

В качестве примера, следуя работе [3], рассмотрим ЭП кремния как реакцию электронного газа на эмпирический псевдопотенциал [4]. В отличие от работы [3] к $V_1(\mathbf{r})$ относим только вклад самой длинноволновой и одновременно наибольшей Фурье-компоненты с $\mathbf{G}=(1; 1; 1)$; оставшуюся часть потенциала рассматриваем как $V_2(\mathbf{r})$. Результаты расчета главных Фурье-компонент ЭП сведены в таблицу.

Результаты расчета Фурье-компонент ЭП

G	$V(G)$	${}^p G$			
		1	2	3	4
111	0.07425	-1.733	-1.734	-1.651	-1.639
220	-0.02	0.340	0.476	0.418	0.300
311	-0.0283	0.293	0.692	0.474	0.431
222	0	0	0.391	0.331	0.465
400	0	0	0.268	0.296	0.286

П р и м е ч а н и е. Псевдопотенциал дан с учетом структурного фактора, ЭП — в электронах на ячейке. 1 — стандартная теория линейного отклика, 2 — теория Томаса—Ферми для полного псевдопотенциала, 3 — теория настоящей работы, 4 — «точный» зонный расчет по двум специальным точкам в приведенной части зоны Бриллюэна [5].

Можно видеть, что предлагаемая теория существенно ближе к «точной». Некоторое уменьшение «запрещенной» (222)-компоненты незначительно. Таким образом, найдено новое приближение, связывающее ЭП с полным потенциалом. Его простота и довольно высокая точность позволяют надеяться, что оно найдет применение в тех случаях, когда полный расчет электронного спектра оказывается слишком сложной задачей.

Отметим в заключение, что в данной статье не рассматривалось построение самосогласованного потенциала по заданным потенциалам ионов. Организация соответствующего итерационного процесса благодаря явной связи ЭП с полным псевдопотенциалом довольно очевидна.

Л и т е р а т у р а

- [1] Теория неоднородного электронного газа / Под ред. О. Лундквиста и Н. Марча. М.: Мир, 1987. 400 с.
- [2] Kohn W., Sham L. J. Phys. Rev., 1965, vol. A140, N 4, p. 1133—1140.
- [3] Baldereshi A., Mashke K., Milchev A. et al. Phys. St. Sol. B, 1981, vol. 108, N 2, p. 511—520.
- [4] Хейне В., Коэн М., Уэйр Д. Теория псевдопотенциала. М.: Мир, 1973. 546 с.
- [5] Chadi D., Cohen L. Phys. Rev. B, 1973, vol. 8, N 10, p. 5747—5753.

Донецкий физико-технический
институт АН УССР
Донецк

Поступило в Редакцию
8 февраля 1988 г.
В окончательной редакции
13 июня 1988 г.

УДК 537.312.62

Физика твердого тела. том 30, в. 11, 1988
Solid State Physics, vol. 30, № 11, 1988

ВЛИЯНИЕ ДАВЛЕНИЯ НА ФЛУКТУАЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ В МЕТАЛЛОКЕРАМИЧЕСКИХ СВЕРХПРОВОДНИКАХ

B. M. Свистунов, B. Ю. Таренков, A. И. Дьяченко, O. B. Григуть,
O. I. Черняк, A. B. Василенко

В большинстве опубликованных исследований влияния давления на сверхпроводящие свойства металлооксидов Y—Ba—Cu—O наблюдалось уширение резистивного $R(T)$ перехода в сверхпроводящее состояние [1—3],

что авторами объясняется фазовой и структурной неоднородностью исследованных образцов. Действительно, изготовленные по стандартной керамической технологии образцы, которые изучались в работах [1-3], представляли собой существенно неоднородную гранулярную среду. Даже однородное давление не приведет к однородной деформации гранул в такой среде — в зависимости от случайной ориентации и формы соседних гранул деформация может меняться на порядок величины. Это может привести как к уменьшению, так и к увеличению критической температуры T_c зерен. Для многофазных образцов уширение с давлением $R(T)$ перехода может быть также связано с различной реакцией на давление составляющих керамику фаз [3].

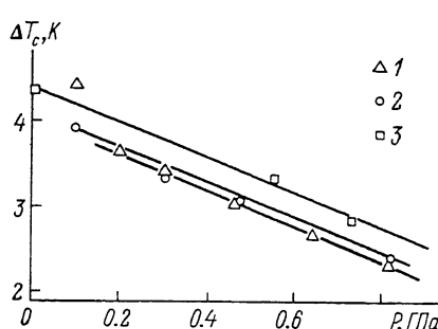


Рис. 1. Зависимость ширины сверхпроводящего перехода ΔT_c ($0.5-0.01 R/R_N$) от приложенного давления P для образцов металлокерамики $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$, с различной удельной электропроводностью: $\rho = 5.0 \cdot 10^{-4}$ (1), $6.8 \cdot 10^{-4}$ (2), $1.1 \cdot 10^{-3} \Omega \cdot \text{м} \times \text{см}$ (3).

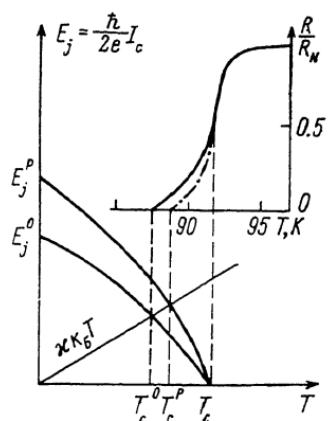


Рис. 2. Изменение зависимости энергии джозефсоновской связи $E_j(T)$ под действием давления.

На вставке — сужение $R(T)$ перехода, соответствующее изменению $E_j(T)$, E_j^0 , E_j^T — джозефсоновская энергия связей и температура установления фазовой коherентности при $P=0$; E_j^P и T_c^P — под давлением P .

В настоящей работе на серии образцов $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ обнаружено существенное сужение $R(T)$ перехода при воздействии гидростатического давления $P \leq 1.0$ ГПа. Наблюдаемый эффект объясняется уменьшением температурного интервала, где существенны флуктуации фазы параметра порядка при объемном сжатии. Для устранения отмеченного выше недостатка обычной металлокерамической технологии и создания плотных (малопористых) образцов однофазный порошок $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ обжимался между наковальнями при давлении $P \leq 3.0$ ГПа. Полученные пластины размерами $\sim 10 \times 0.5 \times 0.08$ мм отжигались на воздухе при температуре 1200 К. Плотность образцов составляла 95 % от теоретического значения, удельное сопротивление можно было изменять в пределах $\rho = 5 \times 10^{-3} - 5 \cdot 10^{-4} \Omega \cdot \text{см}$, варьируя длительность и температуру отжига. Электрические контакты — напыленные пленки меди с переходным сопротивлением $\sim 10^{-2} \Omega/\text{мм}^2$. Измерения выполнялись по четырехзондовой схеме с использованием модуляционной методики при токе 50 мкА. Форма $R(T)$ перехода не изменялась с повышением измерительного тока до 200 мкА. Давление создавалось в бомбе с керосиномасляной смесью в качестве передающей среды. После предварительного обжатия образцов при $P \sim 0.3$ ГПа характеристики при приложении и снятии давления становились обратимыми. Ширина $R(T)$ перехода металлокерамики фиксировалась на уровне 0.1—0.9 и 0.5—0.01 R/R_N (R_N — сопротивление образца при $T > T_c$), в последнем случае более адекватно учитывается область флуктуационного размытия.

Как видно из рис. 1, для образцов с различной электропроводностью ρ ширина $R(T)$ перехода ΔT_c , измеренная на уровне 0.5—0.01 R/R_N ,

уменьшалась со скоростью $d \ln \Delta T_c / dP = -0.6 \text{ ГПа}^{-1}$, т. е. при $\Delta P = 0.7 \text{ ГПа}$ ΔT_c менялось на 50 %. Наиболее естественное объяснение этого результата находит в модели, представляющей металлокерамику как слабосвязанную джозефсоновскую среду, образованную сверхпроводящими гранулами и несверхпроводящими прослойками. Возможно, функцию таких несверхпроводящих слабых связей выполняют плоскости двойникования [4]. Известно, что макроскопическая фазовая когерентность в сетке джозефсоновских контактов наступает, если энергия связи контактов E_j превышает энергию тепловых флуктуаций $k_B T$ [5], $E_j \geq k_B T$.

Давление влияет как на межзеренные прослойки, так и на сами гранулы. Но, как установлено [1-3], температура T_c середины сверхпроводящего $R(T)$ перехода металлокерамики $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ с давлением практически не меняется (в нашем эксперименте $d \ln T_c / dP \sim 3 \cdot 10^{-3} \text{ ГПа}^{-1}$). В то же время эффект сжатия может оказывать очень сильное влияние на величину критического тока контактов I_c . Для контактов типа $S-I-S$ и $S-N-S$ величина I_c экспоненциально зависит от параметров слабого звена — высоты φ и ширины d потенциального барьера в $S-I-S$ связях, расстояния между сверхпроводящими электродами t и длины когерентности ξ_N в $S-N-S$, т. е. $I_c = I_0 \exp(-\zeta)$ ($\zeta \sim d \sqrt{\varphi}$ или $\zeta = t/\xi_N$). В разупорядоченной структуре и для слабой сверхпроводящей связи ζ может оказаться большой величины, $\zeta \sim 10$ [5]. Поэтому даже незначительное изменение параметров слабого звена (уменьшение d , t , φ и рост ξ_N) будет приводить к росту I_c .

При этом увеличивается джозефсоновская энергия связи $E_j = \hbar I_c / 2e$, следовательно, сужается флуктуационная область, где энергия тепловых флуктуаций превышает E_j (рис. 2). Как видно из рис. 2, этот вывод не связан с видом температурной зависимости $I_c(T)$, а также со значением коэффициента \times в условии установления фазовой когерентности $E_j(T_c^0) = \times k_B T_c^0$ при некоторой температуре $T_c^0 < T_c$.

Таким образом, в достаточно стехиометрически однородных и плотных образцах высокотемпературных сверхпроводников ширина $R(T)$ перехода ΔT_c (0.5 ± 0.01) обусловлена флуктуационными эффектами. С экспоненциальной точностью (т. е. учитывая только величины, которые экспоненциально зависят от давления) $\Delta T_c^P \simeq \Delta T_c^0 \exp(\gamma P)$, где $\gamma = \beta d \zeta / dP$. Параметр β можно определить, используя соотношение теории протекания $j_c \sim I_c / L_0^2$ [5] и формулу для критического тока $S-N-S$ ($S-I-S$) контактов $I_c \sim (T_c - T)^n \exp(-\zeta)$ [7], где j_c — экспериментальная плотность критического тока, L_0 — переколяционная длина [5], $1 \leq n \leq 2$; изменением L_0 с давлением пренебрегаем. Комбинируя эти выражения с условием $k_B T_c^0 \sim E_j(T_c^0)$ и учитывая зависимость ζ от температуры (через ξ_N в $S-N-S$ контактах), находим

$$d \ln \Delta T_c^P / dP = -\beta d \ln j_c^P / dP, \quad (1)$$

где $\beta = 1/n [\xi_N(T)/\xi_N(T_c^0)]$ (для $S-I-S$ контактов $\beta = 1$). Формула (1) хорошо согласуется с наблюдаемым изменением критического тока металлокерамики с давлением: $d \ln j_c^P / dP = 1 \pm 0.1 \text{ ГПа}^{-1}$ при $n = 1.5$ и $\xi_N(T)/\xi_N(T_c^0) = \sqrt{T_c^0/T}$, T — температура азотной ванны. Отличие показателя n от единицы подтверждает, что в керамике в основном реализуются контакты $S-N-S$ типа [4, 8].

Л и т е р а т у р а

- [1] Griessen R. Phys. Rev. B, 1987, vol. 36, N 10, p. 5284—5290.
- [2] Driessens A., Griessen R., Koeman N. et al. J. Phys. Rev. B, 1987, vol. 36, N 10, p. 5602—5605.

¹ В зависимости от отношения длины свободного пробега электрона в N -металле к длине когерентности ξ_N : $\xi_N = \hbar v_F / 2\pi kT$ ($l \gg \xi_N$) и $\xi_N = (\hbar v_F / 6\pi kT)^{1/2}$ ($l \ll \xi_N$) [6]. Давление может приводить как к увеличению фермиевской скорости v_F (особенно для полуметаллов и полупроводников), так и к изменению длины пробега l .

- [3] Будько С. Л., Гапотченко А. Г., Головашкин А. И. и др. Письма в ЖЭТФ, 1987, т. 46, Приложение, с. 226—227.
- [4] Deutscher G., Muller K. A. Phys. Rev. Lett., 1987, vol. 59, N 10, p. 1745—1747.
- [5] Иоффе Л. Б., Ларкин А. И. ЖЭТФ, 1981, т. 81, № 2, с. 707—718.
- [6] Шмидт В. В. Введение в физику сверхпроводимости. М.: Энергия, 1982. 280 с.
- [7] Бароне А., Патерно Дж. Эффект Джозефсона: физика и применения. М.: Мир, 1984. 640 с.
- [8] Свистунов В. М., Ревенко Ю. Ф., Григута О. В., Таренков В. Ю. ФТТ, 1988, т. 30, № 2, с. 584—587.

Донецкий физико-технический
институт АН УССР
Донецк

Поступило в Редакцию
26 апреля 1988 г.
В окончательной редакции
13 июня 1988 г.

УДК 537.32

Физика твердого тела, том 30, в. 11, 1988
Solid State Physics, vol. 30, N 11, 1988

ТЕРМОГАЛЬВАНОМАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА НЕОДНОРОДНЫХ СРЕД В СЛАБОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Б. Я. Балагуров

1. В настоящем сообщении представлены результаты теоретического рассмотрения термогальваномагнитных свойств изотропных двухкомпонентных сред в линейном по магнитному полю H и по термоэдс α приближении. Методами, аналогичными предложенным в [1-3], установлена структура холловской составляющей эффективного тензора термоэдс и показано, что в нее входит некоторая трехпараметрическая функция Φ . Для этой функции выведена формула, выражающая Φ через электрическое поле и градиент температуры в среде (при $H=0, \alpha=0$), что дает возможность исследовать величину Φ численными методами. При равных теплопроводностях компонент функция Φ может быть найдена в аналитическом виде, так что в этом случае задача получает полное решение, а выражение для эффективного коэффициента Нернста допускает непосредственную экспериментальную проверку.

2. Согласно [1], для холловской составляющей σ_{ae} эффективного тензора проводимости $\hat{\sigma}_e$ (при $\alpha=0$) в линейном по H приближении имеем

$$\sigma_{ae} = \sigma_{a2} + (\sigma_{a1} - \sigma_{a2}) \varphi_e, \quad \varphi_e = \varphi(p, \sigma_2/\sigma_1), \quad (1)$$

где φ — двухпараметрическая функция (см. формулу (54) из [1]), зависящая от свойств среды при $H=0$. (Здесь и ниже обозначения те же, что и в [1-5]). Задача о теплопроводности (при $\alpha=0$) отличается от задачи о проводимости только обозначениями, так что выражение для x_{ae} следует из (1) при заменах $\sigma_{ai} \rightarrow x_{ai}$, $\sigma_i \rightarrow x_i$.

Аналогичным образом для холловской составляющей γ_{ae} тензора $\hat{\gamma}_e = \hat{\sigma}_e \hat{\alpha}_e$ в линейном по H и α приближении методами работ [1-3] получаем

$$\gamma_{ae} = \gamma_{a2} + (\gamma_{a1} - \gamma_{a2}) \Phi - [(\sigma_{a1} - \sigma_{a2})(\gamma_{122} - \gamma_{211})(\Phi - \varphi_e) - (\sigma_{a1} - \sigma_{a2})(\gamma_{122} - \gamma_{211})(\Phi - \varphi_x)] (\sigma_1 x_2 - \sigma_2 x_1)^{-1}. \quad (2)$$

Эффективный коэффициент Нернста N_e связан с γ_{ae} соотношением $N_e = -H^{-1}(\gamma_{ae}/\sigma_e)$. В (2) $\Phi = \Phi(p, \sigma_2/\sigma_1, x_2/x_1)$ — трехпараметрическая функция, для которой может быть получено выражение через напряженности электрического $E(r)$ и температурного $G(r) = -\nabla T$ полей в среде

$$\Phi = \langle [E^{(x)}, G^{(y)}]_s - [E^{(y)}, G^{(x)}]_s \rangle^{(1)} / ([\langle E^{(x)} \rangle, \langle G^{(y)} \rangle]_s - [\langle E^{(y)} \rangle, \langle G^{(x)} \rangle]_s). \quad (3)$$