

$$Q^{-1} = \frac{W_{\text{тр}}}{2\pi W_{\text{упр}}} = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{\gamma}{\gamma_0} - 1 \right). \quad (7)$$

Из рис. 4 работы [5] можно заключить, что

$$\gamma = \gamma_0 + \beta Q^{-1}. \quad (8)$$

Из (7) и (8) получаем: при $Q^{-1} \rightarrow 0$ $\gamma_s = \gamma_0$; где γ_0 можно назвать стартовым относительным сдвигом, $\gamma_0 G(T) = s_0$ — стартовое напряжение зернограничного сдвига.

Подставив s_0 в (3) вместо ϵ и варьируя σ_1 , можно определить значения μ и ρ , т. е. как коэффициент сухого трения, так и плотность сил адгезии на границах зерен поликристалла. По данным работы [5], в хорошо отожженном алюминии 99.999 %, $\gamma_0 \approx 10^{-11}$, $s_0 \approx 0.27$ Па. Столь низкие значения этих величин свидетельствуют о высокой степени совершенства использовавшихся в этой работе образцов. Примеси и дефекты должны приводить к значительному увеличению γ_0 и s_0 .

Л и т е р а т у р а

- [1] Лифшиц И. М. ЖЭТФ, 1963, т. 44, № 4, с. 1349—1367.
- [2] Ke T. S. Phys. Rev., 1947, vol. 72, N 6, p. 534.
- [3] Гарбер Р. И., Дранова Ж. И., Михайловский И. М. ЖЭТФ, 1968, т. 54, № 3, с. 714—720.
- [4] Ke T. S., Cui P., van S. C., Huang Q. Phys. St. Sol. (A), 1984, vol. 86, N 2, p. 593—601.
- [5] Iwasaki K. Phys. St. Sol. (A), 1986, vol. 94, N 2, p. 601—607.
- [6] Лифшиц Е. М. ДАН СССР, 1955, т. 97, № 4, с. 643—646.
- [7] Лифшиц Е. М. ДАН СССР, 1955, т. 100, № 5, с. 879—881.
- [8] Неволин В. Н., Фазылов Ф. Р., Шермергор Т. Д. Поверхность, 1986, № 7, с. 76—81.
- [9] Гарбер Р. И., Дранова Ж. И., Михайловский И. М. ДАН СССР, 1967, т. 174, № 5, с. 1044—1047.
- [10] Бойко В. С., Гарбер Р. И., Кривенко Л. Ф. ФТТ, 1967, т. 9, № 2, с. 435—443.

Харьковский физико-технический
институт АН УССР
Харьков

Поступило в Редакцию
28 июля 1987 г.

УДК 537.312.62

Физика твердого тела, том 30, в. 9, 1988
Solid State Physics, vol. 30, № 9, 1988

ОТКЛИК ВАЛЕНТНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО СОЕДИНЕНИЯ Nb_3Ge НА ИОННЫЕ СМЕЩЕНИЯ

С. В. Столбов, М. Н. Рабинович

Взаимодействия, которые могут приводить к куперовскому спариванию в металлах, во многом определяются характером электронного отклика [1] (отклика на ионные смещения при электрон-фононном или поляронном механизмах сверхпроводимости). Это подтверждают эмпирические корреляции (см., например, [2]).

При объяснении экспериментальных данных и при расчетах обычно исходят из того, что основной вклад в электронную восприимчивость — характеристику отклика — вносят электронные состояния вблизи уровня Ферми E_F [3, 4]. Однако в соединениях переходных металлов более глубокие валентные d -состояния пространственно делокализованы (рис. 1). Поэтому именно они в основном должны обеспечивать отклик на ионные смещения. Ниже на примере соединения Nb_3Ge проверена эта гипотеза.

В работе исследована возможность полиронного эффекта, который в ряде статей (например, [3]) привлекается для объяснения свойств соединений А-15. Проверено предположение [6] о нелинейности отклика в этих веществах.

Поскольку для изучения последних двух эффектов неприменимы хорошо развитые линейные приближения [7], в настоящей работе непосредственное влияние ионных смещений на пространственное и энергетическое распределение электронных состояний соединения Nb₃Ge исследовано с помощью прямых кластерных расчетов. Для этого выполнены самосогласованные вычисления *T*-матрицы рассеяния в представлении номер узла—орбитальный момент в muffin-tin (MT) приближении [8].

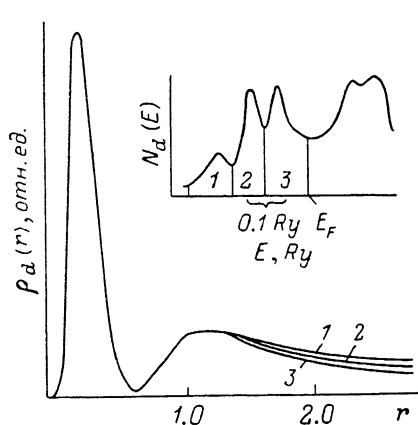


Рис. 1. Вклады электронных состояний различных энергетических интервалов валентной полосы Nb₃Ge в зарядовую *d*-плотность Nb.

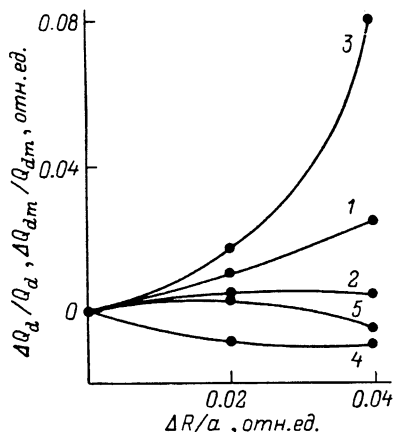


Рис. 2. Зависимости относительных изменений зарядов $\Delta Q_d/Q_d$ и $\Delta dm = \Delta Q_{dm}/Q_{dm}$ на атоме Nb от величины ΔR ионных *L*-смещений.

1 — $\Delta Q_d/Q_d$, 2 — $\Delta d\sigma$, 3 — $\Delta d\pi$, 4 — $\Delta d\delta_1$, 5 — $\Delta d\delta_2$.

T-матрица строилась для 49-атомного фрагмента соединения Nb₃Ge с центром на одном из атомов ниобия. Обменно-корреляционная часть кристаллического потенциала построена в соответствии с [9]. Методика расчета детально описана в [10].

Расчитаны равновесная и по две возмущенных конфигурации с поперечными *T* и продольными *L* смещениями атомов ниобиевой цепочки — характерного элемента структуры А-15: *T*-смещения — центральный атом сдвинут в направлении, перпендикулярном цепочке на величину ΔR ; ближайшие соседи сдвинуты в том же направлении на $0.5\Delta R$ ($\Delta R=0.01a$, $0.02a$; параметр решетки $a=5.160 \text{ \AA}$); *L*-смещения — ближайшие соседи сдвинуты к центральному атому на величину ΔR ; вторые соседи, принадлежащие той же цепочке, смещены к центру на $0.5\Delta R$ ($\Delta R=0.02a$, $0.04a$). Эти величины близки среднеквадратичным тепловым отклонениям атомов.

Для равновесной и сдвиговых конфигураций определены валентные парциальные зарядовые плотности $\rho_l(r)$ и их компоненты $\rho_{lm}(r)$ в разложении по кубическим гармоникам (*l* — орбитальный момент, *m* — его проекция), а также вычислены соответствующие заряды Q_l и Q_{lm} внутри MT сфер Nb радиуса $0.25a$. Определены вклады в эти характеристики электронных состояний трех энергетических интервалов, условно выделенных в занятой части полосы (рис. 1): $0.42\text{--}0.57 \text{ Ry}$ (1), $0.57\text{--}0.69 \text{ Ry}$ (2), $0.69\text{--}E_F$ (3).

Расчет дает значение $Q_d=2.590e$. Изменения ΔQ полного заряда в MT сфере Nb при ионных смещениях на 94—96 % определяются деформацией плотности *d*-электронов. Вклады в ΔQ_d состояний из различных энергетических интервалов при *L*-сдвиге с $\Delta R=0.02a$ таковы: интервал 1 — $0.01e$, 2 — $0.024e$, 3 — $(-0.016e)$.

Из рис. 2 следует, что при нелинейных зависимостях от ΔR компонентов Q_{lm} заряда полный отклик валентных d -электронов Nb практически линеен. Ширины пиков плотности $N(E)$ электронных состояний не меняются при переходе от равновесной конфигурации к сдвиговым. Происходит лишь небольшое перераспределение интенсивностей пиков.

Анализ результатов настоящей работы позволяет сделать следующие выводы.

1. Основной вклад в электронный отклик на ионные смещения в Nb_3Ge вносят глубокие валентные d -состояния Nb. Величина $N(E_F)$ не определяет характера отклика. Эта особенность должна быть присуща и другим типам соединений d -металлов, так как она связана с характерной для этих объектов энергетической зависимостью пространственного распределения электронных состояний.

Приближение состава сплавов Nb—Ge к стехиометрическому Nb_3Ge сопровождается ростом критической температуры и смягчением фононного спектра [11]. При этом $N(E_F)$ практически не меняется [12]. Эти данные подтверждают вывод о независимости электронного отклика (а значит, и электронного вклада в динамику решетки, т. е. вида фононного спектра) от $N(E_F)$.

2. Ближайшее расстояние между атомами Nb в структуре A-15 необычно мало. В такой системе электрон-электронные взаимодействия приводят к пространственной локализации направленных на соседние атомы d -состояний и вытесняют их к E_F . Поэтому наиболее делокализованными среди d -состояний Nb оказываются $d\pi$ -состояния. Они в основном и обеспечивают отклик валентных электронов на ионные смещения.

3. Отклик валентных электронов Nb_3Ge практически линеен по величинам ионных смещений при $\Delta R \leq 0.04a$ (кривая 1 на рис. 2).

4. Смещения ионов Nb не вызывают локализации электронных состояний соединения Nb_3Ge . Поляризация решетки в такой системе должна сильно экранироваться валентными электронами, что делает маловероятным поляронный эффект.

Авторы благодарны Е. Г. Максимову за полезные обсуждения результатов работы.

Л и т е р а т у р а

- [1] Проблема высокотемпературной сверхпроводимости / Под ред. В. Л. Гинзбурга и Д. А. Киржвица. М.: Наука, 1977. 400 с.
- [2] Кодесс Б. Н., Коркин И. В., Столбов С. В., Никифоров И. Я. ЖЭТФ, 1982, т. 82, № 6, с. 1924—1935.
- [3] Gomersall J. R., Gyorffy B. L. Phys. Rev. Lett., 1974, vol. 33, N 24, p. 1286—1290.
- [4] Weber W. Physica, 1984, vol. 126 B, N 1—3, p. 217—228.
- [5] Александров А. С., Елесин В. Ф. Изв. АН СССР. Сер. физ., 1985, т. 49, № 2, с. 326—347.
- [6] Yu C., Anderson P. W. Phys. Rev. B, 1984, vol. 29, N 11, p. 6165—6186.
- [7] Winter H. J. Phys. F, 1981, vol. 11, N 11, p. 2283—2296.
- [8] Эренрайх Г., Шеарц Л. Электронная структура сплавов. М.: Мнр, 1979. 200 с.
- [9] Hedin L., Lundquist B. I. J. Phys. C, 1971, vol. 4, N 14, p. 2064—2083.
- [10] Столбов С. В., Рабинович М. Н. ФТТ, 1987, т. 29, № 8, с. 2550—2552.
- [11] Geballe T. H. In: Adv. Supercond. Proc. NATO. Adv. Study In. St. Erice, July 3—15, 1982. N. Y., L., 1983, p. 387—431.
- [12] Головашкин А. И., Печень Е. В., Шелехов А. Л. ЖЭТФ, 1986, т. 90, № 2, с. 686—696.

Поступило в Редакцию
9 ноября 1987 г.

Ростовский-на-Дону
государственный университет НИИФ
Ростов-на-Дону