

Определение констант электрон-фононного взаимодействия из экспериментальных зависимостей сверхпроводящих щелей от температуры в MgB_2

С. А. Кузьмичев¹⁾, Т. Е. Кузьмичева⁺, С. Н. Чесноков

Физический факультет МГУ им. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

⁺ Физический институт им. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 9 января 2014 г.

После переработки 5 февраля 2014 г.

Путем подбора перенормированных констант электрон-фононного взаимодействия λ_{ij} с помощью системы уравнений Москаленко и Сула, выражения для частоты коллективных плазменных колебаний, полученного Леггеттом для двухщелевых сверхпроводников, и двух подгоночных параметров воспроизведены экспериментальные зависимости $\Delta_{\sigma,\pi}(T)$ энергии сверхпроводящих щелей от температуры для образцов MgB_2 с критическими температурами $22\text{ K} < T_c < 41\text{ K}$. Зависимости $\Delta_{\sigma,\pi}(T)$ были получены нами ранее при помощи спектроскопии многократных андеевских отражений, реализованной в контактах сверхпроводник–барьер–сверхпроводник на базе MgB_2 с различной степенью беспорядка кристаллической структуры. Показано, что определяющую роль в механизме сверхпроводимости MgB_2 играют константы внутризонного спаривания, при этом $\sqrt{V_{\sigma\sigma}V_{\pi\pi}}/V_{\sigma\pi} = 8-22$, а отношение межзонных констант α может находиться в диапазоне от 3 до 11. Произведено качественное определение набора значений элиашберговских констант λ_{ij}^0 для относительно чистого MgB_2 с максимальными $T_c \approx 40\text{ K}$. При этом $0.7 < \lambda_{\sigma\sigma}^0 \approx \lambda_{\text{eff}}^0 < 0.9$ и зависит от выбора верхнего предела интеграла в модели Бардина–Купера–Шиффера (БКШ) и значения эффективного кулоновского отталкивания μ_{eff}^* . Характеристическое отношение для щели в σ -зоне $2\Delta_{\sigma}/k_B T_c = 5.0-6.5$.

DOI: 10.7868/S0370274X14050129

Впервые система щелевых уравнений для двухщелевого сверхпроводника была получена независимо Москаленко [1] и Сулом [2]:

$$\Delta_i = \sum_{j=1,2} \lambda_{ij} \Delta_j F(\Delta_j),$$

$$F(\Delta_i) = \int_0^{\omega_D} \frac{dE}{\sqrt{E^2 + \Delta_i^2}} \tanh \frac{\sqrt{E^2 + \Delta_i^2}}{2k_B T}, \quad (1)$$

где Δ_i – величина сверхпроводящей щели в i -й зоне, ω_D – характерная энергия фононного спектра, k_B – константа Больцмана, T – температура. Формула для $F(\Delta_i)$ справедлива в интервале температур от нуля кельвинов до критической температуры T_c . Двухщелевая система также характеризуется четырьмя константами электрон-фононного взаимодействия $\lambda_{ij} = N_j(E_F) V_{ij}$. Здесь $N_j(E_F)$ – плотность состояний (в нормальном состоянии) на поверхности Ферми в j -й зоне, а V_{ij} – матричные элементы силы взаимодействия, определяющие внутризонные

и межзонные константы связи, из которых две диагональные константы являются внутризонными, т.е. определяющими взаимодействие в каждой из зон, а две недиагональные отвечают за межзонное взаимодействие. Согласно расчетам Николя и Карботте [3] при различных значениях λ_{ij} температурные зависимости обеих щелей $\Delta_{\sigma,\pi}(T)$ могут меняться кардинальным образом. Таким образом, получив экспериментальные зависимости энергий сверхпроводящих щелей от температуры, можно путем оценки и подбора констант λ_{ij} найти их значения из совпадения экспериментальных данных и зависимостей, рассчитанных из системы уравнений (1). Необходимо отметить, что проведение подобного фитинга позволяет определить именно перенормированные константы электрон-фононного взаимодействия λ_{ij} , а не элиашберговские константы [4], которые мы будем обозначать как λ_{ij}^0 . При этом знак межзонных констант взаимодействия можно было бы определить только в том случае, если бы экспериментальная методика позволяла детектировать смену знака у сверхпроводящих щелей $\Delta_{1,2}$. Иными словами, такая методика должна отвечать на вопрос о том, находятся ли вол-

¹⁾e-mail: kuzmichev at mig.phys.msu.ru

новые функции конденсатов в фазе или противофазе (так называемая s^\pm -симметрия). Считается, что отрицательное межзонное взаимодействие может быть реализовано посредством спиновых флуктуаций. В случае MgB_2 s^\pm -симметрия сверхпроводящего состояния практически невероятна из-за отсутствия в материале магнитных взаимодействий. Тем не менее в некоторых теоретических работах такая возможность не исключается [4].

Из-за наличия в системе из двух уравнений (1) четырех параметров λ_{ij} подбор констант может стать неоднозначным, т.е. одни и те же кривые будут описываться разными наборами перенормированных констант электрон-фононного взаимодействия. Следовательно, мы нуждаемся в дополнительных параметрах для однозначного решения данной задачи. Определение перенормированных величин λ_{ij} для MgB_2 с различной степенью беспорядка кристаллической структуры в диапазоне критических температур $22 \text{ K} < T_c < 41 \text{ K}$, а также элиашберговских констант λ_{ij}^0 для образцов MgB_2 с максимальными $T_c \approx 40 \text{ K}$ и являлось целью настоящей работы.

Как показал Э. Леггетт [5], в двухщелевых сверхпроводниках реализуются коллективные возбуждения сверхпроводящей плазмы, связанные с небольшими флуктуациями разности фаз двух сверхпроводящих конденсатов. Из работ Леггетта, а также Шарарова, Гусынина и Бека [6] следует, что такая леггеттовская плазменная мода ω_L характеризуется конечной частотой ω_0 (поэтому ее иногда называют модой экситонного типа), квадрат которой при $T \rightarrow 0 \text{ K}$ равен

$$\omega_0^2 = 4\Delta_1\Delta_2 \frac{\lambda_{12} + \lambda_{21}}{\lambda_{11}\lambda_{22} - \lambda_{12}\lambda_{21}}. \quad (2)$$

При этом $\omega_L \approx \omega_0$ при $k \rightarrow 0$, а значение ω_0 ограничено величиной малой щели: $\omega_0 \leq 2\Delta_\pi$.

В теоретических работах Искина и де Мело [7], Каракозова и Максимова [8, 9], а также ряде других работ [10, 11] на базе расчетов Леггетта для случая диборида магния были получены линейные зависимости $\omega_L^2(\Delta_\sigma\Delta_\pi)$. Линейная связь этих энергетических параметров в первом приближении (в диапазоне значений аргумента до 30 мэВ^2) подтверждена экспериментально группой Пономарева в работах [8, 12, 13]. Из них следует, что $\omega_L^2 \cong 4k_\lambda\Delta_\sigma\Delta_\pi$, где $4k_\lambda = 0.9 \pm 0.2$. Таким образом, используя либо значение леггеттовской плазменной моды, полученное из эксперимента, либо ее значение, аппроксимированное по эмпирической формуле, можно получить дополнительный параметр для определения перенормированных констант электрон-фононного взаимодействия, руководствуясь выражением (2).

Для примерного определения отношения межзонных констант α мы воспользовались формулой из работы [14] (с. 4):

$$\frac{2\Delta_1}{k_B T_c} \cong 3.52 \left[1 + \frac{N_2}{N_1} \left(\frac{\Delta_2}{\Delta_1} \right)^2 \ln \left(\frac{\Delta_1}{\Delta_2} \right) \right]. \quad (3)$$

Здесь индексы “1” и “2” переставлены местами относительно [14] так, чтобы большая щель соответствовала Δ_1 . Справедливость этого выражения в интервале значений недиагональных констант $0 \leq \lambda_{ij} \leq 0.5$ при условии, что $\lambda_{11} \gg \lambda_{22}, \lambda_{ij}$ ($\Delta_1 \gg \Delta_2$), была проверена авторами статьи [3]. Так как $\lambda_{12}/\lambda_{21} = N_2/N_1$, где $N_{1,2}$ – плотности состояний в каждой из зон, выразив это отношение из вышеуказанной формулы, получим

$$\alpha = \frac{\lambda_{12}}{\lambda_{21}} \cong \left(\frac{2\Delta_1}{k_B T_c} \frac{1}{3.52} - 1 \right) \left[\left(\frac{\Delta_2}{\Delta_1} \right)^2 \ln \left(\frac{\Delta_1}{\Delta_2} \right) \right]^{-1}. \quad (4)$$

После расчетов величины α по формуле (4) (из полученных нами экспериментальных значений $\Delta_{\sigma,\pi}$) было сделано интересное наблюдение о грубом соответствии отношения плотностей состояний в зонах и величины $2\Delta_\sigma/\Delta_\pi$ для MgB_2 : оказалось, что $N_\pi/N_\sigma \approx 2\Delta_\sigma/\Delta_\pi$ и лежит в диапазоне 5–15.

Наличие в MgB_2 изотопического эффекта по бору было продемонстрировано в работе [15]. Следовательно, существование куперовских пар в этом соединении обязано спариванию на фононах. Для определения перенормированных констант электрон-фононного взаимодействия λ_{ij} необходимо решить систему уравнений (1), (2), где параметр α определяется из (4). Мы имеем право решать указанные уравнения совместно, т.к. все они получены в приближении слабой связи Бардина–Купера–Шифера (БКШ). В результате для численных расчетов мы пользовались выражением

$$\lambda_{21}^{-1} \cong \frac{1 + \alpha}{k_\lambda} F(\Delta_1)F(\Delta_2) + \frac{\Delta_1}{\Delta_2} F(\Delta_1) + \alpha \frac{\Delta_2}{\Delta_1} F(\Delta_2), \quad (5)$$

в котором величина $k_\lambda = \omega_L^2/(4\Delta_1\Delta_2)$ может быть достоверно определена по наклону зависимости $\omega_L^2(\Delta_1\Delta_2)$, а для остальных констант можно записать

$$\lambda_{12} = \alpha\lambda_{21}, \quad \lambda_{ii} = [\Delta_i - \lambda_{i \neq j} \Delta_j F(\Delta_j)] / [\Delta_i F(\Delta_i)]. \quad (6)$$

Для вычисления интеграла $F(\Delta_i)$ в качестве ω_D за примерную величину окончания фононного спектра у MgB_2 мы брали максимальное значение частоты основной фононной моды $E_{2g} \approx 90 \text{ мэВ}$, которая, как

показывает моделирование, отвечает за “оптические” колебания атомов в плоскостях бора. Если варьировать параметр ω_D в диапазоне 90 ± 20 мэВ, то отклонения значений диагональных параметров λ составят не более $\pm 6\%$, а недиагональных – около $\pm 10\%$.

Экспериментальные значения основных параметров сверхпроводящего состояния были получены с помощью андреевской спектроскопии. Для реализации этого метода в объеме образцов создавались точечные андреевские контакты на микротрещине вида сверхпроводник–барьер–сверхпроводник (ScS) при $T = 4.2$ К по технике “break-junction”. По оценкам поперечник полученных контактов составлял от 30 до 300 нм. В соответствии с теорией [16], если эта величина меньше длины свободного пробега квазичастиц, то на производных вольт-амперных характеристик (ВАХ) ScS-контактов возникает серия минимумов дифференциальной проводимости, которую принято называть субгармонической щелевой структурой. Энергии сверхпроводящих щелей определялись из положений этих особенностей по формуле $V_n = 2\Delta_i/ne$, где n соответствует номеру рефлекса [16]. Таким образом, первый минимум будет наблюдаться при смещении, соответствующем $2\Delta/e$. Феномен многократных андреевских отражений позволяет определять величины щелей по этой формуле вплоть до T_c контакта. Для записи $dI(V)/dV$ -характеристик андреевских контактов использовалась автоматическая установка на базе цифровой карты АТ-МЮ-16Х (National Instruments) [17].

Как показывают проведенные в нашей лаборатории исследования, согласно представленным в работах [8, 9, 12, 13, 18, 19] данным соединение $Mg_{1-x}Al_xB_2$ является двухщелевым сверхпроводником. При наивысших T_c порядка 41 К большая щель Δ_σ может достигать значений 10–11.5 мэВ, а величины малой сверхпроводящей щели Δ_π лежат в диапазоне 1.5–2.5 мэВ. Характеристическое отношение БКШ для ведущей щели $2\Delta_\sigma/k_B T_c \approx 5.0$ –6.5, что указывает на сильное электрон-фононное взаимодействие и квазидвумерный характер сверхпроводимости, который сопровождается присутствием протяженных особенностей ван Хофа. Подобная ситуация, судя по всему, реализуется в высокотемпературных сверхпроводящих (ВТСП) купратах [20]. Похожие свойства имеют железосодержащие двухщелевые сверхпроводники. Так, по нашим данным в соединении $LaO(F)FeAs$ характеристическое отношение БКШ для большой щели находится в диапазоне 4–6.5 [21, 22]. Для сверхпроводящего арсенида железа $CeO(F)FeAs$ отношение $2\Delta_L/k_B T_c = 5.1 \pm 0.7$ [22]. Для $GdO(F)FeAs$ харак-

теристическое отношение составляет 4.8–6 [23–25]. Для соединения $FeSe$ $2\Delta_L/k_B T_c = 4.3$ –6 [22, 26, 27]. Для $LiFeAs$ оно равно 4.6–6.7 [28, 29]. Отсюда видно, что для железосодержащих сверхпроводников $2\Delta_L/k_B T_c = 4.3$ –6.7. Это хорошо согласуется с соответствующим характеристическим отношением для $Mg_{1-x}Al_xB_2$.

Для проведения фитинга нами были выбраны характерные для ScS-андреевских контактов, полученных на образцах MgB_2 с максимальными T_c , температурные зависимости σ - и π -щелей (закрытые и открытые значки на рис. 1 и 2 соответственно) в ин-

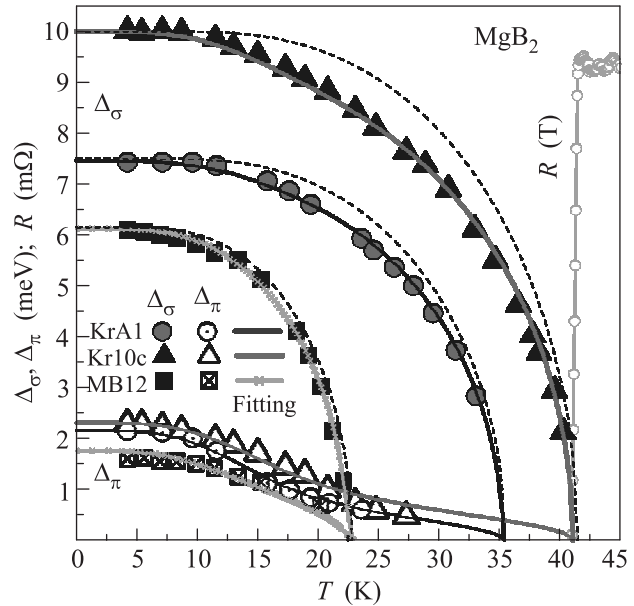


Рис. 1. Вплоть до T_c для представленных контактов $KrAl1$, $Kr10c$ и $MB12$ на базе MgB_2 (черные треугольники, квадраты и серые кружки соответственно) хорошо видны два сверхпроводящих щелевых параметра. Экспериментальные температурные зависимости для большой щели Δ_σ представлены закрытыми значками, для малой щели Δ_π – открытыми. Соответствующие им теоретические температурные зависимости $\Delta_{\sigma,\pi}(T)$, рассчитанные из уравнений Москаленко и Сула для двух зон, отображены сплошными линиями. Параметр $2\Delta_\sigma/k_B T_c = 5.0$ –6.2. Для сравнения штриховой линией приведены однозонные БКШ-образные зависимости. Серая кривая – резистивная зависимость $R(T)$ для образца $Kr10$

тервале температур $4.2 \text{ К} \leq T \leq T_c$. Хорошо видно, что с увеличением температуры происходит постепенное уменьшение величины сначала π -, а затем и σ -щели. Ход зависимостей $\Delta_{\sigma,\pi}(T)$ указывает на то, что обе щели закрываются при одной и той же температуре. При проведении фитинга мы учитывали связь между межзонным и внутризонным взаимо-

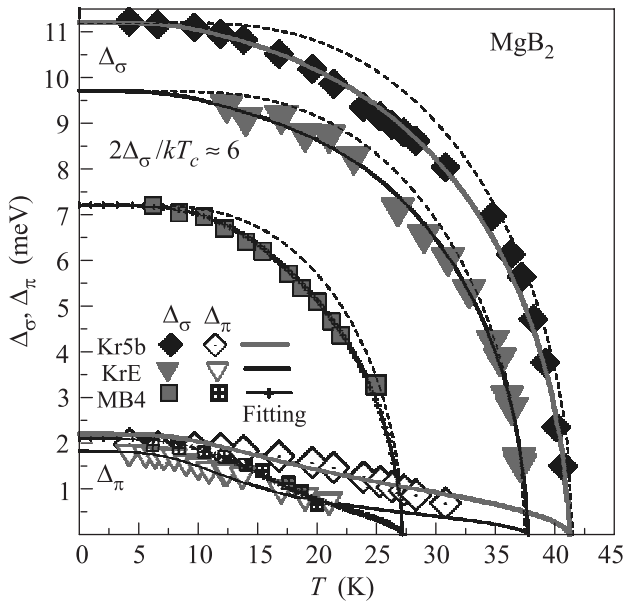


Рис. 2. Черные ромбы, серые треугольники и квадраты – экспериментальные температурные зависимости параметров порядка Δ_σ и Δ_π для контактов Kr5b, KrE и MB4 на базе MgB_2 соответственно. Для большой щели (закрытые значки) $2\Delta_\sigma/k_B T_c = 6.1 \pm 0.2$. Малая щель $\Delta_\pi(0) = 2.0 \pm 0.2$ мэВ (открытые значки). Соответствующие теоретические зависимости, рассчитанные из уравнений Москаленко и Сула для двухзонного сверхпроводника, представлены сплошными линиями. Для сравнения штриховой линией приведены однозонные БКШ-образные зависимости

действиями, определяющими характерную энергию леггеттовской плазменной моды [5–9]. Значение последней мы брали либо непосредственно из эксперимента [12, 13], либо из определяющей ее в первом приближении зависимости $\omega_L^2 \cong 0.9\Delta_\sigma\Delta_\pi$.

Проведенный подбор констант электрон-фононного взаимодействия λ_{ij} позволил добиться максимального соответствия теоретических температурных зависимостей щелей (сплошные линии на рис. 1 и 2), определяемых уравнениями Москаленко и Сула, нашим экспериментальным данным (значки). Параметр температуры для двумерной σ -щели в знаменателе интеграла (1) нормировался на величину $(2\Delta_\sigma/k_B T_c)/3.52$, что допустимо для оценочных расчетов [30]. Характеристическое отношение БКШ для трехмерной π -щели определялось как 3.52, что соответствует значению для сверхпроводящего конденсата со слабой связью и тенденции к достижению этого отношения π -конденсатом при $T_c \rightarrow 0$ из наших экспериментальных данных (см. рис. 5 из [18]). Из-за наличия межзонного взаимодействия ход обеих щелей отклоняется от однощелевых

БКШ-образных зависимостей, которые показаны на рис. 1 и 2 штриховыми линиями. Функция $\Delta_\pi(T)$ начинает закрываться при собственной критической температуре π -зон $T_c^\pi \approx 1/3T_c$, но не обращается в нуль, а тянется вплоть до общей T_c контакта. В диапазоне закрытия малой щели зависимость большой щели $\Delta_\sigma(T)$ прогибается (проходит ниже БКШ-зависимости). Таким образом, по мере увеличения межзонного взаимодействия локальная T_c контакта уменьшается относительно собственной T_c^σ для σ -зон (т.е. критической температуры, присущей исключительно σ -конденсату в гипотетическом случае отсутствия межзонного взаимодействия).

Уравнения (4)–(6) дают возможность определить наборы затравочных для фитинга констант λ_{ij} . Характер прогибов на зависимостях обеих щелей (см. рис. 1 и 2) позволяет уточнить поправки к перенормированным внутризонным константам λ_{ii} и подобрать в первом приближении значения этих недиагональных констант межзонного электрон-фононного взаимодействия при помощи фитинга [4]. Варьируя два параметра, коэффициент пропорциональности $4k_\lambda = \omega_L^2/\Delta_\sigma\Delta_\pi$ и отношение недиагональных перенормированных констант $\alpha = \lambda_{\sigma\pi}/\lambda_{\pi\sigma}$, мы пересчитывали набор λ_{ij} и добивались максимального совпадения экспериментальных температурных зависимостей щелей и рассчитанных по уравнениям Москаленко и Сула кривых. Эти параметры были выбраны для вариации, поскольку их истинные значения могут заметно отличаться от теоретически определенных. Дело в том, что мы использовали модель, в которой оба сверхпроводящих конденсата трехмерны и обладают слабой связью. В то же время в σ -зонах MgB_2 реализуются квазидвумерный транспорт и сильное электрон-фононное взаимодействие [12, 18, 19, 31, 32]. Это не может не сказаться на коэффициенте пропорциональности $4k_\lambda$. Последний, как уже было сказано выше, по нашим экспериментальным данным [8, 12, 13] примерно равен 1, что в 2–4 раза меньше значения, которое дает формула Леггетта (2) при подстановке констант λ_{ij} (или λ_{ij}^0 из [9]). Подбор значения $4k_\lambda$ для успешного фитинга, проведенный в данной работе, подтверждает этот вывод, т.к. совпадение расчетных кривых и экспериментальных точек достигалось лишь при искусственном занижении коэффициента $4k_\lambda$. Вполне возможно, что из-за ограничения диапазона бездиссипативных возбуждений величиной $2\Delta_\pi$ осциллирующая леггеттовская мода (2) “выдавливается” под малую щель [33]. Таким образом, определяемый из эксперимента коэффициент $4k_\lambda$ сильно занижен из-за уменьшения ω_L примерно в 2 раза. Расчет отношения $\alpha = \lambda_{\sigma\pi}/\lambda_{\pi\sigma}$

Расчетные значения перенормированных констант электрон-фононного взаимодействия λ_{ij} (при $\omega_D = E_{2g} \approx 90$ мэВ) для поликристаллических образцов MgB_2 с беспорядком кристаллической структуры

Контакты	T_c^{local} , К	$\lambda_{\sigma\sigma}$	$\lambda_{\pi\pi}$	$\lambda_{\sigma\pi}$	$\lambda_{\pi\sigma}$	$\sqrt{\lambda_{\sigma\pi}\lambda_{\pi\sigma}}$	β	α
Kr5b	41	0.34	0.19	0.074	0.012	0.030	8.4	6.1
Kr10c	41	0.32	0.21	0.063	0.0060	0.019	13.6	10.5
KrE	38	0.33	0.20	0.041	0.0056	0.015	17.0	7.3
KrA1	34.5	0.30	0.21	0.025	0.0054	0.012	22.0	4.7
MB12st	27.3	0.29	0.19	0.021	0.0077	0.013	18.4	2.75
MB4	26	0.285	0.21	0.063	0.0062	0.020	12.4	10.2
MB12sc	21.7	0.28	0.19	0.031	0.011	0.018	12.8	2.9

по формуле (4) обычно давал значения порядка 10 (т.е. $\alpha \gg 1$). Мы же варьировали этот подгоночный параметр в сторону уменьшения.

Если аккуратный фитинг с помощью двух вышеозначенных подгоночных параметров был невозможен, то для наилучшего попадания в прогибы на экспериментальных зависимостях мы варьировали значение малой сверхпроводящей щели в пределах экспериментальной погрешности ее определения 10% (для зависимости Kr5b на рис. 2). Отметим, что накладываемые на параметры фитинга условия позволяют подобрать *единственную* четверку перенормированных констант λ_{ij} для описания экспериментальных кривых $\Delta_{\sigma,\pi}(T)$.

Полученные значения для перенормированных констант λ приведены в табл. 1. Разброс величин для внутризонных констант оказался минимальным. При этом $\lambda_{\pi\pi}$, определяющая малую щель, практически не меняется и равна 0.2. Ведущая же $\lambda_{\sigma\sigma}$ плавно понижается от 0.34 до 0.28 вместе с падением T_c , что соответствует уменьшению большой щели Δ_σ при увеличении структурного беспорядка. Что касается межзонного взаимодействия, то средняя геометрическая величина $\sqrt{\lambda_{\sigma\pi}\lambda_{\pi\sigma}} \approx 0.02 \pm 0.01$ в целом не меняется с T_c . Из табл. 1 видно, что параметр $\beta = \sqrt{V_{\sigma\sigma}V_{\pi\pi}}/V_{\sigma\pi} = 8-22$, т.е. определяющую роль в механизме сверхпроводимости MgB_2 играют именно константы внутризонного спаривания λ_{ii} . Отношение межзонных констант $\alpha = \lambda_{\sigma\pi}/\lambda_{\pi\sigma}$ может находиться в диапазоне от 3 до 11.

Поскольку оказалось, что значения констант λ_{ij} , определенные для образцов MgB_2 (Kr5b, Kr10c, KrE) с максимальными $T_c \approx 40$ К, хорошо воспроизводятся, для качественной оценки элиашберговских констант λ_{ij}^0 было проведено усреднение этих значений (см. строку “Усреднение 1” в табл. 2). Показано, что в σ -конденсате реализуется феномен сильно-го электрон-фононного взаимодействия, т.к. по дан-

ных работ [12, 18, 19, 31, 32] характеристическое отношение БКШ в MgB_2 для σ -щели в “ведущей” дырочной зоне составляет $2\Delta_\sigma/k_B T_c = 5.0-6.5$. В приближении сильной связи необходимо учитывать константы кулоновского отталкивания. Мы полагали $\mu_{\text{eff}}^* \approx 0.23$ и 0.12 (для усреднений # 1 и 2, 3 соответственно). Нами использовались относительные константы кулоновского отталкивания $\mu_{\pi\pi}^*/\mu_{\sigma\sigma}^* = 0.82$, $\mu_{\sigma\pi}^*/\mu_{\sigma\sigma}^* = 0.45$, оцененные в теоретических работах [34, 35], и соблюдалось $\mu_{\pi\sigma}^* = \mu_{\sigma\pi}^*/\alpha^0$, так чтобы выполнялось условие $\alpha^0 = \lambda_{\sigma\pi}^0/\lambda_{\pi\sigma}^0$. Это позволило оценить по формулам перенормировки значения констант электрон-фононного взаимодействия λ_{ij}^0 , определяемых функцией Элиашберга:

$$\lambda_{ij}^0 = \lambda_{ij} \left(1 + \sum_{j=1,2} \mu_{ij}^* \right) / \left(1 - \sum_{j=1,2} \lambda_{ij} \right) + \mu_{ij}^*. \quad (7)$$

Из табл. 2 прекрасно видно, что нами достигнуто хорошее совпадение с теоретическими первопринципными расчетами (ср. значения λ_{ij}^0 в строке “Усреднение 1” и в строке “Расчет [34]”). Также можно сравнить полученный результат, например, с величинами λ_{ij}^0 , оцененными в работе [36] из экспериментальных исследований эффекта де Газа-ван Альфена на образце MgB_2 с $T_c^{\text{onset}} \approx 38$ К. Авторы [36] получили значения $\lambda_{\sigma\sigma}^0 = 0.9-1.2$ и $\lambda_{\pi\pi}^0 = 0.3-0.4$, что в целом согласуется с оценками настоящей работы. В работах [8, 9] константы λ_{ij}^0 были оценены в предположении о том, что μ_{ij}^* являются величинами одного порядка ($\mu_{\text{eff}}^* = 0.12$). Результаты расчетов, проведенных авторами [8, 9], близки к представленным в данной работе. Значительно различаются лишь межзонные константы, т.к. в [8, 9] $\lambda_{12}^0 \approx \lambda_{21}^0 \approx 0.14 \pm 0.02$. Сверхотношение $\lambda_{\sigma\pi}^0/\lambda_{\pi\sigma}^0 = N_\pi/N_\sigma < 11$ с результатом первопринципных расчетов отношения плотностей состояний из работ [34, 37] ($\alpha^0 \approx 1.4$), можно обнаружить значительное расхождение экспериментальной и теоретической оценок (см. табл. 2). Из уравнений

Расчетные значения элиашберговских констант электрон-фононного взаимодействия λ_{ij}^0 для MgB_2 с максимальными T_c *)

Контакты	T_c^{local} , К	$\lambda_{\sigma\sigma}^0$	$\lambda_{\pi\pi}^0$	$\lambda_{\sigma\pi}^0$	$\alpha^0/2$	$\Delta\sigma/\Delta\pi$	λ_{eff}^0	T_c^{McMill} , К
Kr5b	41	0.955	0.450	0.258	4.5	5.1	0.97	–
Kr10c	41	0.900	0.492	0.228	7.4	4.3	0.91	–
KrE	38	0.894	0.468	0.179	5.1	5.3	0.90	–
Усреднение 1 $\mu_{\text{eff}}^* = 0.23$, $\omega_D = 90$ мэВ	40	0.92	0.47	0.22	5.3	5	0.93	20
Расчет [34] <i>ab initio</i> $\mu_{\text{eff}}^* = 0.27$	39	1.0	0.45	0.21	0.7	2.6	1.1	20
Усреднение 2 $\mu_{\text{eff}}^* = 0.12$, $\omega_D = 90$ мэВ	40	0.74	0.37	0.16	5.0	5	0.75	28
Усреднение 3 $\mu_{\text{eff}}^* = 0.12$, $\omega_D = 70$ мэВ	40	0.84	0.39	0.19	5.6	5	0.85	37

) Относительные константы кулоновского отталкивания взяты как $\mu_{\pi\pi}^/\mu_{\sigma\sigma}^* = 0.82$, $\mu_{\sigma\pi}^*/\mu_{\sigma\sigma}^* = 0.45$ [34, 35], $\mu_{\pi\sigma}^* = \mu_{\sigma\pi}^*/\alpha^0$. Значение верхнего предела интегрирования в $F(\Delta_i)$ из (1) $\omega_D \approx E_{2g}$. В строках “Усреднение” приведены $\langle \lambda_{ij}^0 \rangle$ по контактам Kr5b, Kr10c и KrE, полученные для различных возможных значений μ_{eff}^* и ω_D . В столбце “ T_c^{McMill} ” представлены значения T_c , рассчитанные по формуле Макмиллана (для одноцелевого сверхпроводника), модифицированной Алленом и Дайнсом (8) [38], с использованием эффективных значений λ_{eff}^0 и μ_{eff}^* , причем $\langle \omega_{ln} \rangle \approx \sqrt{50 \cdot 95}$ мэВ примерно определяется диапазоном оптических фононных мод.

Москаленко и Сула следует, что $N_2/N_1 \approx \Delta_1/\Delta_2$. Соответствующий столбец с нашими экспериментальными значениями [12, 13, 18, 19] добавлен в табл. 2. Оказывается, что в среднем $\Delta\sigma/\Delta\pi \approx 5$. Следовательно, оцененное в этой работе отношение α примерно в 2 раза превосходит ожидаемое для классического случая взаимодействия двух сверхпроводящих конденсатов с тождественными БКШ-отношениями $2\Delta_i/k_B T_c^i = 3.52$. Указанное несоответствие может являться следствием как недооцененности влияния дисперсии по k_z при первопринципных расчетах N_σ (что влечет за собой завышение этой величины), так и необходимости коррекции системы уравнений Москаленко и Сула для случая зон с заметно отличающимися “собственными” характеристическими отношениями $2\Delta_i/k_B T_c^i$.

Следует отметить, что из-за неопределенности в значениях μ_{ij}^* подобная оценка констант λ_{ij}^0 достаточно груба. Тем не менее видно, что сверхпроводящее состояние в MgB_2 определяется константами внутризонного спаривания λ_{ii}^0 . С другой стороны, количественное и качественное согласие наших экспериментальных данных по энергетическим параметрам MgB_2 с предложенными теоретическими моделями двухщелевой сверхпроводимости [5–8] подчер-

кивает важность межзонного спаривания в этом материале.

Было бы разумно проверить, какое значение критической температуры T_c получится для сверхпроводника, обладающего набором μ_{ij}^* и оцененными нами параметрами λ_{ij}^0 . Можно попытаться сделать это по формуле Макмиллана, модифицированной Алленом и Дайнсом [38]. Для этого нужно заменить положенные авторами [38] параметры λ^0 и μ^* для однощелевого сверхпроводника на эффективные значения соответствующих величин (λ_{eff}^0 и μ_{eff}^*), рассчитанные для матрицы 2×2 , а в качестве $\langle \omega \rangle$ взять среднее геометрическое по диапазону оптических фононных мод MgB_2 , например $\langle \omega_{ln} \rangle \approx \sqrt{50 \cdot 95}$ мэВ. Тогда

$$T_c^{\text{McMill}} = \frac{\langle \omega_{ln} \rangle}{1.2} \exp \frac{-1.04(1 + \lambda_{\text{eff}}^0)}{\lambda_{\text{eff}}^0 - \mu_{\text{eff}}^*(1 + 0.62\lambda_{\text{eff}}^0)}. \quad (8)$$

Для результатов из строки “Усреднение 1” оцененная по формуле (8) $T_c^{\text{McMill}} \approx 20$ К ровно в два раза ниже настоящего значения. Если провести такое же усреднение по результатам фитинга для контактов Kr5b, Kr10c, KrE, положив $\mu_{\text{eff}}^* \approx 0.12$, то значения λ_{ij}^0 изменятся и $T_c^{\text{McMill}} \approx 28$ К (см. строку “Усреднение 2” в табл. 2). Если повторить расчет, положив верхний предел интегрирования ω_D в

$F(\Delta_i)$ из (1) примерно равным минимальному значению моды E_{2g} (≈ 70 мэВ) и $\mu_{\text{eff}}^* \approx 0.12$, то получится еще один набор значений λ_{ij}^0 (строка “Усреднение 3”), причем $T_c^{\text{McMill}} \approx 37$ К, что близко к истинному значению $T_c \approx 40$ К. Вопрос о том, насколько корректно формула (8) описывает связь между параметрами в случае двухщелевой сверхпроводимости и нужно ли подгонять значения ω_D и μ_{eff}^* , чтобы получить верную величину T_c , остается открытым.

Значения отношения $2\Delta/k_B T_c$ и ведущей константы $\lambda_{\sigma\sigma}^0 \approx 0.7-0.9$ для MgB_2 достаточно близки к λ_0 в ВТСП-купратах [39, 40]. Это позволяет проводить аналогии, касающиеся особенностей сверхпроводящего состояния. По нашим данным, отношение межзонных констант α находится в диапазоне 3–11 (см. табл. 1), что отражает существенное различие недиагональных констант электрон-фононного взаимодействия. Данная величина значительно превосходит соответствующее отношение, представленное в [34, 37], и примерно вдвое превышает отношение Δ_σ/Δ_π . Это указывает на необходимость коррекции двухзонных уравнений Москаленко и Сула (для случая зон со значительно отличающимися “собственными” отношениями $2\Delta_i/k_B T_c^i$) и корректного учета дисперсии по направлению k_z при первопринципных расчетах плотности состояний N_σ . Заметим, что по нашим оценкам типичные значения элиашберговских констант λ_{ij}^0 в зависимости от выбора величин ω_D и μ_{eff}^* находятся в диапазонах $\lambda_{\sigma\sigma}^0 \approx 0.7-0.9$, $\lambda_{\pi\pi}^0 \approx 0.4-0.5$, $\lambda_{\sigma\pi}^0 \approx 0.15-0.22$, $\lambda_{\pi\sigma}^0 \approx 0.015-0.021$ (см. табл. 2), а параметр $\beta = \sqrt{V_{\sigma\sigma} V_{\pi\pi}}/V_{\sigma\pi} = 8-22$. Таким образом, определяющую роль в механизме сверхпроводимости достаточно чистого MgB_2 с высокими $T_c \approx 40$ К играют константы внутризонного спаривания. При повышении степени беспорядка кристаллической структуры (и соответствующем падении T_c) перенормированная $\lambda_{\pi\pi} \approx 0.2$ и постоянна, а $\lambda_{\sigma\sigma}$ понижается от 0.34 до примерно 0.28 при падении T_c почти в два раза (см. табл. 1). Такое поведение может быть объяснено подавлением сильного электрон-фононного взаимодействия именно в квазидвумерной σ -зоне.

Мы выражаем благодарность руководителю нашей группы Я.Г. Пономареву за идею проведенных исследований, многочисленные рекомендации и конструктивную критику. Благодарим С.И. Красновободцева и Б.М. Булычева за предоставленные образцы, П.И. Арсеева и Н.К. Федорова за обсуждения, замечания и неоценимую поддержку. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант # 13-02-01451_a).

1. В. А. Москаленко, ФММ **4**, 503 (1959).
2. H. Suhl, B. T. Matthias, and L. R. Walker, Phys. Rev. Lett. **3**, 552 (1959).
3. E. J. Nicol and J. P. Carbotte, Phys. Rev. B **71**, 054501 (2005).
4. V. G. Kogan, C. Martin, and R. Prozorov, Phys. Rev. B **80**, 014507 (2009).
5. A. J. Leggett, Prog. Theor. Phys. **36**, 901 (1966).
6. S. G. Sharapov, V. P. Gusynin, and H. Beck, Eur. Phys. J. B **30**, 45 (2002).
7. M. Iskin and C. A. R. Sá de Melo, Phys. Rev. B **72**, 024512 (2005); **74**, 144517 (2006).
8. A. E. Karakozov, E. G. Maksimov, and Ya. G. Ponomarev, JETP Lett. **91**, 24 (2010).
9. E. G. Maksimov, A. E. Karakozov, B. P. Gorshunov, Ya. G. Ponomarev, E. S. Zhukova, and M. Dressel, J. Exp. Theor. Phys. **115**, 252 (2012).
10. A. Anishchanka, A. F. Volkov, and K. B. Efetov, Phys. Rev. B **76**, 104504 (2007).
11. D. F. Agterberg, E. Demler, and B. Janko, Phys. Rev. B **66**, 214507 (2002).
12. Ya. G. Ponomarev, S. A. Kuzmichev, M. G. Mikheev, M. V. Sudakova, S. N. Tchesnokov, N. Z. Timergaleev, A. V. Yargin, E. G. Maksimov, S. I. Krasnosvobodtsev, A. V. Varlashkin, M. A. Hein, G. Mueller, H. Piel, L. G. Sevastyanova, O. V. Kravchenko, K. P. Burdina, and B. M. Bulychev, Sol. State Comm. **129**, 85 (2004).
13. Ya. G. Ponomarev, S. A. Kuzmichev, M. G. Mikheev, M. V. Sudakova, S. N. Tchesnokov, H. H. Van, B. M. Bulychev, E. G. Maksimov, and S. I. Krasnosvobodtsev, JETP Lett. **85**, 46 (2007).
14. M. Iavarone, G. Karapetrov, A. E. Koshelev, W. K. Kwok, G. W. Crabtree, D. G. Hinks, W. N. Kang, E.-Mi Choi, H. J. Kim, H.-J. Kim, and S. I. Lee, Phys. Rev. Lett. **89**, 187002 (2002).
15. S. L. Bud'ko, G. Lapertot, C. Petrovich, C. E. Cunningham, N. Anderson, and P. C. Canfield, Phys. Rev. Lett. **86**, 1877 (2001).
16. R. Kúmmel, U. Günsenheimer, and R. Nicosky, Phys. Rev. B **42**, 3992 (1990).
17. Я. Г. Пономарев, С. А. Кузьмичев, М. В. Судаклова, С. Н. Чесноков, Б. А. Аминов, М. А. Лоренц, Х. Пиль, Сб. трудов Международной конференции Образовательные, научные и инженерные приложения в среде LabVIEW и технологии National Instruments, Россия, М. (2003), 153 с.
18. Ya. G. Ponomarev, S. A. Kuzmichev, N. M. Kadomtseva, M. G. Mikheev, M. V. Sudakova, S. N. Tchesnokov, E. G. Maksimov, S. I. Krasnosvobodtsev, L. G. Sevast'yanova, K. P. Burdina, and B. M. Bulychev, JETP Lett. **79**, 484 (2004).

19. S. A. Kuzmichev, T. E. Shanygina, S. N. Tchesnokov, and S. I. Krasnosvobodtsev, *Sol. State Comm.* **152**, 119 (2012).
20. Ya. G. Ponomarev, M. G. Mikheev, M. V. Sudakova, S. N. Tchesnokov, and S. A. Kuzmichev, *Phys. Status Solidi (c)* **6**, 2072 (2009).
21. Ya. G. Ponomarev, S. A. Kuzmichev, M. G. Mikheev, M. V. Sudakova, S. N. Tchesnokov, O. S. Volkova, A. N. Vasiliev, T. Hänke, C. Hess, G. Behr, R. Klingeler, B. Büchner, *Phys. Rev. B* **79**, 224517 (2009).
22. Ya. G. Ponomarev, S. A. Kuzmichev, T. E. Kuzmicheva, M. G. Mikheev, M. V. Sudakova, S. N. Tchesnokov, O. S. Volkova, A. N. Vasiliev, V. M. Pudalov, A. V. Sadakov, A. S. Usol'tsev, T. Wolf, E. P. Khlybov, and L. F. Kulikova, *J. Supercond. Nov. Magn.* **26**, 2867 (2013).
23. T. E. Shanygina, Ya. G. Ponomarev, S. A. Kuzmichev, M. G. Mikheev, S. N. Tchesnokov, O. E. Omel'yanovskii, A. V. Sadakov, Yu. F. Eltsev, A. S. Dormidontov, V. M. Pudalov, A. S. Usol'tsev, and E. P. Khlybov, *JETP Lett.* **93**, 94 (2011).
24. T. E. Shanygina, S. A. Kuzmichev, M. G. Mikheev, Ya. G. Ponomarev, S. N. Tchesnokov, Yu. F. Eltsev, V. M. Pudalov, A. V. Sadakov, A. S. Usol'tsev, E. P. Khlybov, and L. F. Kulikova, *J. Supercond. Nov. Magn.* **26**, 2661 (2013).
25. T. E. Kuzmicheva, S. A. Kuzmichev, M. G. Mikheev, Ya. G. Ponomarev, S. N. Tchesnokov, Yu. F. Eltsev, V. M. Pudalov, K. S. Pervakov, A. V. Sadakov, A. S. Usol'tsev, E. P. Khlybov, and L. F. Kulikova, *Europhys. Lett.* **102**, 67006 (2013).
26. Ya. G. Ponomarev, S. A. Kuzmichev, M. G. Mikheev, M. V. Sudakova, S. N. Tchesnokov, T. E. Shanygina, O. S. Volkova, A. N. Vasiliev, and Th. Wolf, *J. Exp. Theor. Phys.* **113**, 459 (2011).
27. D. Chareev, E. Osadchii, T. Kuzmicheva, J.-Y. Lin, S. Kuzmichev, O. Volkova, and A. Vasiliev, *Cryst. Eng. Comm.* **15**, 1989 (2013).
28. S. A. Kuzmichev, T. E. Shanygina, I. V. Morozov, A. I. Boltalin, M. V. Roslova, S. Wurmehl, and B. Büchner, *JETP Lett.* **95**, 537 (2012).
29. С. А. Кузьмичев, Т. Е. Кузьмичева, А. И. Болталин, И. В. Морозов, *Письма в ЖЭТФ* **98**, 816 (2013).
30. Е. Г. Максимов, частное сообщение.
31. T. Takasaki, T. Ekino, T. Muranaka, H. Fujii, and H. Akimitsu, *Physica C* **378–381**, 229 (2002); **388–389**, 147 (2003).
32. T. Ekino, A. M. Gabovich, M. S. Li, T. Takasaki, A. I. Voitenko, J. Akimitsu, H. Fujii, T. Muranaka, M. Pekala, and H. Szymczak, *Physica C* **426–431**, 230 (2005); R. A. Ribeiro, T. Ekino, T. Takasaki, T. Takabatake, and J. Akimitsu, *Physica C* **426–431**, 450 (2005).
33. M. E. Palistrant and F. G. Kochorbe, *Physica C* **241**, 345 (1995).
34. A. A. Golubov, J. Kortus, O. V. Dolgov, O. Jepsen, Y. Kong, O. K. Andersen, B. J. Gibson, K. Ahn, and R. K. Kremer, *J. Phys.: Cond. Matt.* **14**, 1353 (2002).
35. G. A. Ummarino, D. Daghero, R. S. Gonnelli, and A. H. Moudden, *Phys. Rev. B* **71**, 134511 (2005).
36. A. Carrington, P. J. Meeson, J. R. Cooper, L. Balicas, N. E. Hussey, E. A. Yelland, S. Lee, A. Yamamoto, S. Tajima, S. M. Kazakov, and J. Karpinski, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 037003 (2003).
37. J. M. An and W. E. Pickett, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 4366 (2001); A. Y. Liu, I. I. Mazin, and J. Kortus, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 087005 (2001).
38. W. L. McMillan, *Phys. Rev.* **167**, 331 (1968); P. B. Allen and R. C. Dynes, *Phys. Rev. B* **12**, 905 (1975).
39. A. S. Mishchenko, *Phys. Usp.* **52**, 1193 (2009).
40. E. A. Mazur and Y. Kagan, *J. Supercond. Nov. Magn.* **26**, 1163 (2013).