

УДК 536.764+539.89

ЗАВИСИМОСТЬ ТЕМПЕРАТУРЫ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В КВАЗИОДНОМЕРНЫХ ПРОВОДНИКАХ ОТ КОНЦЕНТРАЦИИ ДЕФЕКТОВ И ДАВЛЕНИЯ

А. Л. Чугреев, И. А. Мисуркин

Задача о фазовых переходах квазиодномерных кристаллов, стопки молекул в которых всегда разбиты дефектами на фрагменты конечной длины, сведена к решеточным моделям Изинга и XY-модели. Оценена критическая температура перехода кристаллов $(TMTSF)_2X$ в антиферромагнитное и сверхпроводящее состояние и обсуждена ее зависимость от давления и концентрации дефектов.

Необычные физические свойства квазиодномерных донорно-акцепторных кристаллов и, в частности, солей Бечгарда $(TMTSF)_2X$ в течение длительного времени привлекают внимание исследователей [1, 2]. Эти материалы характеризуются сильной анизотропией физических свойств, поскольку состоят из цепочек (или стопок) молекул, причем взаимодействие между ближайшими молекулами в стопке гораздо сильнее, чем между молекулами разных стопок. Квазиодномерная структура этих материалов позволяет объяснить некоторые их свойства, рассматривая решения одномерных моделей для отдельных стопок. Однако в рамках одномерных моделей невозможно объяснить существование различных типов упорядоченных структур, обнаруженных при низких температурах в этих материалах [1, 2].

В ранних феноменологических теориях [3, 4] (см. также [5-8]) модели квазиодномерных систем строились на основе моделей длинных нитей (имеющих конечную макроскопическую толщину [3]), связанных резонансным взаимодействием. Как отмечено в [3, 4], в одномерной системе флуктуации фазы параметра порядка разрушают дальний порядок, но ближний порядок на некотором расстоянии r_c , зависящем от температуры, существует. С понижением температуры r_c растет, а вместе с ним растет и вероятность перескока электрона с нити на нить на длине r_c . Система становится трехмерной (или двумерной), и в ней происходит переход в упорядоченное состояние при тех температурах, когда вероятность перескока станет достаточно большой. В [3-7] была получена качественно правильная зависимость критической температуры перехода в упорядоченное состояние от величины резонансного взаимодействия между нитями: при обращении этого взаимодействия в нуль критическая температура тоже обращается в нуль. Однако в перечисленных теориях параметры электронной структуры и взаимодействия вводились феноменологически, что приводило только к качественному описанию экспериментальных ситуаций.

В последнее время появились работы, в которых в качестве одномерных объектов стали рассматривать стопки (цепочки) молекул, что позволило ввести в теорию параметры внутри- и межмолекулярного взаимодействия и сопоставлять с величинами этих параметров результаты экспериментальных исследований. В отличие от качественно простой картины феноменологического подхода с установлением одной фазы во всех взаимодействующую-

щих одномерных нитях при температурах, которые ниже температуры фазового перехода, в современных теориях информация о температуре фазовых переходов получается из особенностей различных корреляционных функций квазиодномерной системы с использованием методов теории возмущений (ТВ) и самосогласованного поля (ССП) и результатов точно решаемых моделей для одномерных систем. В [9] было показано, что для любого типа упорядочения решающее значение имеет резонансное взаимодействие (перескоки электронов) между молекулами соседних стопок. В настоящей работе мы рассмотрим только этот тип взаимодействия.

В методике СПП [10-14] резонансные взаимодействия внутри стопок и между стопками учитываются в одинаковой степени. Это приводит к картине сильно анизотропных двумерных или трехмерных зон. При этом оказывается [10, 13, 14], что температура фазового перехода T_c зависит от межстопочного (поперечного) резонансного параметра t_{\perp} (параметра перескока) следующим образом: $T_c \approx (1 - t_{\perp}/t_{\perp}^c)^{\alpha}$, $\alpha > 0$. Этот результат, очевидно, качественно неверен при малых t_{\perp} , поскольку предсказывает существование дальнего порядка в системе невзаимодействующих стопок при $t_{\perp} = 0$. На самом деле, как отмечалось выше, дальний порядок в системе одномерных стопок может установиться только за счет взаимодействия между ними, так как дальний порядок в одномерной системе при не-

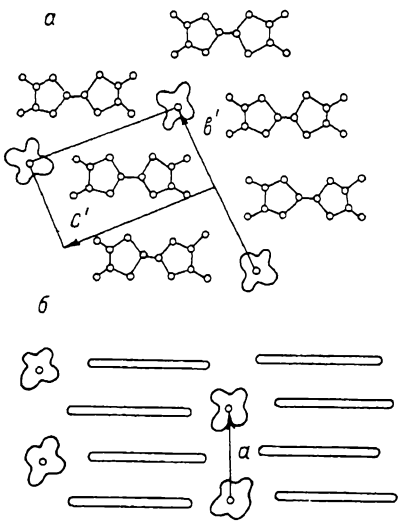


Рис. 1.

a — вид на структуру $(TMTSF)_2PF_6$ вдоль оси a ,
 b — вид на структуру $(TMTSF)_2PF_6$ вдоль оси b [20].

нулевой температуре невозможен [15]. Это значит, что метод СПП вообще неприменим для описания квазиодномерных систем при $t_{\perp} \rightarrow 0$, поскольку в этом пределе он переходит в метод СПП для одномерной бесконечной системы. Величина отношения поперечного параметра перескока t_{\perp} к продольному (внутристопочному) t_{\parallel} по разным оценкам составляет $t_{\perp}/t_{\parallel} = 0.01-0.1$ [1, 13, 16]. Это достаточно малая величина, что делает сомнительной применимость метода СПП в этом случае.

При использовании метода ТВ [17, 18] для исследования фазовых переходов обычно [9, 18, 19] получается качественно правильная зависимость критической температуры от t_{\perp} $T_c \rightarrow 0$ при $t_{\perp} \rightarrow 0$.

Необходимость учета дефектов кристаллической структуры, возникающих при синтезе кристаллов или при их облучении, приводит к дополнительным трудностям. Обычно дефекты различной природы учитываются в теории как случайные возмущения, приводящие к рассеянию электронов «вперед» или «назад». При этом получают качественные результаты, например, о подавлении диэлектрических и сверхпроводящих переходов с ростом концентрации рассеивающих «назад» примесей или при другом подходе с уменьшением длины свободного пробега [8]. Здесь по-прежнему сохраняются трудности с установлением связи наблюдаемых эффектов с молекулярной структурой кристаллов. Мы применим другой метод учета дефектов, который позволит нам попутно обойти трудности, связанные с использованием точных решений для бесконечных стопок при $T=0$ и учетом флуктуаций в них при $T \neq 0$.

Мы рассмотрим только такие дефекты структуры, возникающие при синтезе или облучении кристаллов, которые разрывают бесконечные стопки молекул на фрагменты конечной длины. Такие дефекты наиболее важны. Пусть их концентрация такова, что средняя длина фрагментов R меньше,

чем средняя длина участков $r_c(T)$ с ближним порядком при данной температуре T ($R < r_c(T)$). Тогда для температур $T < T^*(R)$ ($T^*(R)$ — температура, при которой $r_c(T) = R$) в каждом фрагменте будет существовать ближний порядок с одной фазой. Эту фазу мы введем как параметр вариационной функции, которая для разных типов упорядочения будет описывать электронную структуру фрагмента в приближении ССП. Таким образом, мы будем строить кристалл из разбитых на фрагменты бесконечных стопок, в которых нет дальнего порядка: внутрислопачные корреляторы будут убывать с радиусом корреляции R . Резонансное взаимодействие между фрагментами, которое мы учтем во втором порядке теории возмущений, будет причиной установления дальнего порядка как во всем образце, так и в отдельной стопке.

Рассмотрим кристаллы $(\text{TMTSF})_2\text{X}$, в которых плоские молекулы TMTSF (тетраметилтетраселенофульвален) образуют стопки (вдоль оси a),

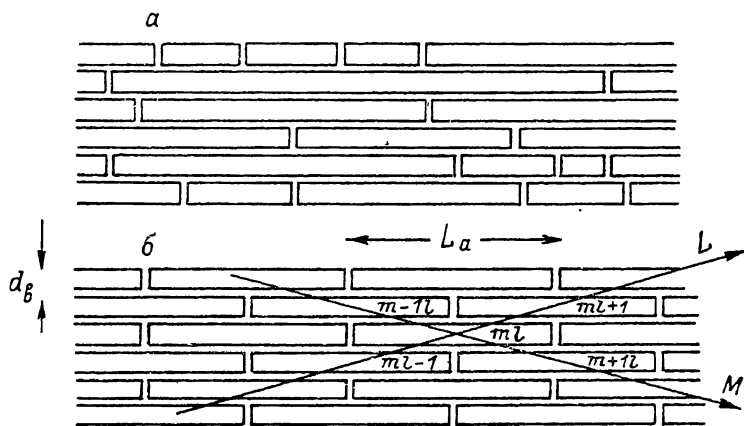


Рис. 2. Модель двумерного слоя из стопок димеров $(\text{TMTSF})_2^{\pm}$.

a — фрагменты конечной длины при беспорядочном распределении дефектов; b — регулярная решетка одинаковых фрагментов $(\text{TMTSF})_2^{\pm}$.

разделенные цепочками октаэдрических анионов $\text{X} = \text{PF}_6^-, \text{AsF}_6^-, \text{SbF}_6^-, \text{TaF}_6^-$, в направлении оси c (рис. 1, a). Вдоль оси b повторяются эквивалентные стопки TMTSF и цепочки X (рис. 1, b), так что в целом кристалл состоит из чередующихся параллельных слоев из стопок TMTSF и цепочек X . Внутри слоев стопки и цепочки одинаковых молекул расположены параллельно друг другу [20].

Поскольку взаимодействие между разными слоями молекул TMTSF слабо, мы, как это и принято [2, 20], рассмотрим один такой слой. Как мы уже говорили, дефекты кристаллической решетки разбивают стопку на фрагменты конечной длины. Поэтому слой молекул TMTSF можно представить состоящим из стопок, разбитых дефектами на отрезки — фрагменты различной длины (рис. 2, a). Средняя длина фрагмента определяется концентрацией дефектов. Мы предположим, что фрагменты имеют одинаковую длину, равную средней длине, и расположены в виде квадратной решетки так, что каждый фрагмент имеет четыре равноценных соседа (рис. 2, b). Такая идеальная модель позволит нам свести задачу к известным задачам на квадратной решетке. Свойства отдельного фрагмента — узла получившейся решетки — мы опишем в рамках приближения ССП. Мы предположим, что фрагмент состоит из $2N$ молекул TMTSF, сгруппированных попарно анионами X в N димеров $(\text{TMTSF})_2^{\pm}$. Отдельный фрагмент с номером (m, l) описывается гамильтонианом Хаббарда

$$H_{ml} = -t_{\parallel} \sum_{n\sigma} (c_{nml\sigma}^{\dagger} c_{n+1ml\sigma} + c_{n+1ml\sigma}^{\dagger} c_{nml\sigma}) + \frac{G}{2} \sum_{n\sigma} c_{nml-\sigma}^{\dagger} c_{nml-\sigma} + c_{nml\sigma}^{\dagger} c_{nml\sigma} \quad (1)$$

где $c_{nml\sigma}^+$ ($c_{nml\sigma}$) — оператор рождения (уничтожения) электрона с проекцией спина σ на n -м узле (димере (TMTSF) $_{\frac{1}{2}}$); t_{\parallel} — параметр перескока электронов между соседними димерами внутри фрагмента; G — параметр взаимодействия электронов, находящихся на одном димере. Каждый димер (TMTSF) $_{\frac{1}{2}}$ вносит в систему один электрон, который занимает разрыхляющую комбинацию $(\chi_1 - \chi_2)/\sqrt{2}$ верхних заполненных молекулярных орбиталей χ_1 и χ_2 двух молекул TMTSF $_1$ и TMTSF $_2$, входящих в димер. По этой причине параметры t_{\parallel} и G в цепочке димеров с одним электроном на димер в два раза меньше, чем соответствующие молекулярные параметры для молекул TMTSF [19, 21], т. е. $t_{\parallel} = 1500$ К, $G = 6000$ К. В неограниченном по спину приближении ССП [22] электронное строение фрагмента (m, l) представлено волновой функцией $\Phi(m, l)$, которая описывает состояние со спиновыми волнами на фрагменте (m, l)

$$\Phi(m, l) = \prod_{\substack{|k| < k_F \\ \sigma = \pm 1/2}} f_{kml\sigma}^+ |0\rangle,$$

$$f_{kml\sigma} = \cos \theta_k a_{kml\sigma} + 2\sigma S_{ml} \sin \theta_k a_{\bar{k}ml\sigma},$$

$$\sin 2\theta_k = \frac{\Delta}{\sqrt{4t_{\parallel}^2 \cos^2 k + \Delta^2}}, \quad \bar{k} = k + 2k_F, \quad k_F = \frac{\pi}{2},$$

$$a_{kml\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n \exp(-ikn) c_{nml\sigma}.$$

В одноэлектронном спектре каждого фрагмента имеется щель 2Δ . Фаза спиновой волны одного фрагмента определена неоднозначно и может принимать два значения: $S_{ml} = \pm 1$.

Полный гамильтониан системы (двумерного слоя) имеет вид

$$H = \sum_{ml} H_{ml} + H_I, \quad (2)$$

$$H_I = -t_{\perp} \sum_{ml} \sum_{n\bar{n}} (c_{nml\sigma}^+ c_{n+N/2m+1l\sigma} + c_{\bar{n}ml\sigma}^+ c_{\bar{n}+N/2m+1l\sigma}) + \text{с. с.},$$

где H_I — оператор перескока электронов между узлами, находящимися на соседних фрагментах. В отсутствие взаимодействия между фрагментами ($t_{\perp} = 0$) основное состояние системы

$$\Phi = \prod_{ml} \Phi(m, l). \quad (3)$$

Все состояния, отличающиеся распределением значений S_{ml} , имеют одинаковую энергию. Во втором порядке теории возмущений по оператору H_I это вырождение снимается, и мы получаем выражение для энергии системы как функцию от S_{ml} — фаз спиновых волн на фрагментах

$$E = \text{const} + \sum_{ml} \frac{t_{\perp}^2}{4} \sum_{|k| < k_F} \frac{\sin^2 2\theta_k}{\epsilon_{\bar{k}} - \epsilon_k} (S_{ml} S_{m+1l} + S_{ml} S_{ml+1}) =$$

$$= \text{const} + \mathcal{J} \sum_{ml} (S_{ml} S_{m+1l} + S_{ml} S_{ml+1}), \quad (4)$$

где ϵ_k и $\epsilon_{\bar{k}}$ — орбитальные энергии заполненной и вакантной молекулярных орбиталей фрагмента. Выражение (4) имеет вид гамильтониана модели Изинга на квадратной решетке, где роль переменных играют фазы спиновых волн на фрагментах. Здесь \mathcal{J} имеет вид

$$\mathcal{J} = \frac{t_{\perp}^2}{4} \sum_{|k| < k_F} \frac{\sin^2 2\theta_k}{\epsilon_{\bar{k}} - \epsilon_k} = \frac{N t_{\perp}^2 E(k)}{4\pi \sqrt{4t_{\parallel}^2 + \Delta^2}}, \quad k^2 = \frac{4t_{\parallel}^2}{4t_{\parallel}^2 + \Delta^2}, \quad (5)$$

где $E(k)$ — полный эллиптический интеграл второго рода. Величина $\mathcal{J} > 0$, так что минимальной энергией обладает состояние, у которого фазы спиновых волн на соседних взаимодействующих фрагментах противоположны. Особенностью этого состояния является то, что фазы спиновых волн во всех фрагментах одной стопки совпадают, а для соседних стопок фазы противоположны. Критическая температура T_c перехода в упорядоченное состояние, согласно Онзагеру [17, 23], определяется выражением

$$T_c = -\frac{2\mathcal{J}}{\ln(\sqrt{2}-1)} = 2.26\mathcal{J}. \quad (6)$$

Зависимость критической температуры от t_{\perp} при $t_{\perp} \rightarrow 0$ в нашем случае качественно правильная и совпадает с зависимостью [9]

$$T_c \approx t_{\parallel} (t_{\perp}/t_{\parallel})^{\delta} \quad \text{при } \delta=2 \text{ и } \Delta \ll t_{\parallel}.$$

Мы провели численные расчеты T_c при различных значениях параметра перескока t_{\perp} , которые выбирали между 30 и 300 К [8, 13, 18, 21]. Из формул (5) и (6) видно, что $T_c \approx Nt_{\perp}^2$, поэтому экспериментальные значения T_c могут быть воспроизведены при различных значениях N выбором t_{\perp} в указанном выше интервале. Экспериментальное значение $T_c=14$ К для $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ [24] можно получить, например, при $N=20$ и $t_{\perp}=100$ К. Оценим N по величине размера доменов $L_a \approx 200$ Å в направлении a (из эксперимента по размытию рентгеновских максимумов [25]) и данным по межмолекулярным расстояниям в стопке $d_a=3.65$ Å [1, 20]: $N=L_a/2d_a$, для $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$ в Q -состоянии получим $N=28$, и экспериментальное значение $T_c=14$ К получится при $t_{\perp}=84$ К.

Из формул (5) и (6) можно оценить зависимость температуры антиферромагнитного перехода от концентрации дефектов $c=50/N$ моль%: $dT_c/dc = -T_c/c$. При $N=28$ получаем $dT_c/dc = -8$ К/моль%. При $t_{\perp}=45$ К и $N=100$, что тоже отвечает $T_c=14$ К, получаем $dT_c/dc = -28$ К/моль%. Это сопоставимо с экспериментом: $dT_{SDW}/dc = -60 \pm \pm 30$ К/моль% [26].

В рамках предложенного подхода опишем зависимость T_c от давления p . По нашему мнению, форма зависимости $T_c(p)$ определяется сильной зависимостью t_{\parallel} от p и слабой зависимостью t_{\perp} от p ($dt_{\perp}/dp = 0.6$ К/кбар, согласно [7]). Это утверждение, на первый взгляд, противоречит экспериментальным данным [27] по зависимости анизотропии электропроводности в бечгардовских солях от давления. Действительно, согласно [27], отношение проводимостей $\sigma_{\parallel}/\sigma_{\perp} = (t_{\parallel}/t_{\perp})^2$ в интервале давления $p=0-24$ кбар меняется незначительно, тогда как подстановка в это соотношение наших значений t_{\parallel} и t_{\perp} (см. ниже) привела бы к сильному росту анизотропии проводимости. Заметим, однако, что в рамках нашей модели параметр перескока t_{\parallel} никакого отношения к продольной проводимости не имеет, поскольку представляет собой величину, определяющую поведение электрона внутри фрагмента, тогда как проводимость определяется перескоками между фрагментами. Анизотропия проводимости в этом случае определяется отношением коэффициентов диффузии в равных направлениях: $\sigma_{\parallel}/\sigma_{\perp} = D_{\parallel}/D_{\perp}$. Коэффициенты диффузии в свою очередь пропорциональны квадратам смещений электрона по разным направлениям при одном прыжке. За один прыжок по квадратной решетке фрагментов электрон смещается на $L_a/2 \approx 100$ Å [25] в направлении a и на $d_b \approx 7$ Å [1, 2] в направлении b . В результате имеем $\sigma_{\parallel}/\sigma_{\perp} = (L_a/2d_b)^2 = 200$, что хорошо согласуется с экспериментом [27]. Данные по анизотропии проводимости, следовательно, не противоречат наличию сильной зависимости t_{\parallel} от p .

Опираясь на представления о возрастании роли электрон-фононного взаимодействия с давлением и об уменьшении вследствие этого эффективного параметра межэлектронного взаимодействия G [1, 18, 27], предположим, что G линейно убывает с ростом давления p : $G=G_0-G'p$, где $G_0=$

= 6000 К. При $p = p_c = G_0/G'$ эффективный параметр электрон-электронного взаимодействия меняет знак. В результате на каждом фрагменте состояние со спиновой волной должно быть заменено «сверхпроводящим» состоянием. Как известно [28], основное состояние фрагмента (m, l) при $G < 0$ определяется с точностью до комплексной фазы $\exp(i\varphi)$ функций типа БКШ

$$\Phi_{ml} = \prod_k (u_k + \exp(i\varphi_{ml}) v_k a_{k/2}^+ a_{-k-1/2}^+) |0\rangle.$$

Применив к квадратной решетке из «сверхпроводящих» фрагментов тот же метод, что и к решетке «антиферромагнитных» фрагментов, получим поправку второго порядка ТВ к энергии системы как функцию фаз φ_{ml}

$$E = \text{const} - \mathcal{J} \sum_{ml} (\cos(\varphi_{ml} - \varphi_{m+1l}) + \cos(\varphi_{ml} - \varphi_{ml+1})). \quad (7)$$

Это выражение имеет вид гамильтониана двумерной классической X—Y-модели, где \mathcal{J} по-прежнему определено формулой (5). Легко видеть, что в основном состоянии разность фаз на соседних фрагментах равна нулю. Критическую температуру T_c X—Y-модели [29] мы примем за температуру сверхпроводящего перехода. Как было показано в [29, 30], T_c связана с \mathcal{J} из формулы (7) следующим соотношением

$$T_c = 0.92\mathcal{J}. \quad (8)$$

При $G/t_{\parallel} \ll 1$ из (5) получаем простую оценку для \mathcal{J}

$$\mathcal{J} = \frac{Nt_{\parallel}^2}{8\pi t_{\parallel}}, \quad (9)$$

что позволяет оценить T_c при $p > p_c$. Значение G' выберем так, чтобы воспроизвести экспериментальное значение p_c . По поводу этой величины в литературе существуют разногласия: в [1, 27] p_c для соединения $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ получено равным 9 кбар, а в [24] для того же вещества $p_c = 6$ кбар. Первому значению p_c отвечает $G' = 666$ К/кбар, а второму $G' = 1000$ К/кбар. Для t_{\parallel} мы рассмотрим два типа зависимости от давления: экспоненциальную $t_{\parallel} = t_{\parallel}^0 \exp(\alpha p)$ и линейную $t_{\parallel} = t_{\parallel}^0 + t'_{\parallel} p$. В приведенных формулах $t_{\parallel}^0 = 1500$ К, а α и t'_{\parallel} определим по величине критической температуры сверхпроводящего перехода $T_c(p_c)$. По формуле (8) можно оценить, что при $t_{\parallel} = t_{\parallel}^0 + t'_{\parallel} p$, $t_{\parallel}^0 = 100$ К и $t'_{\parallel} = 0.6$ К/кбар экспериментальное значение $T_c(p_c) = 1$ К [1, 2, 20] получается при $t_{\parallel}(p_c) = 8000$ К. Чтобы получить последнее значение при $p_c = 6$ кбар, необходимо выбрать $\alpha = 0.3$ кбар⁻¹ для экспоненциальной зависимости t_{\parallel} от p или $t'_{\parallel} = 1100$ К/кбар для линейной зависимости t_{\parallel} от p . В случае $p_c = 9$ кбар необходимо выбрать соответственно $\alpha = 0.2$ кбар⁻¹ или $t'_{\parallel} = 700$ К/кбар. С учетом (8) и (9) получаем, что с ростом p выше p_c температура сверхпроводящего перехода падает. При этом $(dT_c/dp)_{p=p_c} = -\alpha T_c$ для экспоненциальной зависимости t_{\parallel} и $(dT_c/dp)_{p=p_c} = -t'_{\parallel} T_c/t_{\parallel}(p_c)$ для линейной зависимости t_{\parallel} . При экспоненциальной зависимости t_{\parallel} от p получим $(dT_c/dp)_{p_c} = -0.24$ и -0.19 К/кбар при $p_c = 6$ кбар и 9 кбар соответственно, а при выборе линейной зависимости t_{\parallel} от p получим $(dT_c/dp)_{p_c} = -0.14$ и -0.04 К/кбар при $p_c = 6$ и 9 кбар соответственно. Эти оценки по порядку величины согласуются с экспериментальным значением $(dT_c/dp)_{\text{эксп}} = -(0.06 - 0.09)$ К/кбар [20]. Зависимости $T_c(p)$, полученные при различных параметризациях, приведены на рис. 3. Отметим, что некоторые особенности в поведении сверхпроводников $(\text{TMTSF})_2\text{X}$ [20], по-видимому, прямо связаны с особенностями, присущими классической X—Y-модели [29, 30].

Качественные соображения, лежащие в основе нашей модели, близки к рассмотренным в статьях [3, 4], но не совпадают с ними. Именно, как отмечено в [3], в одномерной системе (стопке молекул) флуктуации фазы параметра порядка разрушают дальний порядок, хотя ближний порядок на некотором расстоянии r_c существует. С понижением температуры r_c

растет и, как мы видели, увеличивается энергия взаимодействия между участками когерентности разных стопок ($\mathcal{J} \approx N$). Система из участков когерентности перейдет в упорядоченное состояние при тех температурах, когда энергия взаимодействия между участками-фрагментами (пропорциональная их длине) будет достаточно велика. В реальных квазиодномерных системах кроме температурного разрушения дальних корреляций есть еще одна причина для подавления дальнего порядка и возникновения фрагментов с ближним порядком — дефекты структуры, возникшие, например, при синтезе кристаллов. Если концентрация дефектов такова, что среднее расстояние между ними (длина фрагмента) $R < r_c(T)$, то наличием тепловых флуктуаций фазы внутри фрагмента можно пренебречь, что и было сделано в настоящей работе. Как мы отмечали выше, N не может быть очень большим ($N \approx R < r_c(T)$), а также очень малым ($N \geq 10-20$); последнее необходимо для применимости приближения ССП. В случае антиферромагнитного упорядочения наличие фрагментов приведет к представлению спиновой корреляционной функции в виде

$$\langle S_x(r) S_x(r') \rangle = (-1)^{n-n'} \frac{\Delta^2}{G^2} \langle S_{ml} S_{m'l'} \rangle,$$

где r и r' находятся во фрагментах (m, l) и (m', l') , а n и n' нумеруют димеры с ко-

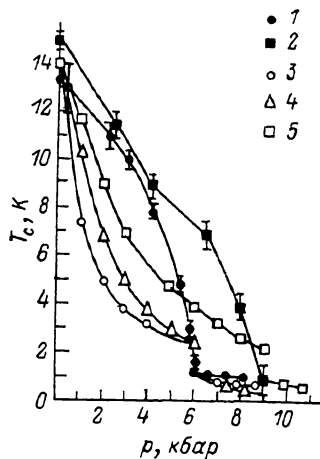


Рис. 3. Фазовая диаграмма (T, p) для $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ с антиферромагнитной ($T < T_c, p < p_c$) и сверхпроводящей ($T < T_c, p > p_c$) областями.

Показаны экспериментальные кривые $T_c(p)$ (1, $p_c = 6$ кбар [24], 2, $p_c = 9$ кбар [27]) и теоретические, полученные в настоящей работе с использованием линейной (3, $p_c = 6$ кбар) и экспоненциальной (4, $p_c = 6$ кбар и 5, $p_c = 9$ кбар) аппроксимации $t_{\parallel}(p)$ вместо неизвестной зависимости t_{\parallel} от p .

ординатами r и r' внутри фрагментов. В отсутствие межстопочного взаимодействия наличие дефектов в стопке приводит к тому, что перескоки электронов между соседними фрагментами в одной стопке запрещены. Это эквивалентно использованию внутрестопочных корреляционных функций, обращающихся в нуль, если пара координат, для которых они вычислены, относятся к разным фрагментам, т. е. $\langle S_{ml} S_{m'l'} \rangle = \delta_{mm'} \delta_{ll'}$. Тем самым мы удовлетворяем условию разрушения корреляций в одной стопке на достаточно больших расстояниях. Поскольку мы пренебрегали термическими флуктуациями внутри фрагментов, вся температурная зависимость корреляционных функций сосредоточивается в множителе $\langle S_{ml} S_{m'l'} \rangle$ (или $\langle \varphi_{ml} \varphi_{m'l'} \rangle$ для сверхпроводящего случая). Это позволяет отождествить критическую температуру квазиодномерной системы с критической температурой соответствующей двумерной модели, описывающей поведение коррелятора $\langle S_{ml} S_{m'l'} \rangle$ или $\langle \varphi_{ml} \varphi_{m'l'} \rangle$.

В нашей модели стопки разбиты на фрагменты одинаковой длины. В отличие от [3] каждый фрагмент является одной «макромолекулой» (а не пучком макромолекул, объединенных в участок тонкой нити как в [3]), а фаза упорядоченного состояния фрагмента является параметром волновой функции «макромолекулы» в приближении ССП (а не вводится феноменологически с помощью функционала Гинзбурга—Ландау, как в [3]).

Идея сведения задачи о квазиодномерной системе к модели Гейзенберга или Изинга или к $X-Y$ -модели с использованием ТВ второго порядка по параметру межцепочечного перескока была высказана в [16]. Вместо довольно абстрактной модели с сильным взаимодействием электронов на одном «узле» ($|U|/t_{\parallel} \gg 1$) [16] мы рассмотрели модель, в которой «узлом» является фрагмент стопки, естественно образующийся из-за

наличия дефектов. Здесь мы также конкретизировали представления о «сегментах», возникшие при обсуждении свойств $(\text{TMTSF})_2\text{X}$ с предположением о существовании созданных дефектами [31]: создание дефектов разрывает стопки на слабо связанные сегменты; с ростом числа дефектов проводимость все более обеспечивается прыжками между сегментами, а внутреннее строение сегментов становится все менее важным. Мы считаем, что определенная концентрация дефектов присутствует в образце до всяких внешних воздействий: дефекты возникают при синтезе материалов, облучение только увеличивает их концентрацию.

Из-за неодинаковости длин фрагментов мы должны были бы рассмотреть задачу Изинга (или $X-Y$ -модель) на нерегулярной решетке. Известно, что модель Изинга на решетке со случайным взаимодействием имеет фазовый переход [32], так что нашу регулярную модель можно рассматривать как первое приближение к задаче.

Л и т е р а т у р а

- [1] Jerome D., Schulz H. J. Adv. Phys., 1982, vol. 31, N 4, p. 299—490.
- [2] Горьков Л. П. Усп. физ. наук, 1984, т. 44, № 3, с. 381—413.
- [3] Ефетов К. Б., Ларкин А. И. ЖЭТФ, 1974, т. 66, № 6, с. 2290—2302.
- [4] Scalapino D. J., Imry Y., Pincus P. Phys. Rev. B, 1975, vol. 11, N 5, p. 2042—2048.
- [5] Stoeckly B., Scalapino D. J. Phys. Rev. B, 1975, vol. 11, N 1, p. 205—210.
- [6] Фирсов Ю. А., Яшин Т. Ю. ЖЭТФ, 1977, т. 72, № 4, с. 1450—1465.
- [7] Пригодин В. Н., Фирсов Ю. А. ЖЭТФ, 1979, т. 76, № 5, с. 1602—1619.
- [8] Firsov Yu. A., Prigodin V. N., Seidel Chr. Phys. Rep., 1985, vol. 126, N 5—6, p. 245—371.
- [9] Klemm R. A., Gutfreund H. Phys. Rev. B, 1976, vol. 14, N 3, p. 1086—1102.
- [10] Horowitz B., Gutfreund H., Weger M. Phys. Rev. B, 1975, vol. 12, N 8, p. 3174—3185.
- [11] Grant P. M. J. Phys., 1983, vol. 44, CN3, p. 847—857.
- [12] Jacobson C. S., Tanner D. B., Bechgaard K. Phys. Rev. Lett., 1981, vol. 46, N 17, p. 1142—1145.
- [13] Yamaji K. J. Phys. Soc. Japan, 1982, vol. 51, N 9, p. 2787—2797.
- [14] Сокол А. В. ЖЭТФ, 1987, т. 92, № 2, с. 756—765.
- [15] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика, ч. I, 3-е изд. М.: Наука, 1976. 584 с.
- [16] Emery V. J., Bruinsma R., Barisic S. Phys. Rev. Lett., 1982, vol. 48, N 15, p. 1039—1043.
- [17] Боголюбов Н. Н. Избранные труды в трех томах. Киев: Наукова думка, 1970, т. 2, 522 с.
- [18] Emery V. J. Phys. Rev. B, 1976, vol. 14, N 7, p. 2989—2994.
- [19] Brazovski S., Yakovenko V. J. Phys. Lett., 1985, vol. 46, N 2, p. L111—L116.
- [20] Буздин А. И., Булаевский Л. Н. Усп. физ. наук, 1984, т. 44, № 3, с. 415—437.
- [21] Ducas L., Abderrabba M., Hoarau J., Pesquer M., Gallois B., Gaultier J. J. Phys. C, 1986, vol. 19, N 20, p. 3805—3820.
- [22] Misurkin I. A., Ovchinnikov A. A. Mol. Phys., 1974, vol. 27, N 1, p. 237—245.
- [23] Onsager L. Phys. Rev., 1944, vol. 65, N 1, p. 117—118.
- [24] Azevedo L. J., Schirber J. E., Williams J. M., Beno M. A., Stephens D. R. Phys. Rev. B, 1984, vol. 30, N 3, p. 1570—1572.
- [25] Moret R., Pouget J. P., Comes R., Bechgaard K. J. Phys., 1985, vol. 46, N 9, p. 1521—1532.
- [26] Forro L. Mol. Cryst. Liq. Cryst., 1982, vol. 85, N 1, p. 315—323.
- [27] Jerome D. Chem. Scripta, 1981, vol. 17, N 1, p. 13—17.
- [28] Тимхам М. Введение в сверхпроводимость. М.: Атомиздат, 1980. 310 с.
- [29] Zittartz J. Z. Physik B, 1976, Bd 23, N 1, S. 55—62.
- [30] Zittartz J. Z. Physik B, 1976, Bd 23, N 1, S. 63—69.
- [31] Zuppiroli L., Jacobsen C. S., Bechgaard K. J. Phys., 1985, vol. 46, N 5, p. 799—805.
- [32] Kaneyoshi T. Sol. St. Commun., 1985, vol. 56, N 9, p. 791—793.

НИФХИ им. Л. Я. Карпова
Москва

Поступило в Редакцию
16 октября 1987 г.