\epsilon(\mathbf{q} + 0, \mathbf{q} + 0, 0)$. Из этого еще не следует, что $\epsilon_m(\mathbf{q}, 0)$ меньше, чем ДП однородного электронного газа такой же плотности, поскольку диагональный матричный элемент $\epsilon(\mathbf{q} + 0, \mathbf{q} + 0, 0)$ также изменяется под действием электрон-ионного псевдопотенциала. Тем не менее можно строго доказать, что в рамках теории возмущений по псевдопотенциальному макроскопическая ДП электронного газа в простых металлах в действительности всегда меньше, чем $\epsilon(\mathbf{q}, 0)$ для однородного электронного газа той же плотности. Это означает, что в простых металлах условие для существования нефононных механизмов сверхпроводимости ухудшаются по сравнению со случаем однородного электронного газа.

Этот вывод отнюдь не является общим для всех металлов. Дело в том, что даже при наличии слабого псевдопотенциала мы не можем пользоваться теорией возмущений для вычисления $\epsilon_m(\mathbf{q}, 0)$, если в металле существуют векторы обратной решетки $\mathbf{K} \approx 2k_F$. Еще более сложной является ситуация в переходных металлах и полуметаллах, где с самого начала теория возмущений по кристаллическому потенциальному неприменима. Но именно в таких системах может осуществляться более благоприятная ситуация с точки зрения существования отрицательных значений статической ДП, чем в однородном электронном газе или в простых металлах: способствует этому наличие в зонном спектре электронов конгруэнтных участков поверхности Ферми. Как известно из теории экситонных диэлектриков³⁸, диагональный матричный элемент восприимчивости зонных электронов

$$\chi_0(\mathbf{q} + 0, \mathbf{q} + 0, 0) = -\frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \frac{n_{\mathbf{k}} - n_{\mathbf{k}} + \mathbf{q}}{E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}} + \mathbf{q}} \quad (29)$$

в этом случае расходится при импульсе \mathbf{q}_c , связывающем конгруэнтные участки поверхности Ферми. Для макроскопической ДП $\epsilon_m(\mathbf{q}, 0)$ для

импульсов \mathbf{q} вблизи вектора \mathbf{q}_c можно написать⁵ выражение, сходное с формулой (28):

$$\varepsilon_m(\mathbf{q}, 0) = 1 + \frac{(4\pi e^2/q^2) \chi_0(\mathbf{q} + 0, \mathbf{q} + 0, 0)}{1 - (4\pi e^2/q^2) G(\mathbf{q}, 0) \chi_0(\mathbf{q} + 0, \mathbf{q} + 0, 0)} - \sum_{\mathbf{K}} \frac{\Delta\varepsilon(\mathbf{q} + 0, \mathbf{q} + \mathbf{K}, 0) \Delta\varepsilon(\mathbf{q} + \mathbf{K}, \mathbf{q} + 0, 0)}{\varepsilon(\mathbf{q} + \mathbf{K}, \mathbf{q} + \mathbf{K}, 0)}. \quad (30)$$

В этой формуле, в отличие от (28), суммирование ведется по всем векторам \mathbf{K} , в том числе и $\mathbf{K} = 0$. Через $\Delta\varepsilon(\mathbf{q} + 0, \mathbf{q} + \mathbf{K}, 0)$ обозначена та часть матрицы ДП, которая не имеет особенностей при $\mathbf{q} = \mathbf{q}_c$. К сожалению, конкретные расчеты функции поправок на локальное поле $G(\mathbf{q}, 0)$ для блоховских электронов крайне трудны и фактически не проводились. При рассмотрении систем с конгруэнтными участками поверхности Ферми³⁸ обычно величина $(4\pi e^2/q^2) G(\mathbf{q}, 0)$ полагается равной некоторой константе g^2 . Учитывая, что $\chi_0(\mathbf{q} + 0, \mathbf{q} + 0, 0) > 0$, из формулы (30) следует, что электронная макроскопическая ДП таких становится отрицательной при выполнении условия

$$\frac{4\pi e^2}{q^2} G(\mathbf{q}, 0) \geq \frac{1}{\chi_0(\mathbf{q} + 0, \mathbf{q} + 0, 0)}. \quad (31)$$

Сравним это условие с критерием (16) для существования отрицательных значений $\varepsilon(\mathbf{q}, 0)$ в однородном электронном газе. Формально они имеют один и тот же вид, но фактически имеется очень большое различие, связанное со свойствами функции $\chi_0(\mathbf{q} + 0, \mathbf{q} + 0, 0)$. Так, в однородном электронном газе $\chi_0(\mathbf{q}, 0)$ остается конечной при любых импульсах \mathbf{q} ; поэтому критерий (16) может быть выполнен только при достаточно больших значениях константы обменно-корреляционного взаимодействия. В случае же систем с конгруэнтными участками поверхности Ферми из-за расходности функции $\chi_0(\mathbf{q} + 0, \mathbf{q} + 0, 0)$ критерий (31) может быть выполнен при любых, в том числе и при сколь угодно малых, константах обменно-корреляционного взаимодействия.

В этом месте необходимо, однако, привести следующие разъяснения. Как мы уже видели, в случае однородного электронного газа при сильном обменно-корреляционном взаимодействии в системе существуют возможности не только для появления отрицательных значений статической ДП, но и фазового перехода в состояние с ВСП или ВЗП. Для однородного электронного газа мы смогли показать, что неустойчивости, связанные с ВСП и ВЗП, осуществляются при больших константах взаимодействия, чем появление $\varepsilon(\mathbf{q}, 0) < 0$. Соответствующий анализ ситуации для систем с конгруэнтными участками поверхности Ферми, однако, отсутствует. Но вызывает сомнения, что неустойчивость, связанная с ВСП, так же как и в случае однородного электронного газа, вообще говоря, осуществляется при других константах взаимодействия, чем условие (31). Извлекаются эти константы большими или меньшими тех, что отвечают условию (31) — этот вопрос пока точного ответа не имеет. Что касается неустойчивостей, связанных с появлением электронных ВЗП, то они в кристалле вообще не могут осуществляться. Дело в том, что уже при гораздо меньших константах обменно-корреляционного взаимодействия в этом случае будут происходить структурные переходы в кристалле, обусловленные влиянием электронов. Простейший случай такой неустойчивости мы уже обсуждали на примере модели «желе». Таким образом, ясно, что проблема нефононных механизмов сверхпроводимости находится лишь в самом начале своего реального изучения. Для ее решения необходимо, в первую очередь, развитие методов точного микроскопического расчета сильновзаимодействующих неоднородных электронных систем.

Гораздо более определенной является ситуация со знаком полной диэлектрической проницаемости системы и вкладом в нее электрон-фононного взаимодействия. Определяющим при этом является роль эффектов локального поля в ионной подсистеме металла. Вообще говоря, эффекты локального поля наиболее велики в системе локализованных точечных зарядов^{4,5}. В некотором смысле, сама локализация зарядов обусловлена именно эффектами локального поля. В металлах, по крайней мере в простых, ионная подсистема может рассматриваться с хорошей степенью точности как система точечных зарядов. К счастью, система локализованных зарядов, колеблющихся с малой амплитудой вблизи положения равновесия, может быть рассмотрена точно с полным учетом обменно-корреляционного взаимодействия. Для простоты мы поясним ситуацию на примере вигнеровского кристалла классических точечных зарядов, в котором, конечно же, отсутствует обменное взаимодействие между зарядами, а корреляционные эффекты могут быть учтены точно. ДП такого кристалла имеет вид⁵

$$\varepsilon_m^{-1}(q, \omega) = 1 + \frac{\Omega_{pl}^2}{q^2} \sum_{\lambda} \frac{(qe_{q\lambda})^2}{\omega^2 - \omega_{\lambda}^2(q)}, \quad (32)$$

где $\Omega_{pl}^2 = 4\pi Z^2 e^2 N/M$ — квадрат плазменной частоты зарядов, $\omega_{\lambda}(q)$ и $e_{q\lambda}$ — частота колебаний кристалла и вектор поляризации этих колебаний соответственно. Как уже отмечалось, в модели «желе», не учитывающей локализацию ионов, а следовательно, и эффекты корреляции между ионами, существует лишь одно коллективное колебание, а именно, продольные плазменные колебания с частотой

$$\omega = \Omega_{pl}. \quad (33)$$

Неоднородность системы или, что то же самое, эффекты локального поля в системе точечных зарядов приводят к расщеплению этого возбуждения на три моды колебаний: продольную $\omega_{||}(q)$ и две поперечные $\omega_{\perp}(q)$. При этом для частот этих колебаний существует строгое правило сумм³⁹

$$\sum_{\lambda} \omega_{\lambda}^2(q) = \Omega_{pl}^2. \quad (34)$$

Из формул (32) и (34) легко убедиться, что этот факт, а, именно, расщепление единого в модели «желе» коллективного колебания на три моды, приводит к отрицательности статической диэлектрической проницаемости вигнеровского кристалла при любых векторах q . В частности, для векторов q в направлении высокой симметрии имеем

$$\varepsilon(q, 0) = 1 - \frac{\Omega_{pl}^2}{\omega_{\perp}^2(q)} < 0. \quad (35)$$

Подробный анализ полной диэлектрической проницаемости для простых металлов был проведен в работе авторов¹⁴ с учетом как ионной, так и электронной подсистем. Было показано, что вклад в $\varepsilon_{tot}(q, 0)$, обусловленный электрон-фононным взаимодействием, может приводить к отрицательным значениям этой величины. Физическая природа этого явления совершенно та же, что и в случае вигнеровского кристалла, а именно: эффекты локального поля в ионной подсистеме и расщепление плазменных колебаний ионов на продольные и поперечные фононы. Связь между константой электрон-фононного взаимодействия λ и кулоновской константой μ может быть представлена в виде

$$\lambda \approx \mu \left\langle \frac{\Omega_{pl}^2}{e_{el}(q, 0) \omega_{||}^2(q)} \right\rangle \left\langle \frac{V_{ie}^2(q)}{V_c^2(q)} \right\rangle; \quad (36)$$

здесь $V_{ie}(\mathbf{q})$ — псевдоопотенциал электрон-ионного взаимодействия, а

$$V_c(\mathbf{q}) = \frac{4\pi Ze^2}{q^2} \quad (37)$$

— кулоновский ионный потенциал. В простых металлах можно написать правила сумм для фононных частот, сходные с выражением (34), и убедиться, что существует неравенство

$$\omega_{||}^2(\mathbf{q}) < \frac{\Omega_{pl}}{\varepsilon_{el}(\mathbf{q}, 0)}. \quad (38)$$

Именно это неравенство и позволяет в металлах существовать константе электрон-фононной связи λ , превышающей кулоновскую константу μ . Второй сомножитель $\langle V_{ie}^2(\mathbf{q})/V_c^2(\mathbf{q}) \rangle$ обычно меньше единицы, и окончательное соотношение между константами λ и μ определяется взаимным влиянием обеих величин, т. е.

$$\left\langle \frac{\Omega_{pl}^2}{\varepsilon_{el}(\mathbf{q}, 0) \omega_{||}^2(\mathbf{q})} \right\rangle, \quad \left\langle \frac{V_{ie}^2(\mathbf{q})}{V_c^2(\mathbf{q})} \right\rangle.$$

В частности, для щелочных металлов оказывается, что $\lambda \leq \mu$. В поливалентных же простых металлах λ оказывается уже большим, чем μ (например, в Al и Pb).

Сходное с (36) выражение для связи между λ и μ было получено также в уже упоминавшейся работе Коэна и Андерсона⁶. Однако интерпретация полученных результатов в этой работе была заведомо неверной. Так, в работе⁶ считалось, что статическая ДП вообще не может быть отрицательной величиной ($\varepsilon(\mathbf{q}, 0) > 1$). Существование же формулы типа (35) рассматривалось как проявление процессов переброса в электрон-фононном взаимодействии. Фактически же, как мы убедились, формула (36) и возникающее благодаря ей неравенство (8)

$$\lambda > \mu,$$

обусловлены именно отрицательностью полной ДП системы. Вообще говоря, формула (36) записана без учета процессов переброса. Учет этих процессов, однако, не добавит ничего нового в сам факт наличия или отсутствия неравенства $\lambda > \mu$. При этом необходимо лишь заменить продольную частоту фононов $\omega_{||}^2(\mathbf{q})$ на среднюю фононную частоту $\langle \omega^2(\mathbf{q}) \rangle$. В простейшем случае эта замена выглядит следующим образом:

$$\frac{1}{\omega_{||}^2(\mathbf{q})} \rightarrow \frac{1}{3} \left(\frac{1}{\omega_{||}^2(\mathbf{q})} + \frac{2}{\omega_{\perp}^2(\mathbf{q})} \right). \quad (39)$$

В заключение этого раздела мы кратко обсудим смысл неравенства (38), которое можно в некотором смысле рассматривать как критерий существования обычного фононного механизма сверхпроводимости. Если представить частоту продольных фононов при малых \mathbf{q} как

$$\omega_{||}(\mathbf{q}) = cq, \quad (40)$$

где c — скорость продольного звука, то неравенство (38) можно переписать в виде

$$c < c_{jk}; \quad (41)$$

здесь c_{jk} — скорость продольного звука в модели «желе»

$$c_{jk}^2 = \frac{1}{3} \frac{m}{M} v_F^2, \quad (42)$$

где v_F — фермиевская скорость электронов. Следует указать, что критерий сверхпроводимости, фактически совпадающий с неравенством (41),

был получен в 1964 году Куликом⁴⁰. При выводе этого критерия в работе⁴⁰ использовалась методика описания электрон-фононных систем, развитая в работах Силина с соавторами^{41,42} и Канторовича⁴³ и основанная на выделении макроскопического электрического поля во взаимодействии ионов и электронов. По самой своей сути этот подход справедлив лишь при описании явлений, характеризуемых малыми импульсами, в то время как для сверхпроводимости важны именно большие передаваемые импульсы. Ограниченностъ этого критерия ясно видна и из приведенного здесь вывода. Любопытно, однако, что, в соответствии с работой⁴⁰, критерий (41) довольно неплохо разделяет металлы на сверхпроводящие и несверхпроводящие.

4. УРАВНЕНИЯ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ ДЛЯ СИСТЕМ С СИЛЬНОЙ СВЯЗЬЮ

а) Общий анализ эффектов сильной связи

Как было показано в предыдущей главе, необходимым условием существования эффективного механизма высокотемпературной сверхпроводимости является отрицательность статической ДП ($\epsilon(\mathbf{q}, 0) < 0$) в случае изotronных систем или отрицательная определенность матрицы статической ДП для кристаллов. В большинстве теоретических работ по проблеме высокотемпературной сверхпроводимости это обстоятельство, однако, не учитывалось в должной мере, поскольку конкретные расчеты проводились обычно в приближении хаотических фаз (ПХФ). В изотропной однокомпонентной плазме положительность статической ДП в ПХФ непосредственно видна из формул (12) и (15) этого обзора. В более общем случае многозонного металла или полупроводника также можно строго доказать^{4,5}, что матрица статической ДП является положительно определенной в ПХФ. Ясно, что многочисленные (см., например,⁴⁴⁻⁴⁶, а также более подробный обзор в книге³) поиски эффективных нефононных механизмов высокотемпературной сверхпроводимости в многозонных металлах и полупроводниках в рамках ПХФ были необоснованными, именно по указанной причине.

Как уже было показано в предыдущем разделе, существование отрицательных значений статической ДП возможно лишь за счет эффектов локального поля, т. е. в системах с сильным взаимодействием или с аномально большой поляризуемостью. На диаграммном языке отрицательный знак ДП может возникать лишь благодаря учету так называемых вершинных функций при расчете полной поляризуемости системы:

$$\Pi(\mathbf{q}, 0) =$$

$$= -2i \int d\mathbf{p} d\omega G(\mathbf{p}, \omega) G(\mathbf{p} - \mathbf{q}, -\omega) \Gamma(\mathbf{p}, \omega; \mathbf{p} - \mathbf{q}, -\omega; \mathbf{q}, 0), \quad (43)$$

где $\Gamma(\mathbf{p}, \omega; \mathbf{p} - \mathbf{q}, -\omega; \mathbf{q}, 0)$ — вершинная функция. К сожалению, написать какое-нибудь замкнутое уравнение для вершинной функции в общем виде невозможно. Совокупность диаграмм низшего порядка по эффективному взаимодействию $V_{\text{eff}}(\mathbf{q}, \omega) = 4\pi e^2/q^2 \epsilon(\mathbf{q}, \omega)$ изображена на рис. 1. Здесь волнистой линии отвечает величина $V_{\text{eff}}(\mathbf{q}, \omega)$. Необходимость учета вершинных функций при расчете поляризуемости системы для получения отрицательных значений величины $\epsilon(\mathbf{q}, 0)$ приводит к необходимости учета этих функций и при расчете эффективного межэлектронного взаимодействия. Простейшие диаграммы для эффективного меж-

электронного взаимодействия изображены на рис. 2. В работах^{6,7} при вычислении формулы (2) для T_c и получения критерия (8) ($\lambda > \mu$) для

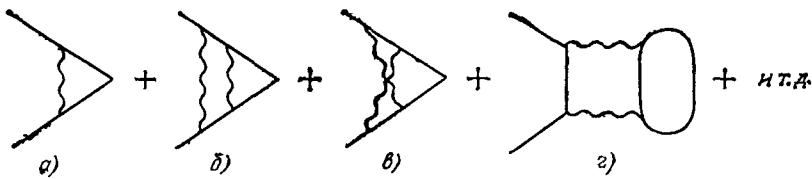


Рис. 1.

эффективности механизма сверхпроводимости использовалось приближение для межэлектронного взаимодействия, отвечающее фактически учету лишь диаграммы рис. 2, а. Ясно, что в случае систем с сильной связью

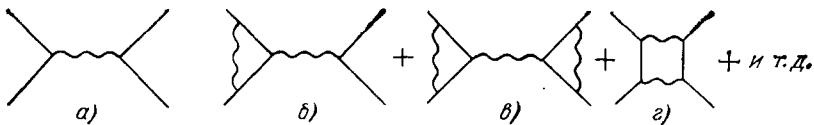


Рис. 2.

такой подход является неадекватным, и необходим более корректный учет вершинных функций. Достаточно просто учесть поправки к затрачивенному взаимодействию $V_{\text{eff}}(\mathbf{q}, \omega)$ типа изображенных на рис. 2, б и в. При этом межэлектронное взаимодействие можно написать в виде скелетной диаграммы рис. 3, где темный треугольник означает полную вершинную функцию Γ . Диаграмма же типа рис. 2, г не сводится к такой форме. Однако ее учет тоже может оказаться существенным, особенно при корректном рассмотрении спиновой структуры межэлектронного взаимодействия и при вычислении аномальных функций Грина.

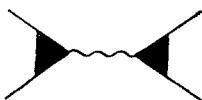


Рис. 3.

В рамках теории возмущений для систем со слабой связью подробный анализ поправок второго порядка по $V_{\text{eff}}(\mathbf{q}, \omega)$ и их влияния на критиче-

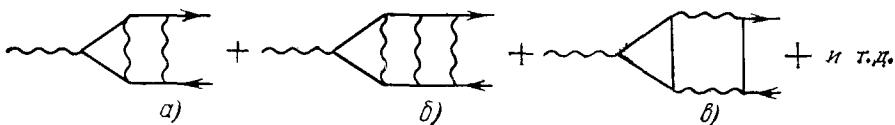


Рис. 4.

скую температуру сверхпроводящего перехода был проведен Киржничем⁸. Для систем с сильной связью, например, для однокомпонентной плазмы с $r_s \gg 1$, необходим учет всех диаграмм теории возмущений. Это делает задачу практически нерешаемой в рамках теории возмущений, и необходим иной подход к проблеме, основанный, например, на каких-нибудь вариационных принципах. В случае систем с конгруэнтными участками поверхности Ферми возможно выделение совокупности наиболее существенных диаграмм. Для вершинной функции Γ в квазизотропном приближении такие диаграммы изображены на рис. 4. Следует, однако, отметить, что последовательный анализ этой проблемы до сегодняшнего времени отсутствует.

б) Вывод уравнений сверхпроводимости для систем с сильным взаимодействием

В работе⁴⁷ было получено точное уравнение для одночастичной функции Грина электронов для нормального металла. Результаты этой работы можно легко обобщить и на случай сверхпроводящего металла, введя обычным образом представление Намбу для электронных операторов ($x = (\mathbf{r}, t)$)

$$\Psi(x) = \begin{vmatrix} \varphi_{\uparrow}(x) \\ \varphi_{\downarrow}^*(x) \end{vmatrix}, \quad \Psi^+(x) = |\varphi_{\uparrow}^*(x), \varphi_{\downarrow}(x)| \quad (44)$$

и рассматривая матричную функцию Грина

$$G(x, x') = -i \langle T_t \Psi(x) \Psi^+(x') \rangle. \quad (45)$$

При этом для функции $G(x, x')$ получится следующее выражение:

$$G^{-1}(x, x') = i \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{1} + \left(\frac{\nabla^2}{2m} + \mu \right) \tau_3 - U_{\text{eff}}(x) \tau_3 - \Sigma(x, x'), \quad (46)$$

где $\mathbf{1}$ и τ_i — обычные матрицы Паули,

$$\mathbf{1} = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}, \quad \tau_1 = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}, \quad \tau_2 = \begin{vmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{vmatrix}, \quad \tau_3 = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix},$$

здесь $U_{\text{eff}}(x)$ — эффективный хартриевский потенциал, действующий на электроны:

$$U_{\text{eff}}(x) = e^2 \int d\mathbf{r}' \frac{\langle \rho_e(\mathbf{r}', t) \rangle}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|} + \sum_n V_{1e}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n^0), \quad (47)$$

где $\langle \rho_e(\mathbf{r}, t) \rangle$ — средняя плотность электронов,

$$\langle \rho_e(\mathbf{r}, t) \rangle = -i \text{Sp}(\tau_3 G(x, x)),$$

и $V_{1e}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n^0)$ — неэкранированный электрон-ионный потенциал. $\Sigma(x, x')$ — собственно энергетическая часть, являющаяся матрицей в пространстве матриц Паули — выражается следующим образом:

$$\Sigma(x, x') = -i \int dx_1 dx_2 \int d\mathbf{r}'' \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}''|} \times \epsilon_{\text{tot}}^{-1}(x_1; \mathbf{r}'', t) \tau_3 G(x, x_2) \tau_3 \Gamma(x_2, x', x_1), \quad (48)$$

где $\Gamma(x_2, x', x_1)$ — матричная вершинная функция, определяемая как

$$\Gamma(x_2, x', x_1) = \tau_3 \frac{\delta G^{-1}(x_2, x')}{\delta U_{\text{eff}}(x_1)}. \quad (49)$$

Функция $\epsilon_{\text{tot}}^{-1}(x, x')$ — обратная ДП системы может быть записана в виде

$$\epsilon_{\text{tot}}^{-1}(x, x') = \epsilon_{\text{el}}^{-1}(x, x') + \sum_{n, n'} \int dx_1 dx_2 \epsilon_{\text{el}}^{-1}(x, x_1) \times \nabla_{\alpha} V_{1e}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_n^0) D_{nn'}^{\alpha\beta}(t_1 - t_2) \nabla_{\beta} V_{1e}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_{n'}^0) \frac{\nabla_{\mathbf{r}_2}^2}{4\pi} \epsilon_{\text{el}}^{-1}(x_2, x'); \quad (50)$$

здесь $D_{nn'}^{\alpha\beta}(t)$ — фоновая функция Грина, а $\epsilon_{\text{el}}^{-1}(x, x')$ — обратная матрица ДП электронов кристалла. Функция $\epsilon_{\text{el}}^{-1}(x, x')$ определяется уравнением

$$\epsilon_{\text{el}}^{-1}(x, x') = \delta(x - x') + \int dx_1 dr'' \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}''|} \Pi(\mathbf{r}'', t; x_1) \epsilon_{\text{el}}^{-1}(x_1, x'), \quad (51)$$

где $\Pi(x, x')$ — полный поляризационный оператор электронов, дающийся равенством

$$\Pi(x, x') = \frac{\delta \langle \rho_e(x) \rangle}{\delta U_{\text{eff}}(x')} . \quad (52)$$

Матрицу $\Sigma(x, x')$ можно разложить по матрицам Паули и представить в виде

$$\Sigma(x, x') = i [\delta(x - x') - Z(x, x')] \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{1} + \xi(x, x') \tau_3 + \varphi(x, x') \tau_1 . \quad (53)$$

При этом функции $Z(x, x')$ и $\xi(x, x')$ определяют зонную структуру и перенормировку спектра возбуждений металла и отличны от нуля и в случае нормального металла. Функция же $\varphi(x, x')$ — аномальная собствено-энергетическая часть, которая и определяет сверхпроводящий параметр порядка. Уравнения, фактически совпадающие с (46) и (48), были получены также в работе Гарланда⁴⁸.

Для квазизотропных систем со слабой связью, где применимо ПХФ, можно пренебречь функцией $\xi(x, x')$ и считать $Z(x, x') = \delta(x - x')$, оставляя таким образом в уравнении (48) только аномальную собствено-энергетическую часть $\varphi(x, x')$. Вершинную функцию $\Gamma(x_2, x', x_1)$ в этом приближении можно заменить на следующее простое выражение:

$$\Gamma(x_2, x', x_1) = 18(x_1 - x') \delta(x_2 - x_1).$$

В этом случае задача существенно упрощается, и можно легко вычислить, например, значение критической температуры сверхпроводящего перехода T_c , и ответ будет даваться формулой (2).

Для систем же с сильной связью решение уравнений (48) представляет собой крайне сложную задачу. Прежде всего решение этих уравнений весьма трудно и для случая нормального металла. Существует лишь очень малое число попыток последовательного подхода к расчету одночастичных свойств нормальных металлов, основанных на решении уравнений (48). Обычные расчеты зонной структуры металлов с самого начала исходят из одночастичной схемы в рамках метода функционала плотности. Взаимосвязь этих двух подходов до сих пор остается почти неисследованной.

Можно было бы упростить расчеты сверхпроводящих характеристик металлов, если переписать уравнение для аномальной собственно энергетической части $\varphi(x, x')$ таким образом, чтобы в это уравнение входили точные функции Грина нормального металла. К сожалению, в общем виде это сделать невозможно. Однако можно написать соответствующее уравнение для определения T_c в случае, если $T_c < \varepsilon_F$. С этой целью запишем полную функцию Грина $G(x, x')$ в виде

$$G(x, x') = G_N(x, x') + \int dx_1 dx_2 G_N(x, x_1) \varphi(x_1, x_2) \tau_1 G_N(x_2, x'), \quad (54)$$

где $G_N(x, x')$ — матричная функция Грина для электронов нормального металла

$$G_N(x, x') = \begin{vmatrix} G_N(x, x') & 0 \\ 0 & G_N^+(x', x) \end{vmatrix}.$$

Подставляя (54) в выражение (48) для $\Sigma(x, x')$, будем иметь

$$\begin{aligned}\Sigma(x, x') = & -i \int dx_1 dx_2 \int d\mathbf{r}' \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}''|} \times \\ & \times \varepsilon_{\text{tot}}^{-1}(x_1, \mathbf{r}''t) \tau_3 G_N(x_1, x_2) \tau_3 \Gamma(x_2, x', x_1) - \\ & - i \int dx_1 dx_2 dx_3 dx_4 \int d\mathbf{r}'' \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}''|} \varepsilon_{\text{tot}}^{-1}(x_1, \mathbf{r}'', t) \times \\ & \times \tau_3 G_N(x, x_3) \varphi(x_3, x_4) \tau_4 G_N(x_4, x_2) \Gamma(x_2, x', x_1).\end{aligned}$$

Далее, запишем собственно-энергетическую часть $\Sigma(x, x')$ в виде, аналогичном (53):

$$\Sigma(x, x') = \Sigma_N(x, x') + \varphi(x, x') \tau_1,$$

где

$$\Sigma_N = \begin{vmatrix} \Sigma_N & 0 \\ 0 & \Sigma_N^+ \end{vmatrix}$$

— собственно-энергетическая часть функции Грина нормального металла, удовлетворяющая уравнению

$$\Sigma_N = -i \int dx_1 dx_2 \int d\mathbf{r}' \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}''|} \varepsilon_{\text{tot}}^{-1}(x, \mathbf{r}''t) G_N(x, x_2) \Gamma(x_2, x', x_1), \quad (55)$$

где $\Gamma_N(x_2, x', x_1)$ — вершинная часть, не содержащая аномальных функций Грина.

При выводе уравнения для $\varphi(x, x_1)$ уже нельзя пренебречь аномальными вершинами, однако при $T = T_c$ достаточно учитывать лишь такие аномальные вершины, в которых аномальная функция Грина входит лишь один раз. Ситуация с такими вершинами очень напоминает ситуацию с кулоновскими вершинами в электрон-фононной системе нормального металла. Как известно^{3,47}, в этом случае из-за необходимости учета фононных поправок в вершинной функции при слагаемом в Σ_N , обусловленном кулоновским взаимодействием, возникает несимметрия в числе кулоновских вершин в слагаемых, связанных с кулоновским и электрон-фононным взаимодействием. Во вкладе в собственно-энергетическую часть, обусловленную электрон-фононным взаимодействием, кулоновские вершины входят квадратичным образом. Аналогичным образом обстоит дело и в уравнении для аномальной собственно-энергетической части $\varphi(x, x')$. В это уравнение вершинные функции Грина нормального металла Γ_N также будут входить квадратичным образом в отличие от уравнения (55) для нормальной части Σ_N . Окончательно уравнение для функции $\varphi(x, x')$ можно записать в следующем символическом виде⁴:

$$\varphi = -i \int \Gamma_N V_c \varepsilon_{\text{tot}}^{-1} G_N G_N^+ \Gamma_N \varphi, \quad (56)$$

где мы для сокращения записи не выписывали всех индексов у функций, входящих в это уравнение.

Из сравнения уравнений (55) и (56) видно, что фактически процессом, приводящим к спариванию электронов и появлению параметра порядка, с одной стороны, и перенормировке свойств нормального металла, с другой стороны, отвечают совершенно разные взаимодействия. Спариванию отвечает взаимодействие

$$V_{\text{eff}}^p = \int \Gamma_N V_c \varepsilon_{\text{tot}}^{-1} \Gamma_N,$$

а перенормировке

$$V_{\text{eff}}^n = \int V_c \varepsilon_{\text{tot}}^{-1} \Gamma_N.$$

Существенно при этом, что взаимодействие V_{eff}^n даже при отрицательном знаке статической ДП является отталкивателем, в то время как знак спаривающего взаимодействия определяется знаком статической ДП. Сколь-нибудь подробный анализ полученных уравнений для систем с не-фононными механизмами сверхпроводимости, однако, отсутствует.

Гораздо определенное ситуация в системах с электрон-фононным механизмом сверхпроводимости. Подробный анализ уравнений (48) для этих металлов имеется в обзоре Скалапино⁴⁹ и в книгах^{3,8}, и мы не будем здесь на нем останавливаться. Отметим лишь, что для случая чистых металлов необходим учет анизотропии сверхпроводящего параметра порядка, который значительно усложняет расчеты⁵⁰. Фактически же эта анизотропия в большинстве металлов достаточно мала. К тому же в грязных металлах с примесями анизотропия исчезает при уже достаточно малом количестве примесей, так что можно ограничиться исследованием параметра порядка, усредненного по поверхности Ферми. Именно для этой величины и существуют хорошо известные уравнения сверхпроводимости, называемые обычно уравнениями Элиашбера, которые были получены им еще в 1960 году^{51,52}. Их исследованию и будет посвящен следующий раздел обзора.

5. ИССЛЕДОВАНИЕ КРИТИЧЕСКОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ СВЕРХПРОВОДНИКОВ С СИЛЬНЫМ ЭЛЕКТРОН-ФОНОННЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

а) ВЫЧИСЛЕНИЕ КРИТИЧЕСКОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ

Запишем уравнения Элиашбера для $T = T_c$ в следующем общепринятом виде^{3,8,49,50,52}:

$$Z(i\omega_n)\Delta(i\omega_n) = \pi T_c \sum_{\omega_m} \lambda(i\omega_m - i\omega_n) \frac{\Delta(i\omega_m)}{|\omega_m|} - \mu \sum_{\omega_m} \frac{\Delta(i\omega_m)}{|\omega_m|}, \quad (57)$$

$$1 - Z(i\omega_n)i\omega_n = -\pi T_c \sum_{\omega_m} \text{sign } \omega_m \lambda(i\omega_m - i\omega_n); \quad (58)$$

здесь $\Delta(i\omega_n)$ — сверхпроводящий параметр порядка, $Z(i\omega_n)$ — перенормировка функции Грина нормального металла, $\omega_n = (2n + 1)\pi T_c$, и величина $\lambda(i\omega_m - i\omega_n)$ определяется как

$$\lambda(i\omega_m - i\omega_n) = 2 \int_0^\infty d\omega \alpha^2(\omega) g(\omega) \frac{\omega}{\omega^2 + (\omega_m - \omega_n)^2}. \quad (59)$$

Функция $\alpha^2(\omega) g(\omega)$ — спектральная плотность электрон-фононного взаимодействия. При этом $g(\omega)$ — плотность состояний фононов и $\alpha(\omega)$ — константа взаимодействия электронов с фононами с данной энергией ω .

Отметим прежде всего, что вклад прямого кулоновского отталкивания (второе слагаемое в правой части уравнения (57)) записан в очень упрощенной модельной форме. Возможность использования такого простого выражения для этой величины обусловлена следующими причинами. Во-первых, как это было выяснено в предыдущих разделах этого обзора, в системах с сильным электрон-фононным взаимодействием эффекты локального поля в ионной подсистеме позволяют константе электрон-фононного взаимодействия λ значительно превышать константу кулоновского взаимодействия μ . Фактически во всех реальных сверхпроводящих металлах именно так и обстоит дело. Константа связи λ в сверхпроводниках меняется от

величины $\lambda = 0,4$ в Al до $\lambda = 2,6$ в сплавах PbBi. При этом величина μ во всех этих металлах не превосходит значения 0,2—0,3⁵³. Из-за большой разницы средних фононных частот и энергии Ферми происходит дальнейшее уменьшение вклада прямого кулоновского взаимодействия за счет перерассеяния электронов и перехода к кулоновскому псевдопотенциальному $\mu^* = \mu/[1 + \mu \ln(\epsilon_F/\omega)]$. Как было показано Батыевым⁵⁴, переход от μ к μ^* имеет место не только в рамках слабой связи, но и при более точном учете эффектов сильной связи. Таким образом, прямое кулоновское отталкивание в большинстве реальных сверхпроводников оказывает очень малое влияние на T_c , и при его описании вполне можно ограничиться простой моделью, использованной в уравнении (57).

Это, конечно, не означает, что вообще кулоновское взаимодействие между электронами несущественно в таких металлах. Роль кулоновского взаимодействия весьма важна в процессе формирования фононных частот металлов, в экранировании электрон-ионного взаимодействия и т. п. Спектральная плотность электрон-фононного взаимодействия $\alpha^2(\omega)g(\omega)$ должна, конечно, определяться с корректным учетом как электрон-ионного, так и кулоновского межэлектронного взаимодействий. На микроскопическом определении этой функции и на обсуждении способов ее расчета мы остановимся несколько позднее. В данный же момент мы хотим лишь указать, что существуют довольно хорошо разработанные методы получения функции $\alpha^2(\omega)g(\omega)$ из туннельных измерений в сверхпроводящих⁵⁵⁻⁵⁸ и даже нормальных металлах^{59,60}. Вид функции $\alpha^2(\omega)g(\omega)$ поэтому достаточно хорошо известен для очень большого числа металлов и сплавов.

Переходя к вычислению T_c , мы прежде всего перепишем уравнения (57—58) в виде одного линейного уравнения для функции $\Delta(i\omega_n)$. При этом критическая температура T_c будет определяться из нахождения собственных значений этого уравнения:

$$\sum_{n=0}^{n_{\max}} K(n, n', T_c) \Delta_{n'} = 0, \quad (60)$$

где

$$K(n, n', T_c) =$$

$$= \lambda(n - n') + \lambda(n + n' + 1) - \delta_{nn'} [2n + 1 + \lambda(0) + 2 \sum_{m=1}^n \lambda(m)]. \quad (61)$$

... записи этого уравнения мы ввели обозначения

$$\Delta_n = \frac{\Delta(i\omega_n)}{|\omega_n|},$$

а также пренебрегли в правой части уравнения (57) вкладом прямого кулоновского отталкивания. В окончательных ответах можно будет легко восстановить при необходимости вклад этого достаточно несущественного для наших целей слагаемого.

Довольно большие условия были затрачены на решение уравнения (60) и получение аналитической формулы для T_c ⁶¹⁻⁶³, начиная с работы Макмиллана⁶⁴. Стоит, пожалуй, отметить, что во всех указанных работах фактически решалось не уравнение (60), а уравнения (57—58), аналитически продолженные на непрерывные значения энергии ω . Прежде чем переходить к рассмотрению конкретных решений этих уравнений, нам хотелось бы ответить на вполне законный вопрос: А возможно ли в принципе получение аналитической формулы для T_c из уравнения (60)? В самом деле, как видно из формул (57—61), критическая температура является функционалом от функции $\alpha^2(\omega)g(\omega)$. Когда же мы говорим о получении

аналитической формулы для T_c , то и по самой сути этой задачи и по результатам, полученным в работах⁶¹⁻⁶⁴, мы подразумеваем, что можно выразить T_c через несколько моментов функции $\alpha^2(\omega) g(\omega)$. Ясно, что для произвольного вида функции $\alpha^2(\omega) g(\omega)$ эта задача невыполнима, и полученные формулы для T_c неизбежно будут приближенными.

В случае систем со слабой и промежуточной связью подробное исследование проблемы было дано в работе⁶³. С помощью итераций по параметру $\lambda/(1+\lambda)$ было получено следующее аналитическое выражение для T_c :

$$T_c = 1,14 \omega_{\log} e^{-K} \exp \left[-\frac{1+\lambda}{\lambda - \mu^* \{1 + [\lambda K / (1+\lambda)]\}} \right], \quad (62)$$

где λ — константа электрон-фононной связи, равная

$$\lambda = 2 \int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega} \alpha^2(\omega) g(\omega); \quad (63)$$

остальные величины, входящие в формулу (62), определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} \omega_{\log} &= \frac{2}{\lambda} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega} \ln \omega \alpha^2(\omega) g(\omega), \\ K &= \frac{4}{\lambda^2} \int_0^\infty d\omega_1 \alpha^2(\omega_1) g(\omega_1) \ln \frac{\omega_1}{\omega_{\log}} \int_0^\infty d\omega_2 \alpha^2(\omega_2) g(\omega_2) \left(\frac{1}{\omega_2 + \omega_1} - \frac{1}{\omega_2 - \omega_1} \right) \end{aligned} \quad (64)$$

и μ^* — кулоновский псевдопотенциал. В случае достаточно узкого пика в плотности состояний фононов или отсутствия сильно различающихся по частоте фононных мод величина K становится равной $1/2$. В этом случае формула (62) для T_c фактически совпадает с хорошо известной формулой Макмиллана с заменой лишь в ней дебаевской энергии фононов на величину ω_{\log} :

$$T_c = \frac{\omega_{\log}}{1,45} \exp \left[-\frac{1+\lambda}{\lambda - \mu^* \{1 + 0,5 [\lambda / (1+\lambda)]\}} \right]. \quad (66)$$

Если рассмотреть ситуацию, в которой функция $\alpha^2(\omega) g(\omega)$ может быть представлена в виде нескольких изолированных пиков:

$$\alpha^2(\omega) g(\omega) = \sum_i \frac{\lambda_i \omega_i}{2} \delta(\omega - \omega_i), \quad (67)$$

то среднелогарифмическая частота ω_{\log} приобретает вид

$$\omega_{\log} = \frac{\prod_i \omega_i \lambda_i}{\lambda}; \quad (68)$$

здесь λ — полная константа связи. Из формулы (68), в частности, следует, что при стремлении λ к нулю какой-нибудь из частот ω_i , критическая температура тоже должна стремиться к нулю. Однако этот ответ заведомо неверен, хотя бы по той простой причине, что сами формулы (62) и (66) получены в предположении, что все частоты ω_i удовлетворяют неравенству $\omega_i > T_c$.

При наличии в системе низкочастотных мод колебаний с $\omega_i \ll T_c$ необходим более корректный учет этих мод, нежели это было сделано при выводе формул (62) и (66). С этой целью мы запишем выражение для функ-

ции $\lambda (i\omega_n)$ в виде суммы двух слагаемых $\lambda_1 (i\omega_n)$ и $\lambda_2 (i\omega_n)$, где $\lambda_1 (i\omega_n)$ обусловлено именно вкладом низкочастотных мод. Для $\lambda_1 (i\omega_n)$ в случае, когда отвечающие ей частоты ω_1 удовлетворяют неравенству $\omega_1 \ll T_c$, можно написать следующее представление:

$$\lambda_1 (i\omega_n) = \begin{cases} \frac{M(1)}{(2\pi T_c n)^2}, & n \neq 0, \\ \lambda_1, & n = 0. \end{cases}$$

Здесь введены обозначения для константы связи электронов с низкочастотными модами λ_1 , определяемой в соответствии с (63) как

$$\lambda_1 = 2 \int_0^\infty \frac{d\omega_1}{\omega_1} \alpha^2 (\omega_1) g(\omega_1),$$

и $M(1)$ — первого момента функции $\alpha^2 (\omega_1) g(\omega_1)$:

$$M(1) = 2 \int_0^\infty d\omega_1 \omega_1 \alpha^2 (\omega_1) g(\omega_1). \quad (69)$$

Если подставить теперь выражения для $\lambda_1 (i\omega_n)$ в уравнения (60) и (61), определяющие T_c , то легко убедиться, что вклад от $\lambda_1 (i\omega_n)$ при $n = 0$ полностью сокращается. Влияние низкочастотных мод при этом входит лишь через величину $M(1)/(2\pi T_c n)^2$. Если использовать для $\alpha^2 (\omega_1) g(\omega_1)$ представление (67), то для $\lambda_1 (i\omega_n)$ при $n \neq 0$ получаем

$$\lambda_1 (i\omega_n) = \lambda_1 \frac{\omega_1^2}{(2\pi T_c n)^2}. \quad (70)$$

Из этого выражения видно, что если при стремлении ω_1 к нулю константа электрон-фононной связи λ_1 остается постоянной или уменьшается, то низкочастотные фононы не оказывают никакого непосредственного влияния на T_c . Если же при стремлении ω_1 к нулю константа электрон-фононной связи λ_1 возрастает как $\lambda \approx 1/\omega_1^2$, то величина $M(1)$ остается конечной, и низкочастотные фононы дают вклад в T_c даже при $\omega_1 = 0$. Такая возможность была указана в работе ⁶⁵. Однако поведению константы $\lambda \sim 1/\omega_1^2$ при малых ω_1 едва ли можно придать какой-либо физический смысл.

Более интересной является возможность существования у уравнений Элиашберга решений с T_c большими, чем характерные фононные частоты. Впервые на такую возможность было указано в работе Аллена и Дайнса ⁶⁶, и она связана с существованием при больших значениях λ конечного значения отношения $M(1)/(2\pi T_c)^2 \approx 1$. При этом T_c выражается следующим образом через $M(1)$:

$$T_c \approx \sqrt{\frac{M(1)}{(2\pi)^2}} = 0,159 \sqrt{M(1)}.$$

Более точный расчет дает

$$T_c = 0,1827 \sqrt{M(1)}. \quad (71)$$

Авторы работ ⁶⁶ предложили объединить формулы (66) и (71) в виде *)

$$T_c = \frac{\omega_{\text{log}}}{1,2} f_1 f_2 \exp \left[-\frac{1,04(1+\lambda)}{\lambda - \mu^*(1+0,62\lambda)} \right], \quad (72)$$

*) Отметим, что авторы работы ⁶⁶ использовали несколько иные численные коэффициенты, чем в формуле (66), полученной аналитически в работе ⁶³.

где f_1 и f_2 — эмпирически подобранные функции

$$f_1 = \left[1 + \left(\frac{\lambda}{2,46 + 9,35\mu^*} \right)^{3/2} \right]^{1/3},$$

$$f_2 = 1 + \frac{[(\omega(1)/\omega_{\log}) - 1] \lambda^2}{\lambda^2 + (1,82 + 11,5\mu^*)^2 (\omega(1)/\omega_{\log})^2}.$$

Здесь

$$\omega(1) = \frac{1}{\lambda} M(0), \quad (73)$$

где $M(0)$ — нулевой момент функции $\alpha^2(\omega) g(\omega)$.

Более последовательная попытка получения аналитической формулы для T_c при константах связи $\lambda \approx 1$ была предпринята в серии работ ⁶⁷⁻⁶⁹, где было предложено разложение T_c в ряд по степеням $1/\lambda$

$$T_c = A_0 \left(1 + \frac{A_1}{\lambda} + \frac{A_2}{\lambda^2} + \frac{A_3}{\lambda^3} + \dots \right) = \alpha_0 [M(1)]^{1/2} \left\{ 1 + \alpha_1 \left(\frac{\omega(4)}{\omega(2)} \right)^4 \frac{1}{\lambda} + \right. \\ \left. + \left[\alpha_{21} \left(\frac{\omega(6)}{\omega(2)} \right)^2 + \alpha_{22} \left(\frac{\omega(4)}{\omega(2)} \right)^8 \right] \frac{1}{\lambda^2} + \alpha_{31} \left(\frac{\omega(8)}{\omega(2)} \right)^8 + \alpha_{32} \frac{\omega^4(4) \omega^6(6)}{\omega^{10}(2)} + \right. \\ \left. + \alpha_{33} \left(\frac{\omega(4)}{\omega(2)} \right)^{12} \right] \frac{1}{\lambda^3} + \dots \right\}. \quad (74)$$

Это выражение несложно получить, подставляя в (61) разложение (59) по степеням $\omega^2/(2\pi T_c)^2$. В результате T_c зависит лишь от величин λ и средних фононных частот $\omega(n)$, определяемых через моменты функции $\alpha^2(\omega) g(\omega) M(n+1)$,

$$\omega(n) = \frac{1}{\lambda} [M(n+1)]^{1/(n+1)}. \quad (75)$$

Сами же моменты определяются по аналогии с (63) следующим образом:

$$M(n) = 2 \int_0^\infty d\omega \omega^n \alpha^2(\omega) g(\omega). \quad (76)$$

Коэффициенты α_{ij} одинаковы для всех сверхпроводников и приведены в табл. II.

Таблица II

Зависимость коэффициентов (74) от кулоновского взаимодействия ⁶⁷⁻⁶⁹

μ^*	α_0	α_1	α_{21}	α_{22}
$\mu^* = 0$	0,12273	-0,34336	0,2547	-0,2945
$\mu^* \neq 0$	$\frac{\alpha_0^0}{\sqrt{1+2,45\mu^*}}$	$\alpha_1^0 (1+2,797\mu^*)$	$\alpha_{21}^0 (1+2,8\mu^*)^2$	$\alpha_{22}^0 (1+2,7\mu^*)^2$
μ^*	α_{31}	α_{32}	α_{33}	
$\mu^* = 0$	-0,496	0,615	-0,420	
$\mu^* \neq 0$	$\alpha_{31}^0 (1+2,7\mu^*)^3$	$\alpha_{32}^0 (1+2,7\mu^*)^3$	$\alpha_{33}^0 (1+2,7\mu^*)^3$	

Расчеты T_c для реальных сверхпроводников, использующие функции $\alpha^2(\omega) g(\omega)$ из работ⁵⁵⁻⁵⁶, дают хорошее согласие с экспериментальными данными (см. ниже табл. III). Для металлов с большими λ , однако, радиус сходимости для данного ряда сильно зависит от формы спектра, например, для ртути ($\lambda = 1,62$) значение T_c , вычисленное по формуле (74), становится отрицательным. Для улучшения сходимости данного ряда можно использовать метод аппроксимант Паде. В результате получаем⁷⁰

$$T_c = A_0 \frac{1 + \frac{1}{\lambda} \left(A_1 + \frac{A_3 - A_1 A_2}{A_1^2 - A_2} \right)}{1 + \frac{1}{\lambda} \frac{A_3 - A_1 A_2}{A_1^2 - A_2} + \frac{1}{\lambda^2} \frac{A_2^2 - A_1 A_3}{A_1^2 - A_2}}, \quad (77)$$

где коэффициенты A_i даются выражением (74). Результаты расчета по формулам (74) и (77) с помощью функций $\alpha^2(\omega) g(\omega)$, восстановленных из туннельных характеристик^{55,56}, приведены в табл. III и показывают,

Таблица III

Вещество	$\lambda :$	$T_c^{(McM)}$	$T_c^{(62)}$	$T_c^{(72)}$	$T_c^{(74)}$	$T_c^{(77)}$	$T_s^{\text{эксп}}$
Hg	1,62	3,53	2,91	4,14	< 0	5,32	4,19
In	0,804	3,27	2,97	3,44	6,78	3,60	3,40
Pb	1,55	6,48	5,99	7,26	7,47	7,43	7,23
Sn	0,716	3,81	3,55	3,98	4,84	3,07	3,72
Ta	0,692	4,58	4,39	4,75	3,78	3,45	4,47
Tl	0,795	2,21	2,11	2,32	2,95	2,40	2,39
Tl _{0,9} Bi _{0,1}	0,78	2,16	1,99	2,26	2,99	2,29	2,30
Pb _{0,7} Bi _{0,3}	2,03	6,85	6,09	8,20	8,52	8,50	8,45
Pb _{0,65} Bi _{0,35}	2,13	6,80	5,97	8,28	8,72	8,69	8,95
Pb _{0,45} Bi _{0,55}	2,58	4,66	3,81	6,18	7,03	6,89	7,00

что выражение (77) дает хорошее согласие с экспериментом в широкой области значений λ ($\lambda > 0,7$). Для сравнения приведены также результаты, вычисленные по формулам (72), (62) и по формуле Макмиллана (McM).

Из приведенного выше анализа и численных расчетов видно, что аналитического выражения для T_c , справедливого во всем интервале значений λ и для любого вида функции $\alpha^2(\omega) g(\omega)$, получить не удается. В лучшем случае можно написать выражения типа (62), (74) или (77). Вообще говоря, если известен вид функции $\alpha^2(\omega) g(\omega)$, то нет особой необходимости в получении каких-либо аналитических формул для T_c . Современные вычислительные машины позволяют легко находить величину T_c непосредственно из уравнений (60), (61). Аналитические формулы делают, однако, более удобным анализ зависимости T_c от свойств нормального металла, особенно в том случае, если экспериментально известны какие-либо моменты функции $\alpha^2(\omega) g(\omega)$, но не сама эта функция.

Используя полученные выражения для T_c , можно попытаться ответить на следующие вопросы:

1) Существуют ли в рамках уравнений Элиашберга какие-нибудь внутренние ограничения на возможные значения T_c^{\max} ?

2) Какой вид функций $\alpha^2(\omega) g(\omega)$ является более предпочтительным с точки зрения существования высоких значений T_c ?

Более последовательно, однако, искать ответа на эти вопросы в рамках метода, разработанного Бергманом и Райннером⁷¹. В работе⁷¹ была вычислена функциональная производная $\delta T_c / \delta \alpha^2(\omega) g(\omega)$, которая показывает, какие частоты являются наиболее эффективными для повышения

T_c . Эта функция стремится к нулю при частотах $\omega \rightarrow 0$, указывая на неэффективность фононов с очень низкими энергиями. При больших частотах функция $\delta T_c/\delta\alpha^2(\omega)g(\omega)$ падает как $1/\omega$ и имеет максимум при $\omega \approx 2\pi T_c$. Отсюда, в частности, следует, что наиболее предпочтительным с точки зрения получения высоких значений T_c была бы функция $\alpha^2(\omega)g(\omega)$ следующего вида:

$$\alpha^2(\omega)g(\omega) = A\delta(\omega - \omega_0),$$

где $\omega_0 \approx 2\pi T_c$. Возможно ли в реальных металлах иметь функции $\alpha^2(\omega)g(\omega)$ такого или близкого типа — этот вопрос, конечно, может быть решен лишь при конкретном изучении свойств металла.

Метод работы ⁷¹ можно использовать и для исследования проблемы возможных ограничений на значение T_c , возникающих в уравнениях Элиашберга. В работе Ливенса ⁷² было показано, что для значений T_c , определяемых уравнениями (60) и (61), существует верхняя граница, такая что

$$T_c^{\max} < a(n)\omega(n), \quad (78)$$

где $a(n)$ — некоторые константы, а $\omega(n)$ определяются формулами (75), (76). Для вычисления констант $a(n)$ необходимо получить выражение для функциональных производных $\delta/T_c/\delta G(n, \omega)$, где $G(n, \omega) = \omega^n \alpha^2(\omega)g(\omega)$. Это легко сделать в рамках метода, предложенного в работе ⁷¹. Конкретный расчет, проведенный Ливенсом ⁷², показывает, что величина $a(n)$ является конечной лишь для нулевого и первого моментов. Для $n \geq 2$ $a(n) = \infty$, и, таким образом, формула (78) не приводит ни к каким ограничениям на T_c . Для первых же двух моментов возникают следующие неравенства:

$$\left. \begin{aligned} T_c^{\max} &\leq T_c^0 = 0,231 \int_0^\infty d\omega \alpha^2(\omega) g(\omega) \\ T_c^{\max} &\leq T_c^1 = 0,258 \sqrt{\int_0^\infty d\omega \omega \alpha^2(\omega) g(\omega)} \end{aligned} \right\}. \quad (79)$$

При этом, как показано Ливенсом, первое ограничение является более сильным для не слишком больших значений λ ,

$$\frac{T_c^0}{T_c^1} \leq 0,633\sqrt{\lambda}.$$

В табл. IV приведены экспериментальные значения T_c , а также величины T_c^0 и T_c^1 , вычисленные для ряда сверхпроводников. Как видно из этой таблицы, экспериментальные значения T_c у большинства реальных сверх-

Таблица IV

Вещество	λ	$T_c^{\text{эксп}}$	T_c^0	T_c^1
Hg	1,6	4,19	7,4	11,3
In	0,805	3,40	7,35	11,6
Pb	1,55	4,23	10,8	14,6
Sn	0,72	3,72	9,47	18,8
Ta	0,69	4,47	11,1	22,4
Tl	0,795	2,36	5,36	10,43
$Pb_{0,7}Bi_{0,3}$	2,01	8,45	12,0	14,5
$Pb_{0,65}Bi_{0,35}$	2,45	8,95	12,3	14,7
$Pb_{0,45}Bi_{0,65}$	2,59	7,0	11,4	13,8

проводников не так уж сильно отличаются от своих максимально возможных значений. Для того, чтобы понять, можно ли каким-либо образом достичнуть этих максимальных значений и можно ли вообще создать сверхпроводящие металлы, имеющие T_c , значительно превышающие 22,4 К (T_c^1 для T_a), необходимо микроскопическое исследование функции $\alpha^2(\omega) g(\omega)$ и ее связи со свойствами металла.

б) Спектральная плотность
электрон-фононного взаимодействия
и зависимость T_c от свойств
нормального металла

Для получения точного микроскопического выражения для функции $\alpha^2(\omega) g(\omega)$ необходимо последовательный анализ уравнений сверхпроводимости (46) и (48) с полным учетом кулоновского межэлектронного взаимодействия. К сожалению, до настоящего времени эта задача не решена не только для сверхпроводящих, но даже и для нормальных металлов. В работе Скалапино⁴⁹ в рамках теории возмущений до второго порядка по слабому электрон-ионному псевдопотенциалу было получено следующее микроскопическое выражение для функции $\alpha^2(\omega) g(\omega)$:

$$\alpha^2(\omega) g(\omega) = \left(\int \frac{d^2 p}{v_F} \right)^{-1} \int \frac{d^2 p}{v_F} \int \frac{d^2 p'}{v'_F} \sum_{\lambda} |g_{p, p', \lambda}|^2 \delta(\omega - \omega_{p-p', \lambda}). \quad (80)$$

Здесь интегрирование ведется по поверхности Ферми, v_F — скорость электрона на поверхности Ферми, $\omega_{p-p', \lambda}$ — частота фононов с импульсом $p - p'$ и $g_{p, p', \lambda}$ — матричный элемент электрон-фононного взаимодействия. Для простых металлов $g_{p, p', \lambda}$ представляется в виде

$$g_{p, p', \lambda} = i \sqrt{\frac{N}{2M\omega_{p-p', \lambda}}} e_{p-p', \lambda}(p - p') \tilde{V}_{ie}(p, p'). \quad (81)$$

В этой формуле $e_{p-p', \lambda}$ — вектор поляризации фононов, $\tilde{V}_{ie}(p, p')$ — экранированный электрон-ионный псевдопотенциал

$$\tilde{V}_{ie}(p, p') = \frac{\Gamma_{pF}(p - p') V_{ie}(p - p')}{Z_C \epsilon_{el}(p - p', 0)}, \quad (82)$$

где $\Gamma_{pF}(p - p')$ — вершинная функция кулоновского взаимодействия, Z_C — перенормировка функции Грина электронов за счет кулоновского взаимодействия, $\epsilon_{el}(p - p', 0)$ — диэлектрические проницаемость электронов и $V_{ie}(p - p')$ — затравочный электрон-ионный псевдопотенциал. Существенно, что при малых передаваемых импульсах имеет место равенство

$$\lim_{q \rightarrow 0} \frac{\Gamma_{pF}(q) V_{ie}(q)}{Z_C \epsilon_{el}(q, 0)} = \frac{V_{ie}(q)}{\epsilon_{el}(q, 0)} = -\frac{Z}{N(0)}, \quad (83)$$

где Z — валентность иона и $N(0)$ — плотность состояний электронов на поверхности Ферми. Равенство (83) показывает, что при малых передаваемых импульсах перенормировка экранированного псевдопотенциала за счет вершинной функции и величины Z_C полностью компенсируют друг друга. Это обстоятельство означает, что при вычислении функции $\alpha^2(\omega) g(\omega)$ необходимо последовательно учитывать обе эти функции, и $\Gamma_{pF}(q)$, и Z_C . Подобные расчеты, однако, крайне сложны, даже при учете того факта, что $\Gamma_{pF}(q)$, $\epsilon_{el}(q, 0)$ и Z_C определяются свойствами однородного электронного газа. Для переходных металлов для функции $\alpha^2(\omega) g(\omega)$

можно получить выражения формально очень сходные с даваемыми формулами (80) — (82). Однако в этом случае функции $\Gamma_{\text{рF}}(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$, $\epsilon_{\text{el}}(\mathbf{p}, \mathbf{p}', 0)$ и $Z_C(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ должны будут уже определяться не для однородного электронного газа, а для системы взаимодействующих блоховских электронов. В этом случае задача вычисления функции $\alpha^2(\omega) g(\omega)$ становится еще более сложной.

Все имеющиеся к настоящему времени расчеты функции $\alpha^2(\omega) g(\omega)$ в действительности исходят не из последовательного рассмотрения взаимодействующих электронов, а основаны на простом одночастичном подходе к системе блоховских электронов. Для определения зонной структуры электронов используется уравнение Шредингера с периодическим потенциалом $V(r)$. Матричный элемент электрон-фононного взаимодействия $g_{\mathbf{p}, \mathbf{p}', \lambda}$ при этом определяется через градиент этого кристаллического потенциала:

$$g_{\mathbf{p}, \mathbf{p}', \lambda} = -i \sqrt{\frac{N}{2M\omega_{\mathbf{p}-\mathbf{p}', \lambda}}} e_{\mathbf{p}-\mathbf{p}', \lambda} \langle \psi_{\mathbf{p}}^* | \nabla V(r) | \psi_{\mathbf{p}'} \rangle. \quad (84)$$

Для простых металлов параметры кристаллического потенциала, или, точнее, псевдопотенциала, обычно подбираются из условия совпадения экспериментальных данных и теоретических расчетов вида поверхности Ферми. В качестве волновых функций электронов, входящих в определении матричного элемента $g_{\mathbf{p}, \mathbf{p}', \lambda}$, используются либо одна плоская волна^{73,74}, либо сумма нескольких плоских волн^{75,76}. Фононные частоты вычисляются методом силовых постоянных. Рассчитанные таким образом функции $\alpha^2(\omega) g(\omega)$ обнаруживают довольно неплохое качественное согласие с экспериментальными данными. Количественное же совпадение расчетных и экспериментальных кривых $\alpha^2(\omega) g(\omega)$ оказывается не очень хорошим.

Для переходных металлов Гаспари и Джорффи⁷⁷ разработали методику расчета величины $M(1)$ — первого момента функции $\alpha^2(\omega) g(\omega)$, который обычно принято обозначать как $N(0) \langle I^2 \rangle / M$, где M — масса иона. Ими было показано, что эта величина может быть выражена через фазовые сдвиги рассеяния электрона на кристаллическом потенциале и плотность состояний электронов на поверхности Ферми $N(0)$. Для вычисления же фазовых сдвигов и $N(0)$ может быть использован любой стандартный метод расчета зонной структуры (см. подробнее книги^{3,8,32}). Позднее эта методика была обобщена и для расчета не только $M(1)$, но и самой функции $\alpha^2(\omega) g(\omega)$ ^{77–80}. Как и в случае простых металлов, рассчитанные функции $\alpha^2(\omega) g(\omega)$ обнаруживают разумное качественное согласие с экспериментальными данными, количественное же совпадение данных оставляет желать лучшего. Подробный анализ природы возникающих отличий рассчитанных и экспериментальных значений $\alpha^2(\omega) g(\omega)$ был проведен для простых металлов в работе⁷⁸ и для переходных в работе⁸⁰. Из результатов этих работ следует, что существующие к настоящему времени методы расчета функции $\alpha^2(\omega) g(\omega)$ не позволяют надеяться на вычисление сверхпроводящих свойств металлов с точностью большей, чем по порядку величины.

В рамках псевдопотенциального подхода к простым металлам основная причина неточности расчетов, по мнению авторов⁸⁰, заключается в определении псевдопотенциала $V_{\text{le}}(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$. Дело в том, что из зонных расчетов можно определить эту величину лишь при $\mathbf{p} = \mathbf{p}' = \mathbf{K}$, где \mathbf{K} — вектор обратной решетки. Для вычисления же $\alpha^2(\omega) g(\omega)$ необходимо знание функции $\tilde{V}_{\text{le}}(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ при любых разностях $\mathbf{p} - \mathbf{p}'$. Для этого приходится делать какие-то предположения о виде этой функции, поскольку ее анал и

тический расчет в соответствии с формулой (82) не представляется возможным. Следует добавить, что имеется и еще одна принципиальная причина неточности в существующих расчетах функции $\alpha^2(\omega) g(\omega)$ в простых металлах. Выражение для матричного элемента $g_{p, p', \lambda}$ (81) справедливо с точностью до 2-го порядка по затравочному псевдопотенциальному $\tilde{V}_{1e}(p, p')$, и только в этом порядке оно представляет собой матричный элемент от градиента экранированного псевдопотенциала $\tilde{V}_{1e}(r)$ (82), определяющего зонную структуру металла. В общем же случае в рамках многочастичного подхода и взаимодействующей системе электронов и ионов матричный элемент электрон-фононного взаимодействия не может быть представлен в виде градиента какого-либо потенциала.

Чтобы убедиться в этом, запишем матричный элемент электрон-фононного взаимодействия для блоховских электронов в следующем виде^{81,84}:

$$g_{p, p', \lambda} = -i \sqrt{\frac{N}{2M\omega_{q, \lambda}}} A_{p, p'}(q + K) e_{q, \lambda} \times \\ \times \sum_{K'} \tilde{\epsilon}_{el}^{-1}(q + K, q + K', 0) (q + K') V_{1e}(q + K'), \quad (85)$$

здесь $A_{p, p'}(q + K)$ — формфактор рассеяния блоховских электронов

$$A_{p, p'}(q + K) = \int d\mathbf{r} u_{p'}^*(\mathbf{r}) e^{-i(q+K)\mathbf{r}} u_p(\mathbf{r}), \quad (86)$$

где $u_p(\mathbf{r})$ — блоховская часть волновой функции

$$\Psi_p(\mathbf{r}) = u_p(\mathbf{r}) e^{ip\mathbf{r}}.$$

Величиной $\tilde{\epsilon}_{el}^{-1}(q + K, q + K', 0)$ обозначена эффективная диэлектрическая проницаемость блоховских электронов, учитывающая эффекты перенормировки за счет вершинной функции. Конкретный вид $\tilde{\epsilon}_{el}^{-1}(q + K, q + K', 0)$ найти крайне сложно, однако это не очень существенно для наших целей. Важно лишь следующее обстоятельство: для блоховских электронов $\tilde{\epsilon}_{el}^{-1}(q + K, q + K', 0)$ является матрицей в пространстве векторов обратной решетки K и K' . Для однородного же электронного газа $\tilde{\epsilon}^{-1}(q + K, q + K', 0) = \delta_{KK'} \tilde{\epsilon}^{-1}(q + K)$. Тогда легко убедиться, что для свободных электронов выражение для $g_{p, p', \lambda}$ можно переписать в виде формулы (84), где величина $\nabla V(r)$ имеет вид

$$\nabla V(\mathbf{r}) = \sum_K \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} e^{-i(q+K)\mathbf{r}} (q + K) \tilde{\epsilon}_{el}^{-1}(q + K, 0) V_{1e}(q + K). \quad (87)$$

В общем случае блоховских электронов обозначим вектор, стоящий под знаком суммы по K' , через $W(q + K)$:

$$W(q + K) = \sum_{K'} \tilde{\epsilon}_{el}^{-1}(q + K, q + K', 0) (q + K') V_{1e}(q + K') \quad (88)$$

и разложим его на составляющие, параллельные и перпендикулярные вектору $(q + K)$. Тогда выражение для $g_{p, p', \lambda}$ можно переписать в следующем виде:

$$g_{p, p', \lambda} = -i \sqrt{\frac{N}{2M\omega_{q, \lambda}}} e_{q, \lambda} [\langle \psi_{p'}^* | \nabla V(\mathbf{r}) | \psi_p \rangle + \langle \psi_{p'}^* | \text{rot } M(\mathbf{r}) | \psi_p \rangle]. \quad (89)$$

Здесь первое слагаемое в квадратных скобках происходит от составляющей вектора $\mathbf{W}(\mathbf{q} + \mathbf{K})$, параллельной $\mathbf{q} + \mathbf{K}$, и равно

$$\nabla V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{K}} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} e^{-i(\mathbf{q}+\mathbf{K})\mathbf{r}} (\mathbf{q} + \mathbf{K}) \tilde{\epsilon}_{el}^{-1}(\mathbf{q} + \mathbf{K}, 0) V_{le}(\mathbf{q} + \mathbf{K}), \quad (90)$$

где

$$\tilde{\epsilon}_{el}^{-1}(\mathbf{q} + \mathbf{K}, 0) = \sum_{\mathbf{K}'} \tilde{\epsilon}^{-1}(\mathbf{q} + \mathbf{K}, \mathbf{q} + \mathbf{K}', 0) \frac{(\mathbf{q} + \mathbf{K})(\mathbf{q} + \mathbf{K}')}{|\mathbf{q} + \mathbf{K}|^2} \frac{V_{le}(\mathbf{q} + \mathbf{K}')}{V_{le}(\mathbf{q} + \mathbf{K})}. \quad (91)$$

Соответственно, второе слагаемое может быть записано в виде

$$\begin{aligned} \text{rot } \mathbf{M}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{K}} \int \frac{id\mathbf{q}}{(2\pi)^3} e^{-i(\mathbf{q}+\mathbf{K})\mathbf{r}} \times \\ \times [\mathbf{W}(\mathbf{q} + \mathbf{K}) - (\mathbf{q} + \mathbf{K}) \tilde{\epsilon}_{el}^{-1}(\mathbf{q} + \mathbf{K}, 0) V_{le}(\mathbf{q} + \mathbf{K})]. \end{aligned} \quad (92)$$

Первое слагаемое в формуле (89), как раз отвечает приближению жесткого иона, обычно используемому при вычислении функции $\alpha^2(\omega) g(\omega)$. При этом в качестве функции $V(\mathbf{r})$ берется полный кристаллический потенциал. В работе ⁸⁰ отмечалось, что скорее всего именно это обстоятельство и приводит к отличию теоретических значений функции $\alpha^2(\omega) g(\omega)$ от экспериментальных данных. Как видно из формул (89)–(92), приближение жесткого иона, в самом деле, является совершенно неоправданным. На существование в изменении кристаллического потенциала под действием фононов слагаемых типа $\text{rot } \mathbf{M}(\mathbf{r})$ указывалось в целом ряде работ ^{82–84}. К сожалению, сколь-нибудь подробный количественный анализ величины $\text{rot } \mathbf{M}(\mathbf{r})$ и ее вклада в электрон-фононное взаимодействие к настоящему времени отсутствует.

Вывод о недостаточности приближения жестких ионов, конечно, не обесценивает полностью всех существующих микроскопических расчетов функции $\alpha^2(\omega) g(\omega)$, а также константы электрон-фононной связи λ . В ряде таких расчетов были получены весьма интересные качественные результаты, касающиеся, например, природы различия константы λ в сверхпроводящих и несверхпроводящих карбидах и нитридах переходных металлов ⁸⁵, тенденций для T_c в ряду 4d-переходных металлов ⁸⁶ и т. п. (см. подробнее об этом ^{3, 8, 50}). Ясно, однако, что без последовательного анализа роли поперечных эффектов, связанных с функцией $\text{rot } \mathbf{M}$, невозможно построение строгой количественной теории электрон-фононного взаимодействия.

Возвращаясь к возможным ограничениям на значение T_c , вытекающим из решения уравнений Элиашберга, отметим, что единственными ограничениями, существующими в этой теории, связаны с неравенствами (79). Поскольку в самих уравнениях Элиашберга не существует каких бы то ни было ограничений на функцию $\alpha^2(\omega) g(\omega)$ и ее моменты, то это фактически означает отсутствие ограничений и на величину T_c в рамках этих уравнений. С другой стороны, из микроскопического определения функции $\alpha^2(\omega) g(\omega)$ следует, что для любого металла величины моментов этой функции не могут быть произвольно большими. В частности, в рамках приближения жесткого иона можно легко получить ^{3, 45} выражение для первого момента $M(1)$ для простых металлов с точностью до второго порядка по V_{le} :

$$M(1) = \frac{N(0)\langle I^2 \rangle}{M} = \frac{1,51}{r_s} \overline{\tilde{V}_{le}^2(\mathbf{q}) \Omega_{pl}^2}; \quad (93)$$

Здесь r_s — параметр сжатости электронного газа, Ω_{pl} — плазменная частота ионов, и $\tilde{V}_{ie}^2(\mathbf{q})$ — средний квадрат экранированного псевдопотенциала:

$$\overline{\tilde{V}_{ie}^2(\mathbf{q})} = \frac{1}{\tilde{V}_{ie}^2(0)} \int_0^{2k_F} \frac{dq q^3}{(2k_F)^2} \tilde{V}_{ie}^2(\mathbf{q}). \quad (94)$$

В простых металлах величина $\overline{\tilde{V}_{ie}^2(\mathbf{q})}$ является довольно малой ($\approx 0,01$ — $0,05$), что и приводит к малости $M(1)$ по сравнению с квадратом ионной плазменной частоты. Используя развитую Петтифором⁸⁷⁻⁸⁸ технику приближенного вычисления матричных элементов электрон-фононного взаимодействия, в работе⁸⁹ были получены соответствующие ограничения на $N(0)\langle I^2 \rangle$ и для случая переходных металлов. К сожалению, все эти ограничения сами по себе довольно мало конструктивны, если иметь в виду попытки создания сверхпроводящих металлов и сплавов с максимальными значениями T_c . В самом деле, если мы обратимся к равенству (93), то мы увидим, что основное ограничение на $M(1)$ связано с малостью величин $\tilde{V}_{ie}^2(\mathbf{q})$, однако в рамках приближений, использованных при выводе формулы (93), $\tilde{V}_{ie}^2(\mathbf{q})$ определяется в основном величиной затравочного псевдопотенциала $V_{ie}(\mathbf{q})$, который является свойством конкретного атома и не может быть произвольно изменен. Далее, величины r_s и Ω_{pl} определяются валентностью и равновесным объемом металла. При этом в свою очередь равновесный объем зависит от свойств псевдопотенциала. Отсюда ясно, что для понимания причин, ограничивающих значение $M(1)$, а следовательно, и T_c , необходимо самосогласованное решение всей задачи расчета электронных и фононных свойств металла.

Существование гораздо более конструктивной причины, ограничивающей возможные значения $M(1)$ в металлах, было отмечено в работе Гомерсалла и Джорфи⁹⁰. В рамках одночастичного подхода к теории электрон-фононного взаимодействия они показали, что величина $M(1)$ определяет перенормировку средних фононных частот металла за счет электрон-фононного взаимодействия,

$$\langle \omega^2 \rangle = \langle \Omega^2 \rangle_0 - \frac{4}{5} \epsilon_F N(0) M(1), \quad (95)$$

где ϵ_F — энергия Ферми, $N(0)$ — плотность состояний электронов на поверхности Ферми. Используя эту формулу для 5d-переходных металлов, авторы⁹⁰ пришли к выводу, что средний квадрат частоты для 5d-металлов, имеющих о. ц. к. структуру, обращается в ноль при числе электронов на атом $n = 4,7$ и $6,8$, что отвечает реальной границе, разделяющей в 5d-переходных металлах о. ц. к. и г. п. у решетки. Конечно, к результатам, полученным в одночастичном приближении, нельзя относится с полным доверием, тем более, что при этом подходе совершенно неопределенной остается величина $\langle \Omega^2 \rangle_0$. Можно, однако, строго показать⁵⁰ в рамках адабатического многочастичного приближения, что для средних фононных частот, в действительности существует формула аналогичная (95). При этом для $\langle \Omega^2 \rangle_0$ также можно получить точное выражение через матрицу обратной ДП блоховских электронов. К сожалению, каких-либо конкретных расчетов величины $\langle \Omega^2 \rangle_0$ до настоящего времени не имеется. Что же касается так называемого зонного вклада в фононные частоты, который и связан с вкладом функции $\alpha^2(\omega) g(\omega)$, то его расчеты в рамках модели жесткого иона были проведены для ряда переходных металлов и сплавов

^{91,92}. Как показано в этих работах, именно влиянием слагаемого, обусловленного электрон-фононным взаимодействием, можно объяснить наличие различного рода аномалий в фононных спектрах изученных в работах ^{91,92} переходных металлов и сплавов. Даже независимо от точного определения величины $\langle \Omega^2 \rangle_0$, из формулы (95) следует, что возможные значения величины $M(1)$ для любого металла не могут превосходить значения

$$M(1) \leq \frac{\langle \Omega^2 \rangle_0}{(4/5) \cdot \epsilon_F N(0)}, \quad (96)$$

ибо в противном случае в системе возникает неустойчивость решетки. Ясно, конечно, что условие (96) является в некотором смысле избыточным. В реальной системе едва ли возможно обращение в нуль средних квадратов фононных частот. Решеточная неустойчивость возникает обычно при размягчении какой-то отдельной ветви колебаний $\omega_\lambda(\mathbf{q})$ и в малой области волновых векторов \mathbf{q} . Таким образом, из этого обстоятельства — взаимосвязи фононных частот и матричного элемента электрон-фононного взаимодействия — нельзя получить каких-либо общих ограничений на T_c . Можно лишь еще раз подчеркнуть необходимость конкретных и точных расчетов всех свойств металлов.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключение мы кратко суммируем итоги рассмотрения, проведенного в этом обзоре.

1. Показано, что необходимым критерием эффективности механизма сверхпроводимости, т. е. существование достаточно высоких значений T_c (по крайней мере $T_c > 1\text{K}$), является отрицательность знака полной статической ДП системы. Показано, также, что этот критерий вполне может быть выполнен в реальных металлических системах, и при этом не возникает никакого противоречия ни с принципом причинности, ни с устойчивостью системы.

2. Более того, этот критерий заведомо выполнен во всех реальных сверхпроводниках за счет ионного вклада (или, что то же самое, за счет электрон-фононного взаимодействия) в полную ДП кристалла. Физическая причина отрицательного знака полной статической ДП в электрон-ионных системах связана с сильными эффектами локального поля в системе точечных ионов, благодаря чему электрон-фононное взаимодействие по абсолютной величине в таких системах преобладает над прямым кулоновским отталкиванием электронов. В простейшем случае квазизотропной системы критерий отрицательности полной статической ДП совпадает с полученным ранее в работе Кулика ⁴⁰ критерием сверхпроводимости, имеющим вид

$$C_{\text{зв}} < C_{\text{желе}},$$

здесь $C_{\text{зв}}$ — реальная скорость звука в металле, а $C_{\text{желе}}$ — скорость звука в модели «желе».

3. Что касается эффективности нефононных механизмов сверхпроводимости, то для них необходимо существование отрицательных значений электронной части статической ДП ($\epsilon_{el}(\mathbf{q}, 0) < 0$). В обзоре на примере однокомпонентной электронной плазмы на несжимаемой подложке показано, что такая ситуация также вполне возможна. В частности, в этой модели неравенство $\epsilon_{el}(\mathbf{q}, 0) < 0$ выполнено в очень широком интервале плотностей электронного газа $6 < r_s < 75$, и при этом в самом электронном газе отсутствуют какие-либо неустойчивости вплоть до $r_s \approx 75$. Однако в металлических системах из-за связи электронов с фононной системой кристалла наличие отрицательных значений $\epsilon_{el}(\mathbf{q}, 0)$ может привести к неу-

стойчивости фононных частот. В частности, в модели «желе», где ионы рассматриваются как однородная непрерывная среда, фононные частоты следующим образом выражаются через ε_{el} :

$$\omega^2(\mathbf{q}) = \frac{\Omega_{pl}^2}{\varepsilon_{el}(\mathbf{q}, 0)}.$$

Как видно из этой формулы, существование отрицательных значений $\varepsilon_{el}(\mathbf{q}, 0)$ в такой системе неизбежно приводит к неустойчивости фононов. В реальных кристаллах, где фононные частоты более сложным образом выражаются через статическую электронную ДП, вполне возможно выполнение неравенства $\varepsilon_{el}(\mathbf{q}, 0) < 0$. В этом случае вопрос о существовании нефононного механизма сверхпроводимости ($\varepsilon_{el}(\mathbf{q}, 0) < 0$) и устойчивости фононного спектра должен решаться при конкретном и точном расчете свойств системы.

4. Существование отрицательных значений статической электронной ДП возможно только в системах с сильным обменно-корреляционным взаимодействием. Отсюда, в частности, следует, что для рассмотрения проблемы высокотемпературной сверхпроводимости необходим выход за рамки приближения слабой связи. Получено уравнение для определения T_c , учитывающее эффекты сильной связи, которое показывает, что критерий эффективности механизма сверхпроводимости ($\varepsilon_{tot}(\mathbf{q}, 0) < 0$), полученный ранее фактически в приближении слабой связи, является необходимым и в случае сильной связи. Для выяснения вопроса, является ли этот критерий достаточным, т. е. будет ли в действительности T_c высоким в системе с отрицательной статической ДП, необходимо нахождение точного решения этого уравнения. К сожалению, последовательной теории такого рода пока не существует.

5. В рамках теории сверхпроводимости, основанной на уравнениях Элиашберга, отсутствуют какие-либо ограничения на возможные значения T_c . Совместный анализ уравнений сверхпроводимости и динамики решетки, однако, показывает, что в действительности такие ограничения существуют и связаны с влиянием электрон-фононного (точнее адиабатического электрон-ионного) взаимодействия на частоты фононов. К сожалению, и в этом случае отсутствует последовательная теория, позволяющая в данный момент получить какие-либо строгие оценки возможных максимальных значений T_c или предсказать практические пути получения материалов с высокими значениями T_c . В этом направлении, однако, имеются достаточно хорошие перспективы, связанные с развитием методов микроскопического расчета электронных и фононных свойств металлов.

Авторы считают своим приятным долгом поблагодарить В. Л. Гинзбурга за постоянный интерес и поддержку работы на всех этапах написания статьи. Мы благодарны также Д. А. Киржничу, И. И. Мазину, С. Н. Рашкееву, Ю. А. Успенскому и многим другим за ценные дискуссии по материалам обзора.

Физический институт им. П. Н. Лебедева
АН СССР

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Little W. A.—Phys. Rev. Ser. A, 1964, v. 134, p. 1416.
2. Гинзбург В. Л.—ЖЭТФ, 1964, т. 47, с. 2318; Phys. Lett. 1964, v. 13, p. 104.
3. Проблема высокотемпературной сверхпроводимости/Под ред. В. Л. Гинзбурга, Д. А. Киржница.—М.: Наука, 1977.
4. Dolgov O. V., Kirzhnitz D. A., Maksimov E. G.—Rev. Mod. Phys. 1981, v. 53, p. 81.
5. Долгов О. В., Максимов Е. Г.—УФН, 1981, т. 135, с. 441.

6. Cohen M. L., Anderson P. W.—In: AIP Conference on d-and f-band. Superconductivity.—N. Y.: Proc. AIP, 1972.—P. 17.
7. Kirzhnits D. A., Maksimov E. G., Khomskii D. I.—J. Low Temp. Phys., 1973, v. 10, p. 79;
8. Вонсовский С. В., Изюмов Ю. А., Курмаев Э. Э. Сверхпроводимость переходных металлов их сплавов и соединений.—М.: Наука, 1977.
9. Berg A. F., Schaeffer J. R. Effe—Phys. Rev. Lett., 1966, v. 17, p. 432.
10. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Электродинамика сплошных сред.—М.: Физматлит, 1959.
11. Пайнс Д., Нозье Ф. Теория квантовых жидкостей.—М.: Мир, 1967.
12. Martin P.—Phys. Rev., 1967, v. 161, p. 143.
13. Киржнитс Д. А.—УФН, 1976, т. 119, с. 357.
14. Долгов О. В., Максимов Е. Г.—Письма ЖЭТФ, 1978, т. 28, с. 3.
15. Сканави Г. И. Физика диэлектриков.—М.; Л.: Гостехиздат, 1947.
16. Тамм И. Е. Основы теории электричества.—М.: Наука, 1977.
17. Слэтер Дж. Диэлектрики, полупроводники, металлы.—М.: Мир, 1969.
18. Baus M., Nansen J. P.—Phys. Rept., 1980, v. 59, p. 1.
19. Горобченко В. Д., Максимов Е. Г.—УФН, 1980, т. 130, с. 65.
20. Рашкеев С. Н. Дипломная работа.—М.: МФТИ, 1981.
21. Сереглеу D.—Phys. Rev. Ser. B, 1978, v. 18, p. 3126.
22. Сереглеу D., Alder B. J.—Phys. Rev. Lett., 1980, v. 45, p. 566.
23. Caire C. M., Margch N. H.—Adv. Phys., 1975, v. 24, p. 101.
24. Bloch F.—Zs. Phys., 1930, Bd. 61, S. 206.
25. Kimball J. C.—Phys. Rev. Ser. A, 1973, v. 7, p. 1648.
26. Kugler A. A.—J. Stat. Phys., 1975, v. 12, p. 35.
27. Devreese J. T., Brosens F., Lemmens L. F.—Phys. Rev. Ser. B, 1980, v. 21, p. 1363.
28. Горобченко В. Д., Кон В.—ЖЭТФ, 1981, т. 80, с. 754.
29. Rajagopal A. K.—Adv. Chem. Phys., 1980, v. 41, p. 59.
30. Von Barth, Hedin L.—J. Phys. Ser. C, 1972, v. 5, p. 1625.
31. Gunnarsson O., Lundqvist B. I.—Phys. Rev. Ser. B, 1976, v. 13, p. 4274.
32. Moruzzi Y. I., Janak J. F., Williams A. K. Calculated Electronic Properties of Metals.—N. Y.: Pergamon Press, 1978.
33. Rajagopal A. K., Singhal S. P., Benerjee M., Kimball J. C.—Phys. Rev. Ser. B, 1978, v. 17, p. 2262.
34. Perdew J. P., Datta T. Phys. Stat. Sol. Ser. b, 1980, v. 102, p. 283.
35. Vosko H., Wilk L., Nusair M.—Can. J. Phys., 1980, v. 58, p. 1200.
36. Kukkonen C. A., Overhauser A. W.—Phys. Rev. Ser. B, 1979, v. 20, p. 550.
37. Долгов О. В.—Автореферат кандидатской диссертации.—М.: МФТИ, 1978.
38. Копаев Ю. В.—Тр. ФИАН СССР, 1975, т. 86, с. 3.
39. Пайнс Д. Элементарные возбуждения в твердых телах.—М.: Мир, 1965.
40. Кулик И. О.—ЖЭТФ, 1964, т. 47, с. 2159.
41. Силин В. П.—ЖЭТФ, 1960, т. 38, с. 977.
42. Зырянов П. С., Окулов В. И., Силин В. П.—ЖЭТФ, 1970, т. 58, с. 1295.
43. Канторович В. М.—ЖЭТФ, 1963, т. 45, с. 1638.
44. Гейликман Б. Т.—УФН, 1966, т. 88, с. 327.
45. Пашцикай Э. А.—ЖЭТФ, 1968, т. 54, с. 2387.
46. Ihm J., Cohen M. L., Tuau S. G.—Phys. Rev. Ser., B, 1981, v. 23, p. 3258.
47. Максимов Е. Г.—ЖЭТФ, 1975, т. 69, с. 2236.
48. Garland J. W.—Phys. Rev., 1966, v. 153, p. 460.
49. Scalapino D. J.—In: Superconductivity/Ed. R. D. Parks—N. Y.: M Dekker, 1969.—V. 1, p. 449.
50. Allen P. B.—In: Dynamical Properties for Solids. V. 3/Ed. G. K. Norton, M. Radugin A. A.—Amsterdam; North-Holland, 1980.
51. Элиашберг Г. М.—ЖЭТФ, 1960, т. 38, с. 966.
52. Элиашберг Г. М.—ЖЭТФ, 1960, т. 39, с. 1437.
53. Grimvall G. Phys. Scripta, 1976, v. 4, p. 63.
54. Батыев Э. Г.—ФТТ, 1964, т. 6, с. 3554.
55. Howell J. M., McMillan W. L., Dynes R. C.—Preprint Bell Lab., Pt. I.—1971; Preprint Bell. Lab. Pt. II.—1977.
56. McMillan W. L., Howell J. M.—Цит. в ⁴⁹ сб.
57. Веденеев С. И.—Препринт ФИАН СССР № 193.—Москва, 1977.
58. Галкин А. А., Дьяченко А. И., Свириступов В. М.—ЖЭТФ, 1974, т. 66, с. 2262.
59. Янсон И. К.—Ibid., с. 1035.

60. Омельянчук А. Н., Куллик И. О., Шехтер Р. И. — ФИТ, 1977, т. 3, с. 1543.
61. Leavens C. R., Carbottte I. P. — Can. J. Phys., 1971, v. 49, p. 724.
62. Медведев М. В., Пашицкий Э. А., Пятилетов Ю. С. — ЖЭТФ, 1973, т. 65, с. 1186.
63. Каракозов А. Е., Максимов Е. Г., Машков С. А. — ЖЭТФ, 1975, т. 68, с. 1937.
64. McMillan W. L. — Phys. Rev., 1968, v. 167, p. 331.
65. Дубовский Л. Б., Козлов А. Н. — ЖЭТФ, 1975, т. 68, 2224.
66. Allen R. B., Dynes R. C. — Phys. Rev. Ser. B, 1975, v. 12, p. 905.
67. Wu Hang-Sheng, Ji Guang-dao. — Acta Phys. Sinica, 1978, v. 27, p. 746.
68. Ji Guang-dao, Cai Jun-dao. — Ibid., 1979, v. 28, p. 571.
69. Ji Guang-dao, Cai Jun-dao. Ibid., 1979, v. 28, p. 853.
70. Долгов О. В., Карактанов В. С., Максимов Е. Г. — В кн. XXI Всесоюзное совещание по физике низких температур: Тезисы докладов.—Харьков, 1980.—Ч. 1, с. 4.
71. Bergman G., Rainier D. — Zs. Phys., 1973, Bd. 263, S. 59.
72. Leavens C. R. — J. Phys. Ser., F, 1977, v. 7, p. 1911.
73. Carbottte J. P., Dynes R. C. — Phys. Rev., 1968, v. 172, p. 476.
74. Haymann B., Carbottte J. P. — Phys. Stat. Sol., 1974, v. 656, p. 439.
75. Tomlinson P. G., Carbottte J. P. — Phys. Rev. Ser. B, 1976, v. 13, p. 4739.
76. Tomlinson P. G., Swihart J. C. — Ibid., 1979, v. 18, p. 1867.
77. Gaspari G. D., Gyorffy B. L. — Phys. Rev. Lett., 1974, v. 28, p. 801.
78. Harmon B. L., Sinha S. K. — Phys. Rev. Ser. B, 1977, v. 16, p. 3919.
79. Butler W. H., Smith H. G., Wakabayashi Q. — Phys. Rev. Lett., 1977, v. 33, p. 1004.
80. Glötzl O., Rainier D., Schober H. R. — Zs. Phys. Ser. B, 1979, Bd. B35, S. 317.
81. Каракозов А. Е., Максимов Е. Г. — ЖЭТФ, 1978, т. 74, с. 681.
82. Pindor A. J. — Sol. State Comm., 1973, v. 12, p. 153.
83. Ball M. A. — J. Phys. Ser., C, 1977, v. 10, p. 4921.
84. Pickett W. E. — Ibid. 1979, v. 12, p. 1491.
85. Klein B. M., Papacostopoulos D. A. — Phys. Rev. Lett., 1974, v. 32, p. 1193.
86. Butler W. H. — Phys. Rev. Ser. B, 1977, v. 15, p. 5267.
87. Pettifor D. G. — J. Phys. Ser. F, 1977, v. 7, p. 613.
88. Pettifor D. G. — Ibid., 1977, v. 7, p. 1009.
89. Yin Dao-lo, Zhang Li-Yuan, Dai Yau-andong. Acta Phys. Sinica, 1979, v. 28, p. 841.
90. Gomersall I. R., Gyorffy B. L. — Phys. Rev. Lett., 1974, v. 33, p. 1286.
91. Varma C. M., Weber W. — Phys. Rev. Ser. B, 1979, v. 19, p. 6142.
92. Terakura K. — J. Phys. Ser. C, 1978, v. 11, p. 469.