Температура перехода в сверхпроводниках с межзонным спариванием

Е. А. Мазур[1)], *В. М. Дубовик*

Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ", 115409 Москва, Россия

Поступила в редакцию 2 марта 2015 г.
После переработки 17 марта 2015 г.

С учетом сильной электрон-фононной связи рассматривается спаривание электронов в пределах полной ширины электронной зоны, а не только в узком слое у поверхности Ферми. Обнаружено, что эффект спаривания электронов, принадлежащих различным зонам, является решающим фактором для появления эффекта высокого T_c в некоторых двухзонных материалах. Предсказано существование еще одного семейства двухзонных высокотемпературных материалов с температурой T_c сверхпроводящего перехода, не уступающей T_c в купратах.

DOI: 10.7868/S0370274X15080081

Двухзонные и многозонные материалы, например диборид магния и недавно открытые пниктиды, открывают новые перспективы в исследовании высокотемпературных свойств [1, 2]. Считается, что высокое значение T_c в случае электрон-фононного (ЭФ) механизма сверхпроводимости воспроизводится теорией сильной связи Элиашберга [3, 4] только с неоправданно высокими константами ЭФ-взаимодействия, $\lambda \geq 3$. На самом же деле при высоких константах ЭФ-связи, $\lambda > 2$, вместо теории Мигдала–Элиашберга должен быть применен иной вариант теории ЭФ-систем [5]. В то же время было установлено, что реальная константа ЭФ-взаимодействия λ в каждой из зон в пниктидах не превышает единицу, $\lambda < 1$ (см. [6–8]). В [9–13] было показано, что реконструкция реальной (ReΣ) и мнимой (ImΣ) частей собственно-энергетической части (СЧ) в случае сильной связи не ограничена областью частот ω порядка предельной фононной частоты ω_D, а распространяется на гораздо большую область, $\omega \gg \omega_D$. В результате ЭФ-взаимодействие модифицирует СЧ-функцию Грина (ФГ), включая ее аномальную часть, на значительном энергетическом расстоянии от поверхности Ферми (в единицах дебаевских фононных частот), а отнюдь не только в ее окрестности, $\mu - \omega_D < \omega < \mu + \omega_D$ (здесь μ – химический потенциал). Целью настоящей работы является исследование вопроса о том, может ли межзонное спаривание повысить температуру сверхпроводящего перехода T_c в двухзонных материалах, например пниктидах (см. [1, 14], а также ссылки в этих работах). Для этого нами был построен обобщенный на случай двух зон вариант теории Мигдала–Элиашберга для двухзонных материалов с расположением центров зон в близких точках обратного пространства, в частности для пниктидов [14], при отличной от нуля температуре, $T \neq 0$, в обобщенном на двухзонный случай представлении, аналогичном представлению Намбу для однозонного случая. Построенная теория описывает эффекты конечности ширин электронных зон, позволяет рассматривать эффекты переменной плотности электронных состояний в пределах зон и учитывает дополнительно эффекты электрон-дырочной неэквивалентности, проистекающие из несимметричного расположения химического потенциала относительно дна и вершин зон, а также из двухзонного характера системы. Приведение полного списка работ по вычислению T_c в рамках двухзонной теории представляется трудной задачей. Поэтому авторы отсылают читателя к имеющимся обзорам и последним работам [6–8, 14, 15].

Учитывая все сказанное выше, будем рассматривать двухзонную ЭФ-систему с гамильтонианом $\hat{H}$, который включает электронную компоненту $\hat{H}_e$, ионную компоненту $\hat{H}_i$ и компоненту $\hat{H}_{e-i}$, отвечающую электрон-ионному взаимодействию в гармоническом приближении. Электронная ФГ $\hat{G}$ в матричной форме определяется как $\hat{G} = -\langle T\Psi(x)\Psi^{+}(x')\rangle$, куда обычные электронные операторы рождения и уничтожения входят в форме, обобщающей на двухзонный случай операторы Намбу. Записывая стандартные уравнения движения для электронных волновых функций и проводя усреднение с гамильтонианом $\hat{H}$, мы получаем уравнения для электронной

[1)]e-mail: eamazur@mephi.ru

ФГ. Концентрация электронов предполагается малой. Поэтому в силу слабой экранировки электронами эффектами экранирования ЭФ-взаимодействия можно пренебречь. Поведение матричной вершины $\hat{\Gamma}$ включает в себя эффекты электрон-электронной корреляции. Далее мы не будем выписывать явно первый электрон-электронный вклад в $\hat{\Sigma}_{el-el}(x, x')$, имея его, однако, в виду и рассматривая через поведение вершины $\hat{\Gamma}$ и $\hat{\Sigma}_{el-el}(x, x')$ все исследованные ранее (см., например, [15]) эффекты электрон-электронных корреляций и эффекты взаимодействия электронов через спиновые флуктуации в двухзонных материалах. Будем рассматривать межзонное спаривание электронов в двухзонной ЭФ-системе. В отличие от однозонного случая температурная ФГ электронов в двухзонной модели представляет собой матрицу 4×4, составленную с помощью операторов рождения $(\psi^+_{i\alpha}(\mathbf{r}))$ и уничтожения $(\psi_{i\alpha}(\mathbf{r}))$ электрона i-зоны $(i = 1,\ 2)$ в точке $x = (\mathbf{r}, t)$ с проекцией спина α. Функцию Грина двухзонной ЭФ-системы можно найти из очевидного равенства $\hat{g}^{-1}\hat{g} = \hat{1}$ через обратную матрицу Грина ЭФ-системы, удовлетворяющую известному соотношению диаграммной техники: $\hat{g}^{-1} = \hat{g}_0^{-1} - \hat{\Sigma}$, где $\hat{g}_0^{-1}$ – ФГ нулевого приближения, а $\hat{\Sigma}$ – матричная неприводимая СЧ двухзонной ЭФ-системы. В пренебрежении спариванием электронов в каждой из зон в отдельности, а также в пренебрежении всеми эффектами перенормировки химпотенциала за счет взаимодействий в каждой из зон и межзонных взаимодействий можно представить $\hat{\Sigma}$ в виде

$$\hat{\Sigma} = \\ = \begin{pmatrix} (1-Z_1)i\omega_n & 0 & 0 & \phi_{12} \\ 0 & (1-Z_1)i\omega_n & \phi_{12} & 0 \\ 0 & \phi^*_{12} & (1-Z_2)i\omega_n & 0 \\ \phi^*_{12} & 0 & 0 & (1-Z_2)i\omega_n \end{pmatrix}, \tag{1}$$

где ϕ_{12} отвечает за спаривание двух электронов из разных зон. В нашей ЭФ-системе имеется только один межзонный параметр порядка. Таким образом, мы не рассматриваем ситуацию с когерентным взаимодействием параметра порядка из двух зон, впервые описанную в [16, 17], когда в ЭФ-системе имеются интерферирующие параметры порядка первой и второй зон. Ситуация с двумя интерферирующими параметрами порядка двух зон рассматривалась в целом ряде работ, например в приложении к пниктидам [8] и дибориду магния [1]. Однако авторам неизвестны работы, в которых исследовались бы эффекты спаривания электронов из двух различных зон. Будем считать отличными от нуля лишь ФГ электронов из разных зон с противоположными направлениями спиновых моментов, т.е. положим, что ФГ электронов в одной зоне с противоположными направлениями спинов равны нулю и ФГ электронов из разных зон $(i \neq j)$, но с одинаково направленными спинами также равны нулю. Тогда в матрице $\hat{g}$ будут отличны от нуля лишь элементы, расположенные на двух ее диагоналях. Их явный вид легко найти с помощью приводимых ниже соотношений. Например, для g_{14} вблизи T_c в пренебрежении малым вкладом ϕ_{12} по сравнению с первым слагаемым знаменателя получаем

$$g_{14} = \frac{\phi_{12}}{(Z_1 i\omega_n - \xi_{1p})(Z_2 i\omega_n + \xi_{2p})}. \tag{2}$$

Запишем в температурной технике стандартное уравнение для элементов СЧ электронной ФГ $\hat{\Sigma}$ [18, 19], например, для Σ_{14}. Воспользуемся спектральным разложением электронной и фононной ФГ и произведем стандартное суммирование по частоте ω_n. Учтем также, что спектральная плотность $a(\mathbf{p}, z)$ связана с запаздывающей ФГ $g(\mathbf{p}, z)$ соотношением $a(\mathbf{p}, z) = -2\mathrm{Im}\, g(\mathbf{p}, z)$. Выполним аналитическое продолжение с мнимой оси на вещественную с помощью подстановки $i\omega_n \to \omega + i\delta$ и усредним левую и правую части получившегося уравнения для параметра порядка по всем направлениям импульса электронов первой зоны на энергетической поверхности ξ_1. Тогда φ_{12} будет зависеть лишь от двух величин: ξ_1 и ω. Оставим в сумме $\sum\limits_j$ только одно слагаемое, соответствующее незатухающим модам фононного спектра: $b_j(\mathbf{q}, z) = 2\pi\{\delta[z - \omega_0(\mathbf{q}) - \delta[z + \omega_0(\mathbf{q})]\}$. В результате с учетом того, что $\int\limits_S \frac{d^2\mathbf{p}'}{v_{\mathbf{p}'}} = N(\xi_2)$, где $N(\xi_2)$ – плотность электронных состояний на поверхности $\xi_2 = \mathrm{const}$, получаем уравнение для межзонного параметра порядка $\varphi_{12}(\xi_1, \omega)$:

$$\varphi_{12}(\xi_1, \omega) = \int d\xi_2 \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{dz'}{2\pi} \int\limits_0^{\infty} dz \alpha^2(z, \xi_1, \xi_2) F(z, \xi_1, \xi_2) \times \\ \times \left[\frac{\mathrm{th}\,\frac{z'}{2T} + \mathrm{cth}\,\frac{z}{2T}}{z' + z - \omega - i\delta} - \frac{\mathrm{th}\,\frac{z'}{2T} - \mathrm{cth}\,\frac{z}{2T}}{z' - z - \omega - i\delta} \right] \times \\ \times \mathrm{Im}\, g_{14}[\xi_1(\xi_2), \xi_2, z'], \tag{3}$$

где спектральная функция ЭФ-взаимодействия

$$\alpha^2(z, \xi_1, \xi_2) F(z, \xi_1, \xi_2) =$$

$$
= \frac{\int\limits_{S(\xi_1)} \frac{d^2\mathbf{p}}{v_{\mathbf{p}}} \int\limits_{S(\xi_2)} \frac{d^2\mathbf{p}'}{v_{\mathbf{p}'}} \sum_j |g_j(\mathbf{p},\mathbf{p}')|^2 \delta[z-\omega_0(\mathbf{q})]}{\int\limits_{S(\xi_1)} \frac{d^2\mathbf{p}}{v_{\mathbf{p}}} \int\limits_{S(\xi_2)} \frac{d^2\mathbf{p}'}{v_{\mathbf{p}'}}} N_2(\xi_2), \tag{4}
$$

$\xi_1 = \frac{p^2}{2m_1} - \mu$, $\xi_2 = \frac{p^2}{2m_2} + \Delta - \mu$, Δ – энергетический сдвиг нижних границ двух зон друг относительно друга, g_j – матричный элемент ЭФ-взаимодействия, $\xi_2 = E_2 - \mu$ – энергия, отсчитанная от поверхности Ферми во второй зоне, $\int\limits_S \frac{d^2\mathbf{p}'}{v_{\mathbf{p}'}}$ – интеграл по поверхности постоянной энергии $\xi_2 = \mathrm{const}$, которая не обязана совпадать с поверхностью Ферми, $v_{\mathbf{p}}$ – скорость электрона на этой поверхности. Таким образом, несмотря на весьма общий характер полученных формул, расчеты мы будем проводить для зон, центрированных в одной точке импульсного пространства и сдвинутых на энергетическое расстояние Δ друг относительно друга. Такая ситуация, в частности, имеет место в пниктидах [14], где константа межзонного ЭФ-взаимодействия параметров порядка предположительно невелика [6–8]. Последняя никак не совпадает с константой ЭФ-спаривания носителей из двух зон, фактически используемой в настоящей работе. При малых частотах $\mathrm{Im}\,\varphi_{12} \ll \mathrm{Re}\,\varphi_{12}$. Если считать слабой зависимость от ξ величины g, а следовательно, $\varphi_{12}(\xi, z)$ и g_{14} и положить $Z_1 = Z_2 = 1$, то для $\mathrm{Re}\,\varphi_{12}$ получим

$$
\mathrm{Re}\,\phi_{12}(\xi_1,\omega) = -\int d\xi_2 \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{dz'}{2} \times
$$
$$
\times \int\limits_0^{\infty} dz(\alpha^2 F) \left[\frac{\mathrm{th}\,\frac{z'}{2T} + \mathrm{cth}\,\frac{z}{2T}}{z'+z-\omega} - \frac{\mathrm{th}\,\frac{z'}{2T} - \mathrm{cth}\,\frac{z}{2T}}{z'-z-\omega} \right] \times
$$
$$
\times\, \mathrm{Re}\,\phi_{12}[\xi_1(\xi_2),\xi_2,z'] \times
$$
$$
\times \left\{ \delta[z'-\xi_1(\xi_2)] \frac{P}{z'+\xi_2} + \delta(z'+\xi_2) \frac{P}{z'-\xi_1(\xi_2)} \right\}. \tag{5}
$$

Видно, что уравнение для параметра порядка $\phi_{12}(\xi_1, \omega)$ содержит в правой части два интеграла от параметра порядка с различными ядрами в отличие от обычной однозонной ситуации [2–4, 18]), когда параметр порядка удовлетворяет интегральному уравнению с одним ядром. Одно интегральное выражение отвечает ЭФ-перенормировке параметра порядка за счет взаимодействия с фононами электрона из первой зоны, входящего в пару, а другое – за счет взаимодействия с фононами электрона из другой зоны, входящего в пару. Полагая, как было сказано выше, зависимость φ_{12} от ξ и z слабой, можно вынести $\mathrm{Re}\,\varphi_{12}$ из-под знака интеграла в правой части (5). Выполним интегрирование по dz, используя эйнштейновскую модель фононного спектра с безразмерной константой электрон-фононного взаимодействия $\lambda = 2\int\{\alpha^2(z)F(z)/z\}dz$. При этом будем записывать спектральную функцию ЭФ-взаимодействия следующим образом: $\alpha^2 F(z) \approx \lambda\omega_0\delta(z-\omega_0)/2$. Тогда уравнение для определения T_c примет вид

$$
1 + \frac{\lambda\omega_0}{2} \int d\xi_2 \times
$$
$$
\times \int\limits_{-\infty}^{\infty} dz' \left[\frac{\mathrm{th}\,\frac{z'}{2T} + \mathrm{cth}\,\frac{\omega_0}{2T}}{z'+\omega_0-\omega} - \frac{\mathrm{th}\,\frac{z'}{2T} - \mathrm{cth}\,\frac{\omega_0}{2T}}{z'-\omega_0-\omega} \right] \times
$$
$$
\times \left\{ \delta[z'-\xi_1(\xi_2)] \frac{P}{z'+\xi_2} + \delta(z'+\xi_2) \frac{P}{z'-\xi_1(\xi_2)} \right\} = 0. \tag{6}
$$

Будем считать частоту ω малой по сравнению с ω_0 и разобьем интеграл в (6) на два интеграла. Так как $\xi_1(\xi_2)$ имеет вид $\xi_1(\xi_2) = \frac{m_2}{m_1}\left[\xi_2 - \mu\left(\frac{m_1}{m_2} - 1\right) - \Delta\right]$, имеем $\delta[z' - \xi_1(\xi_2)] = \frac{m_1}{m_2}\delta\left[\xi_2 - \mu\left(\frac{m_1}{m_2} - 1\right) - \Delta - z'\frac{m_1}{m_2}\right]$. Выполнив интегрирование по $d\xi_2$, получим первый интеграл, вытекающий из (6):

$$
\frac{\lambda\omega_0}{2} \frac{m_1}{m_1+m_2} \times
$$
$$
\times \int\limits_{\xi_{1\,\min}}^{\xi_{1\,\max}} dz' \left[\frac{\mathrm{th}\,\frac{z'}{2T} + \mathrm{cth}\,\frac{\omega_0}{2T}}{z'+\omega_0} - \frac{\mathrm{th}\,\frac{z'}{2T} - \mathrm{cth}\,\frac{\omega_0}{2T}}{z'-\omega_0} \right] \times
$$
$$
\times \frac{1}{z' + \mu\frac{m_1-m_2}{m_1+m_2} + \Delta\frac{m_2}{m_1+m_2}}. \tag{7}
$$

Во втором интеграле интегрирование по $d\xi_2$ с $\delta(\xi_2 + z')$ с учетом того, что $z' - \xi_1(-z') = \frac{m_1+m_2}{m_2}\left(z' + \mu\frac{m_1-m_2}{m_1+m_2} + \Delta\frac{m_2}{m_1+m_2}\right)$, дает такое же выражение (7), но с другими пределами в интеграле по dz'. Выясним, чему равны эти пределы в 1-м и 2-м интегралах. В принятой нами модели в случае сильной ЭФ-связи спаривание электронов из двух зон происходит не вблизи поверхности Ферми, а по всей глубине этих зон (рис. 1 и 2). Осуществить спаривание в двухзонном случае вблизи поверхности Ферми трудно ввиду необходимости соблюдения условия равенства нулю суммарного импульса куперовской пары (рис. 2).

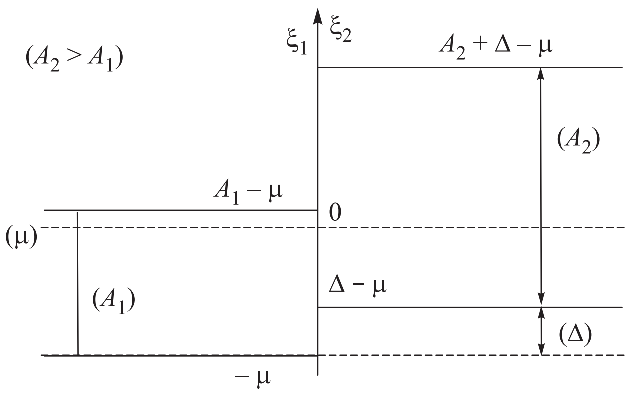

Рис. 1. Схема двух энергетических зон электронов: $\xi_{1(2)}$ – энергия электронов 1-й (2-й) зоны, отсчитанная от химического потенциала μ; $A_{1(2)}$ – ширина 1-й (2-й) зоны; Δ – расстояние (по энергии) между дном 2-й и 1-й зон

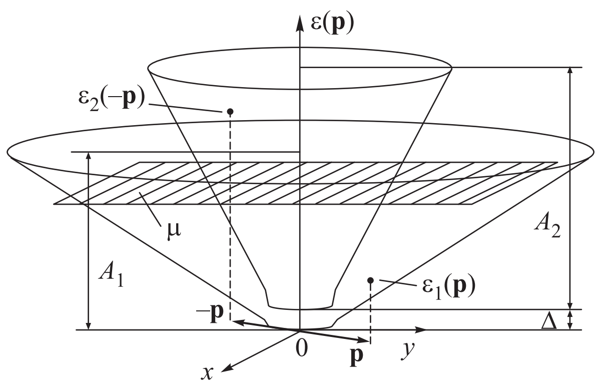

Рис. 2. Энергетические поверхности электронов 1-й и 2-й зон в импульсном пространстве. Рассмотрено спаривание электронов 1-й зоны с массой m_1 и импульсом $\mathbf{p}$ с электронами 2-й зоны с массой $m_2 < m_1$ и импульсом $\mathbf{p}$. Векторы $\mathbf{p}$ и $-\mathbf{p}$ лежат в одной плоскости (p_x, p_y), а соответствующие им энергии $\varepsilon_1(\mathbf{p})$ и $\varepsilon_2(\mathbf{p})$ принадлежат разным изоэнергетическим поверхностям

Последнее означает, что модули импульсов электронов 1-й и 2-й зон должны быть равны. В пространстве импульсов соответствующая область определяется неравенствами $0 \le p \le p_{\max} = \min(p_{1d}, p_{2d})$, где граничные импульсы связаны с ширинами зон A_1 и A_2 следующим образом: $p_{1d}^2 = 2m_1A_1$ и $p_{2d}^2 = 2m_2A_2$. Очевидно, что при $p_{\max} = p_{1d}$ для ξ_1 имеем $\xi_{1\max} = A_1 - \mu$, а для ξ_2 из (40) имеем $\xi_{2\max} = \frac{m_1}{m_2}A_1 + \Delta - \mu$. Аналогично при $p_{\max} = p_{2d}$ получаем $\xi_{2\max} = A_2 + \Delta - \mu$, а из (40) имеем $\xi_{1\max} = \frac{m_2}{m_1}A_2 - \mu$. Для обеих зон $p_{\min} = 0$, откуда $\xi_{1\min} = -\mu$, а $\xi_{2\min} = \Delta - \mu$. Пределы интегрирования в 1-м и 2-м интегралах определяются условиями $z' = \xi_1$ и $z' = -\xi_2$ соответственно. Пусть $\hat{A}_1$, $\hat{A}_2$, $\hat{\mu}$, $\hat{\Delta}$ – это величины A_1, A_2, μ, Δ, выраженные в единицах ω_0, $x = \frac{z'}{\omega_0}$, $k = \frac{m_2}{m_1}$, $x_0 = \hat{\mu}\frac{1-k}{1+k} + \hat{\Delta}\frac{k}{1+k}$, $a = \frac{\omega_0}{2T}$. Учтем, что $\frac{\operatorname{th}(ax)+\operatorname{cth} a}{x+1} - \frac{\operatorname{th}(ax)-\operatorname{cth}(ax)}{x-1} = -\frac{2}{x^2-1}(\operatorname{th}(ax) - x\operatorname{cth} a)$. Тогда из (7) получаем следующее уравнение для определения температуры перехода T_c в безразмерных переменных:

$$\frac{1+k}{\lambda} = \int\limits_{-\hat{\mu}}^{\min\{\hat{A}_1-\hat{\mu},\hat{A}_2k-\hat{\mu}\}} \frac{dx}{x+x_0}\frac{1}{x^2-1}[\operatorname{th}(ax) - x\operatorname{cth} a] + \int\limits_{\hat{\Delta}-\hat{\mu}}^{\min\{\hat{A}_2+\hat{\Delta}-\hat{\mu},\hat{A}_1/k+\hat{\Delta}-\hat{\mu}} \frac{dx}{x-x_0}\frac{1}{x^2-1}[\operatorname{th}(ax) - x\operatorname{cth} a]. \tag{8}$$

Будем полагать значения введенных параметров варьирующимися в интервалах $0.2 < k < 3$, $2 < \hat{A}_2 < 100$, $-20 < \hat{\Delta} < 20$, $1 < \hat{\mu} < 80$. Возьмем для расчета в конкретном примере следующие значения: $\hat{\mu} \approx A_2/2$, $\hat{\Delta} \approx 0.3\hat{\mu} = 0.15A_2$, $k \approx 0.5$, $A_2 = 10$, $A_1 = 5$. В таком случае параметр x_0 принимает значение $x_0 = \hat{\mu}\frac{1-k}{1+k} + \hat{\Delta}\frac{k}{1+k} = \frac{A_2}{3} + 0.15A_2\frac{1}{3} = \frac{A_2}{3}1.15 \approx 0.37A_2$. Считая, что A_1 велико, получаем для этого примера уравнение для T_c в случае спаривания электронов из двух зон, центрированных в одной точке импульсного пространства:

$$\frac{1.5}{\lambda} = \int\limits_{-0.5A_2}^{0} \frac{dx}{x+x_0}\frac{1}{x^2-1}[\operatorname{th}(ax) - x\operatorname{cth} a] + \int\limits_{0.35A_2}^{0.65A_2} \frac{dx}{x-x_0}\frac{1}{x^2-1}[\operatorname{th}(ax) - x\operatorname{cth} a]. \tag{9}$$

На рис. 3 изображены зависимости подынтегральных выражений в (9) от безразмерной переменной x. В случае, когда нули числителя и нули знаменателя не совпадают, т.е. при $x_0 \ne 0$, интегрирование по частоте x в уравнении для параметра порядка (9) не приводит к возрастанию интегралов в (9) из-за имеющихся в знаменателях ядер интегральных выражений особенностей. В таком случае при уменьшении межзонной константы ЭФ-связи λ левая часть (9) возрастает, в то время как правая остается ограниченной. Это означает, что при $x_0 \ne 0$ уравнение (9) не имеет решения при слабой ЭФ-связи ($\lambda \ll 1$). Решение уравнения для T_c для данного случая приведено на рис. 4. График не распространен на большие интервалы по оси T, поскольку решение уравнения для T_c при уменьшающихся константах межзонной ЭФ-связи λ в этом случае отсутствует.

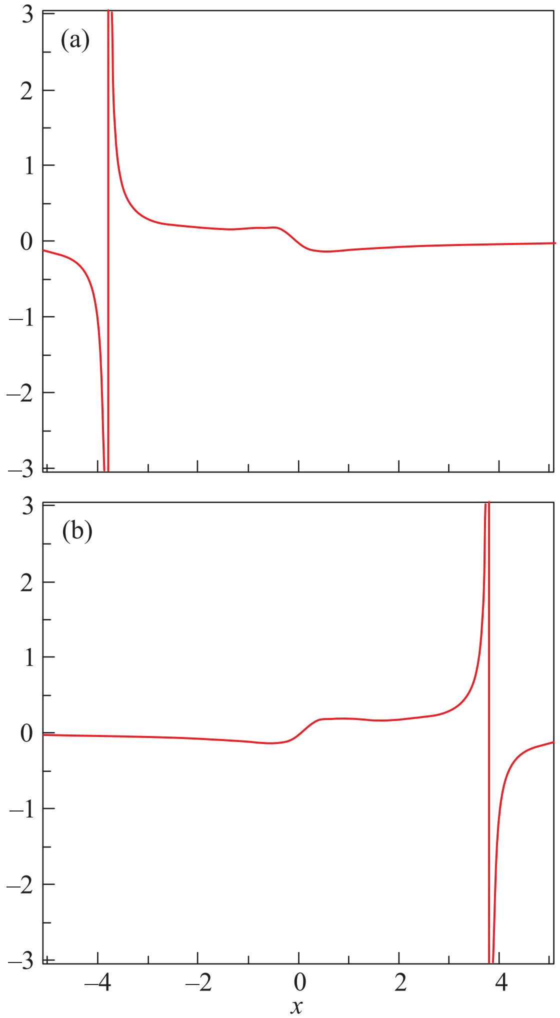

Рис. 3. Зависимости ядер двух интегральных выражений в правой части (41) при температуре $T = 0.15$ от частоты x. (a) – Ядро левого интегрального вклада. (b) – Ядро правого интегрального вклада. Частота x и температура T выражены в единицах дебаевской частоты ω_0

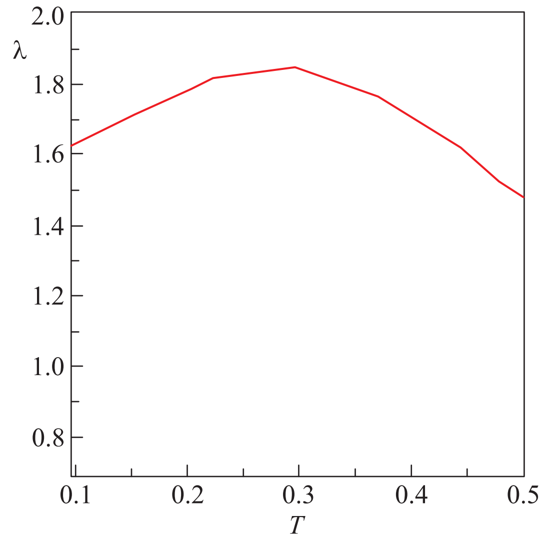

Рис. 4. Взаимозависимость T_c и межзонной константы ЭФ-связи электронов (дырок) из двух соседних зон в условиях параметров зон, приведенных в тексте

Как видно из рис. 4, при $\lambda \approx 1.8$ двухзонная ЭФ-система испытывает переход в сверхпроводящее состояние при $T_c \approx 0.25\omega_0$. При $\omega_0 \approx 600$ K температура перехода в сверхпроводящее состояние достигнет 150 K при $\lambda \approx 1.8$, в частности, при следующем вполне обычном и легко осуществимом на практике наборе параметров: химический потенциал лежит вблизи середины одной из зон; энергетический сдвиг центрированных в близких точках имульсного пространства двух зон составляет примерно 15 % от ширины первой зоны; в другой, вдвое более широкой зоне эффективная масса носителей вдвое меньше эффективной массы носителей в первой зоне. Неоднозначная зависимость температуры свехпроводящего перехода T_c от силы межзонной ЭФ-связи отражает весьма непростой эффект перераспределения ЭФ-вкладов, описывающих притяжение двух носителей, принадлежащих двум различным зонам с различными свойствами, либо их отталкивание в зависимости от силы межзонного взаимодействия носителей, в правой части двойного интегрального уравнения для комплексного межзонного параметра порядка (32), (33). Как известно, взаимодействие электронов посредством обмена фононами в зависимости от частоты запаздывающего потенциала электрон-фононного взаимодействия может носить как характер притяжения, так и характер отталкивания. Электрон-фононное взаимодействие приводит к притяжению лишь спустя конечный промежуток времени, равный обратному значению средней фононной частоты. В то же время кулоновское взаимодействие является строго мгновенным. Обычно (см., например, [18–21]) в уравнении для энергетической щели оставляют лишь слагаемые, отвечающие фононному притяжению и кулоновскому отталкиванию. В нашем же рассмотрении в правой части уравнения для энергетической щели (9) учтены как положительные вклады, отвечающие фононному притяжению, так и отрицательные вклады, отвечающие фононному отталкиванию двух электронов. Результирующее значение T_c определяется балансом этих двух вкладов разных знаков. Наличие двух интегралов в правой части (9) отвечает учету притяжения или отталкивания в паре электронов за счет испускания виртуальных фононов одним из двух электронов, находящимися в разных зонах. Структура обоих ядер уравнения для параметра порядка (9) такова, что при изменении температуры происходит немонотонное по частоте x перераспределение вкладов в обоих ядрах, отвечающих фононному притяжению или отталкиванию электронов в паре. Это и приводит к зависимости, отраженной на рис. 4. В случае $x_0 = 0$, что отвечает определенному балансу между химпотенциалом μ и энергетическим расстоянием между зонами Δ, а именно равенству $\Delta = (1-m_1/m_2)\mu$, уравнение (9) с учетом неравенства $\mathrm{th}(ax) \gg x\,\mathrm{cth}\,a$, справедливого при малых x, принимает вид

$$\frac{1+k}{\lambda} = \int\limits_{-\hat{\mu}}^{\min\{\hat{A}_1-\hat{\mu},\hat{A}_2k-\hat{\mu}\}} dx\frac{\mathrm{th}(ax)}{x}\frac{1}{1-x^2} + \int\limits_{\hat{\Delta}-\hat{\mu}}^{\min\{\hat{A}_2+\hat{\Delta}-\hat{\mu},\hat{A}_1/k+\hat{\Delta}-\hat{\mu}\}} dx\frac{\mathrm{th}(ax)}{x}\frac{1}{1-x^2}. \quad (10)$$

Поскольку подынтегральные выражения в (10) быстро уменьшаются, что является следствием поведения $\frac{\mathrm{th}(ax)}{x}$ в рассматриваемом случае, пренебрежем x^2 в $1-x^2$ и ограничим интегрирование по x единицей, т.е. значением дебаевской частоты, как это обычно и делается [18]. В результате получаем уравнение для T_c в следующем достаточно стандартном виде [18]:

$$\frac{1+k}{2\lambda} = K\left(\frac{\omega_\mathrm{D}}{2T_c}\right), \quad (11)$$

где $K(y) = \int\limits_0^y dx\frac{\mathrm{th}\,x}{x}$. Решение уравнения (11) хорошо известно [18]:

$$T_c = \frac{2\gamma}{\pi}\omega_\mathrm{D}\exp\left(-\frac{1+k}{2\lambda}\right). \quad (12)$$

Оно описывает ситуацию с обычной сверхпроводимостью в случае слабой связи, но с межзонным ЭФ-спариванием.

При подстановке величины $\omega_0 \approx 600$ К мы получили несколько завышенное значение $T_c \approx 150$ К, что связано с неучетом в наших расчетах кулоновского псевдопотенциала μ^*, а также с некоторым завышением значения T_c в модели Эйнштейна. Учет псевдопотенциала электрон-электронного взаимодействия, например с заменой λ на $\lambda-\mu^*$ в (12), приведет лишь к весьма незначительному изменению рассчитанной величины T_c.

В соединениях $\mathrm{Ba}_{1-x}\mathrm{K}_x\mathrm{Fe}_2\mathrm{As}_2$ структура зон в окрестности точки Γ зоны Бриллюэна вполне соответствует (см., например, [22, 23]) требованиям к энергетическому сдвигу зон и к отношению эффективных масс носителей в этих зонах, вытекающим из нашего рассмотрения. К сожалению, среди имеющихся к настоящему моменту железосодержащих материалов трудно найти вещество с высокими константами ЭФ-связи. Однако, как уже отмечалось, обычно измеряются константы ЭФ-связи в каждой из зон по отдельности, не имеющие отношения к константе межзонной ЭФ-связи. Таким образом, целенаправленно отбирая из материалов со структурой зон типа $\mathrm{Ba}_{1-x}\mathrm{K}_x\mathrm{Fe}_2\mathrm{As}_2$, материалы с высокой константой именно межзонной ЭФ-связи, мы ожидаем обнаружения предсказанного эффекта. Более того, можно ожидать, что при константах ЭФ-связи порядка единицы результирующий параметр порядка будет представлять собой квантовую интерференцию параметра порядка в одной из зон лишь с межзонным параметром порядка. Это следует из работы [24], в которой показано, что интерференция параметров порядка разных зон при больших константах ЭФ-связи подавлена.

Другой возможностью обнаружения эффекта является целенаправленное допирование $\mathrm{Ba}_{1-x}\mathrm{K}_x\mathrm{Fe}_2\mathrm{As}_2$ с целью прецизионного соблюдения условия $\Delta = (1-m_1/m_2)\mu$, при выполнении которого межзонная сверхпроводимость возникает уже при слабом межзонном ЭФ-взаимодействии. Авторы полагают, что в экспериментах с $\mathrm{Ba}_{1-x}\mathrm{K}_x\mathrm{Fe}_2\mathrm{As}_2$ это условие уже могло быть случайно соблюдено, однако соответствующая структура сверхпроводящих параметров порядка могла быть и не измерена (например, методом ARPES [25]).

Таким образом, нами получены уравнения для комплексного параметра порядка, представляющие собой обобщение теории Элиашберга на случай спаривания в рамках фононного (бозонного) механизма носителей, находящихся в двух различных зонах. Учтены ограничения на фазовый объем носителей из различных зон, образующих пару. Показано, что подбором параметров двух зон, носители из которых участвуют в спаривании, а именно подбором отношения эффективных масс носителей и энергетического сдвига зон, центрированных в близких точках импульсного пространства, а также подбором ширин зон и положения химического потенциала можно добиться резкого повышения температуры сверхпроводящего перехода при константах межзонного ЭФ-взаимодействия порядка единицы. Интегральное уравнение для параметра порядка $\phi_{12}(\xi_1,\omega)$ содержит в правой части два интеграла от параметра порядка с различными ядрами, в отличие от обычной однозонной ситуации [4–6, 15]. Полученные уравнения для параметра порядка описывают его перенормировку за счет взаимодействия с фононами двух разных электронов (дырок) из различных зон, входящих в пару. Наши результаты говорят о высокой эффективности спаривания в двухзонных материалах со спариванием электронов, находящихся в соседних зонах, центрированных в близких точках импульсного пространства, при определенных соотношениях параметров этих зон. В случае пниктидов константа соответствующей межзонной ЭФ-связи в экспериментах до настоящего момента не определена. Не превышающая единицы константа межзонной связи λ_{12}, фигурирующая в обычных двухзонных расчетах, в которых рассматривается интерференция параметров порядка обеих зон [6, 15, 16], не тождественна эффективности межзонного спаривания, фигурирующей в настоящей работе. В случае измерения или расчета в пниктидах константы ЭФ-связи носителей из двух зон, центрированных в одной точке обратного пространства, можно сделать вывод о значимости в них подобного высокотемпературного механизма. Эксперименты по рассеянию нейтронов приводят к убедительным свидетельствам [26] изменения знака сверхпроводящей щели (параметра порядка) $\Delta(k)$ на различных участках поверхности Ферми железосодержащих сверхпроводников, что именуется эффектом $s^{\pm}$. Указанный эффект отвечает межзонному спариванию. Однако для того чтобы в этой ситуации различить две возможности, в виде интерферирующих параметров порядка различных зон либо в виде сосуществования параметра порядка в одной из зон с межзонным параметром порядка, требуется отдельное исследование.

Наряду с межзонным спариванием, рассмотренным в настоящей работе, более общий вариант теории Элиашберга должен включать бозонное спаривание носителей в пределах каждой из зон, а также известные процессы, связанные с квантовым переходом пар носителей из одной зоны в другую [1, 6, 16, 17]). Таким образом, параметр порядка двухзонной системы должен представлять собой квантовую суперпозицию параметров порядка каждой из зон, Δ_{11} и Δ_{12}, а также межзонного параметра порядка Δ_{12}. Из настоящей работы следует вывод о существовании еще одного семейства высокотемпературных материалов с температурой T_c сверхпроводящего перехода, не уступающей T_c в купратах.

1. D. Daghero, M. Tortello, G. A. Ummarino, and R. S. Gonnelli, Rep. Prog. Phys. **74**, 124509 (2011). Y. Kamihara, T. Watanabe, M. Hirano, and H. Hosono, J. Am. Chem. Soc. **130**, 3296 (2008).
2. X. J. Zhou, T. Cuk, T. Devereaux, and N. Nagaosa, *Handbook of High-Temperature Superconductivity: Theory and Experiment*, ed. by J. R. Schrieffer, Springer (2007), p. 87; F. Marsiglio and J. P. Carbotte, *Superconductivity: Conventional and Unconventional Superconductors*, v. 1, ed. by K. H. Bennemann and J. B. Ketterson, Springer, Berlin-Heidelberg (2008), p. 73.
3. V. Z. Kresin and S. A. Wolf, Rev. Mod. Phys. **81**, 481 (2009).
4. Г. М. Элиашберг, ЖЭТФ **38**, 966 (1960).
5. А. С. Александров, Е. А. Мазур, ЖЭТФ **96**, 1773 (1989) [Sov. Phys. JETP **69**, 1001 (1989)].
6. O. V. Dolgov, I. I. Mazin, D. Parker, and A. A. Golubov, Phys. Rev. B **79**, 060502 (2009).
7. H. Takahashi, H. Soeda, M. Nukii, C. Kawashima, T. Nakanishi, S. Iimura, Y. Muraba, S. Matsuishi, and H. Hosono, Nature **453**, 376 (2008).
8. T. Mizokawa, J. Supercond. Nov. Magn. **24**, 1133 (2011).
9. А. С. Александров, В. Н. Гребенев, Е. А. Мазур, Письма в ЖЭТФ **45**, 357 (1987).
10. E. A.Mazur, Europhys. Lett. **90**, 47005 (2010).
11. E. A. Mazur, Europhys. Lett. **90**, 69901 (2010).
12. Л. А. Корнеева, Е. А. Мазур, ЖЭТФ **142**, 358 (2012).
13. E. A. Mazur and Yu. Kagan, J. Supercond. Nov. Magn. **26**, 1163 (2013).
14. T. Yoshida, I. Nishi, A. Fujimori, M. Yi, R. G. Moore, D.-H. Lu, Z.-X. Shen, K. Kihou, P. M. Shirage, H. Kito, C. H. Lee, A. Iyo, H. Eisaki, and H. Harima, J. Phys. Chem. Sol. **72**, 465 (2011).
15. А С. Мищенко, УФН **52**, 1193 (2009).
16. В. А. Москаленко, ФММ **8**, 503 (1959).
17. H. Suhl, B. T. Matthias, and L. R. Walker, Phys. Rev. Lett. **3**, 552 (1959).
18. С. В. Вонсовский, Ю. А. Изюмов, Э. З. Курмаев, *Сверхпроводимость переходных металлов, их сплавов и соединений*, Наука, М. (1977).
19. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, ГИФМЛ, М. (1962).
20. B. Mitrovic, Eur. Phys. J. B **38**, 451 (2004).
21. E. J. Nicol and J. P. Carbotte, Phys. Rev. B **71**, 054501 (2005).
22. P. Richard, T. Sato, K. Nakayama, T. Takahashi, and H. Ding, Rep. Prog. Phys. **74**, 124512 (2011).
23. X. Chen, P. Dai, D. Feng, T. Xiang, and F.-Ch. Zhang, Nat. Sci. Rev. **1**(3), 371 (2014).
24. O. V. Dolgov and A. A. Golubov, arXiv cond.mat.:0803.1103
25. T. Saito, S. Onari, Y. Yamakawa, H. Kontani, S. V. Borisenko, and V. B. Zabolotnyy, Phys. Rev. B **90**, 035102 (2014).
26. A. D. Christianson, E. A. Goremychkin, R. Osborn, S. Rosenkranz, M. D. Lumsden, C. D. Malliakas, I. S. Todorov, H. Claus, D. Y. Chung, M. G. Kanatzidis, R. I. Bewley, and T. Guidi, Nature **456**, 930 (2008).