

Аналогичные результаты получаются при меньших величинах перезарядки. На рис. 2 изображена зависимость энергии образования дефекта от величины ионизации аниона.

Отметим, что даже при тройной ионизации аниона энергия образования анионного дефекта в несколько раз превышает энергию образования катионного дефекта (хотя, казалось бы, анион находится в очень нестабильном положении). Конечно, эффективность данного механизма для процесса атомного дефектообразования должна сильно зависеть от времени жизни ионизованного аниона, но в настоящее время существуют лишь качественные оценки времен жизни таких состояний [7].

Таким образом, нами показано, что, во-первых, вплоть до тройной перезарядки аниона дефекту легче образовываться в катионной подрешетке; во-вторых, энергия образования атомного дефекта остается конечной величиной и для образования атомного дефекта необходимы достаточно высокие температуры.

Авторы признательны К. М. Салихову за стимулирующее обсуждение.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Клингер М. И., Лущик Ч. Б., Машовец Т. В. и др. // УФН. 1985. Т. 147. № 3. С. 523—559.
 [2] Varley J. H. O. // J. Nucl. Energy. 1954. V. 1. N 1. P. 130—143.
 [3] Chadderton L., Morgan D., Torrens I. // Phys. Lett. 1966. V. 20. N 4. P. 329—332.
 [4] Лейбфрид Г. Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов. М.: Наука. 1963. 312 с.
 [5] Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела. М.: Мир, 1979. Т. 2. 422 с.
 [6] Flynn C. P., Jaccusi G. // Phys. Rev. 1982. V. B25. N 10. P. 6225—6233.
 [7] Каршов В. Г., Клингер М. И. // ФТП. 1978. Т. 12. № 10. С. 1887—1897.

Институт химии твердого тела
и переработки минерального сырья СО АН СССР
Новосибирск

Поступило в Редакцию
4 апреля 1989 г.

УДК 538.913

Физика твердого тела, том 31, в. 10, 1989
Solid State Physics, vol. 31, № 10, 1989

РАСЧЕТ СПЕКТРАЛЬНОЙ ПЛОТНОСТИ ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ КАРБИДА И НИТРИДА ТАНТАЛА

Е. М. Гололобов, Н. Н. Дорожкин, Б. В. Новыш

Спектральная плотность электрон-фононного взаимодействия (СП ЭФВ) $\alpha^2(\omega) F(\omega)$ играет важную роль в физике сверхпроводимости, определяя, в частности, температуру перехода в сверхпроводящее состояние T_c .

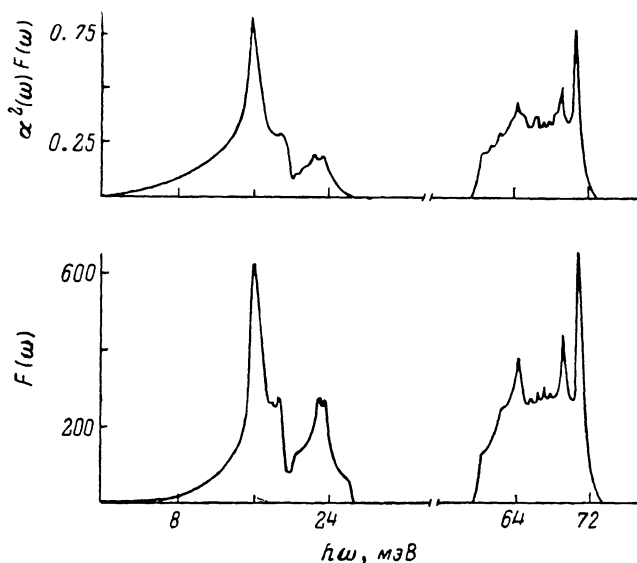
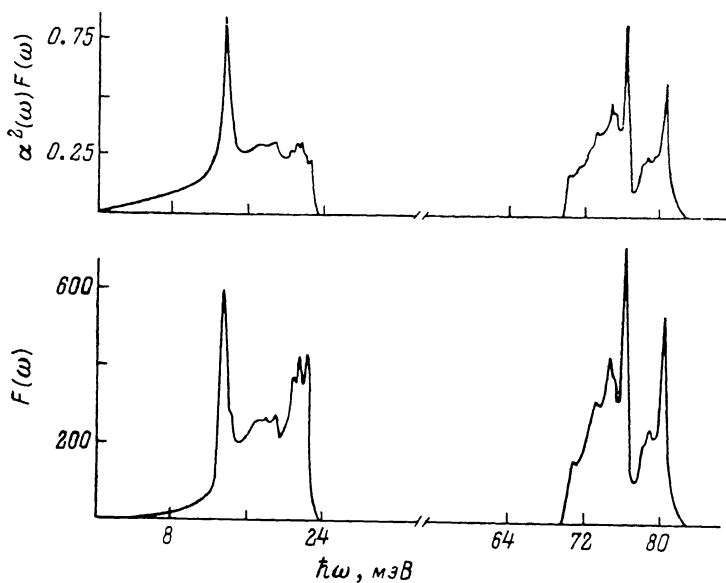
Мы приводим результаты расчета СП ЭФВ двух сверхпроводящих систем — карбида и нитрида тантала (структура типа В1) в локальном приближении жесткого МТ-потенциала [1]. В этом приближении СП ЭФВ имеет вид

$$\alpha^2(\omega) F(\omega) = \frac{mE_F}{\hbar^2\pi^2N(E_F)} \sum_{\alpha} \sum_l 2(l+1) \sin^2(\delta_l^{\alpha} - \delta_{l+1}^{\alpha}) \times \\ \times \frac{n_l^{\alpha} n_{l+1}^{\alpha}}{n_{\delta l}^{\alpha} n_{\delta l+1}^{\alpha}} \frac{1}{M_{\alpha}\omega} F_{\alpha}(\omega), \quad (1)$$

где m — масса электрона; \hbar — постоянная Планка, E_F — энергия Ферми; $N(E_F)$, n_l^{α} — полная и парциальные плотности электронных состояний

на уровне Ферми соответственно; α определяет тип атома в элементарной ячейке; δ_i^α — сдвиги фаз; M_α — массы атомов; n_{0i}^α — парциальные плот-

а



Спектральная плотность ЭФВ (вверху) и плотность фоновых состояний карбида тантала (а) и нитрида тантала (б).

$\alpha^2(\omega)F(\omega)$ — в безразмерных единицах, $F(\omega)$ имеет нормировку $\int_0^\infty F(\omega) d\omega = 6$ (размерность эВ⁻¹).

ности состояний для одиночного рассеивателя; $F_\alpha(\omega)$ — «амплитудно-взвешенные» плотности фоновых состояний, определяемые как

$$F_\alpha(\omega) = \sum_{q, \nu} |\mathcal{E}_{q\nu}^\alpha|^2 \delta(\omega - \omega_{q\nu}), \quad (2)$$

где $\mathcal{E}_{q\nu}$ — вектор поляризации фонона; q, ν — его волновой вектор и индекс ветви; ω — частота.

Парциальные и полная плотности состояний были определены в результате самосогласованных расчетов энергетической зонной структуры [2] (использовался «скалярный» вариант релятивистского расчета зонной структуры). На основании этих расчетов были определены также плотности состояний в приближении одиночного рассеивателя и сдвиги фаз δ_i^a .

Расчет «взвешенных» плотностей фононных состояний осуществлялся на основании модели двойных оболочек [3]. Рассчитанные СП ЭФВ наряду с одновременно определенными плотностями фононных состояний карбида и нитрида тантала приведены на рисунке *a, б* соответственно. С помощью рассчитанных $\alpha^2(\omega) F(\omega)$ были определены константа электрон-фононного взаимодействия

$$\lambda = 2 \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\omega} \alpha^2(\omega) F(\omega), \quad (3)$$

а также первый и второй частотные моменты СП ЭФВ $\langle \omega \rangle$ и $\langle \omega^2 \rangle$. Оценки величины кулоновского псевдопотенциала μ^* производились по формуле [4]

$$\mu^* = 0.20N^*(E_F)/(1 + N^*(E_F)), \quad (4)$$

где $N^*(E_F)$ учитывают оба направления спина.

На основании формулы Макмиллана—Дайнса были определены также температуры перехода в сверхпроводящее состояние данных соединений

$$T_c = \frac{\langle \omega \rangle}{1.20} \exp \left\{ - \frac{1.04(1 + \lambda)}{\lambda - \mu^* - 0.62\lambda\mu^*} \right\}. \quad (5)$$

Для карбида и нитрида тантала были получены следующие значения параметров: $\lambda = 0.692$ (0.788), $\langle \omega \rangle = 246$ К (236 К), $\mu^* = 0.07$ (0.088), $T_c = 10.5$ К (11.6 К).

Экспериментальные значения температуры перехода в сверхпроводящее состояние составляют для TaC 10.35 К, а для TaN лежат в пределах от 8.7 до примерно 11 К (разброс экспериментальных значений, приводимых в разных источниках, связан с трудностями получения стабильных стехиометрических образцов).

На основании полученных результатов можно сделать вывод о том, что локальное приближение жесткого МТ-потенциала дает, по-видимому, достаточно надежные результаты в случае систем с высокой симметрией кристаллической решетки и достаточно плотной упаковкой.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Rietschel H. Z. // Z. Phys. 1978. V. B30. N 2. P. 271—275.
 [2] Гололобов Е. М., Дорожкин Н. Н., Новыш Б. В. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 2. С. 290—293.
 [3] Weber W. // Phys. Rev. 1973. V. B8. N 12. P. 5083—5092.
 [4] Papaconstantopoulos D. A., Klein B. M., Boyer L. L. / Phys. Rev. 1985. V. B31. N 2. P. 752—761.

Институт физики твердого тела
и полупроводников АН БССР
Минск

Поступило в Редакцию
6 апреля 1989 г.