

О МЕХАНИЗМЕ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ ПЛОСКОСТЕЙ ДВОЙНИКОВАНИЯ

И. М. Сулов

Решена задача о вычислении T_c сверхпроводника с плоским дефектом при довольно общих предположениях о последнем. Доказана эквивалентность сверхпроводящих свойств топологического дефекта типа плоскости двойникования и рассеивающего дефекта типа монослоя инородных атомов. Выведена система нелинейных уравнений локализованной сверхпроводимости. Показано, что наряду с феноменологической картиной Буздина — Булаевского [2] возможна принципиально другая картина, в корне меняющая интерпретацию экспериментальных данных Хайкина и Хлюстикова [1] и в отличие от первой приводящая к разумным значениям микроскопических параметров. Исследованы системы периодически расположенных плоских дефектов. Обсуждается возможность достижения в таких системах высоких T_c за счет ван-хововских особенностей в спектре двумерных таммовских зон.

1. Введение

Хайкин и Хлюстикова [1] обнаружили существование локализованной сверхпроводимости вблизи двойниковых границ в Sn при температуре на $\delta T_c = 0,04$ К выше температуры перехода $T_{co} \approx 3,7$ К объемного олова. Феноменологически это явление можно описать, предположив, что в слое шириной порядка межатомного расстояния a вблизи границы константа электрон-фононного взаимодействия λ повышается на величину $\delta\lambda$ по сравнению со своим объемным значением λ_0 [2]. Предполагая, что $T_c = T_{co} + \delta T_c$ определяется величиной λ , усредненной на масштабе $\xi(T_c) \sim \xi_0 (T_{co}/\delta T_c)^{1/2}$ (ξ_0 — длина когерентности), легко получить [2]

$$\frac{\delta T_c}{T_{co}} \sim \left(\frac{\delta\lambda}{\lambda_0^2} \frac{a}{\xi_0} \right)^2. \quad (1)$$

Подставляя для Sn значения $\delta T_c/T_{co} \sim 10^{-2}$, $a/\xi_0 \sim 10^{-3}$, $\lambda_0 \approx 0,3$, получаем, что изменение λ очень велико: $\delta\lambda/\lambda_0 \sim 30$. Этот вывод отчасти подтверждается экспериментально: в частицах малых размеров, содержащих плоскости двойникования, за счет подавления эффектов близости T_c удается поднять до 12 К [1].

Возникают естественные вопросы: действительно ли увеличение λ так велико, каков его механизм и возможно ли использование этого механизма для создания высокотемпературных сверхпроводников. Существующие публикации не дают ответа на эти вопросы. Предложенные в [3, 4] механизмы, основанные на изменении вблизи двойниковой границы фононных свойств, дают слишком малый эффект. В работе [5] рассмотрена возможность инициирования локализованной сверхпроводимости за счет сверхпроводящего перехода в двумерной таммовской зоне. При определенных соотношениях параметров постулированной двухзонной модели T_c оказывается близкой к температуре перехода двумерных электронов, вообще говоря, никак не связанной с T_{co} . Однако ввиду феноменологического характера используемых параметров остается неясным, насколько такая ситуация реальна с микроскопической точки зрения. Кроме того, вызывает возражения и сама модель работы [5]: при наличии отщепленной двумерной зоны волновые функции трехмерных электронов не могут быть плоскими волнами в силу аналитических свойств амплитуды рассеяния на

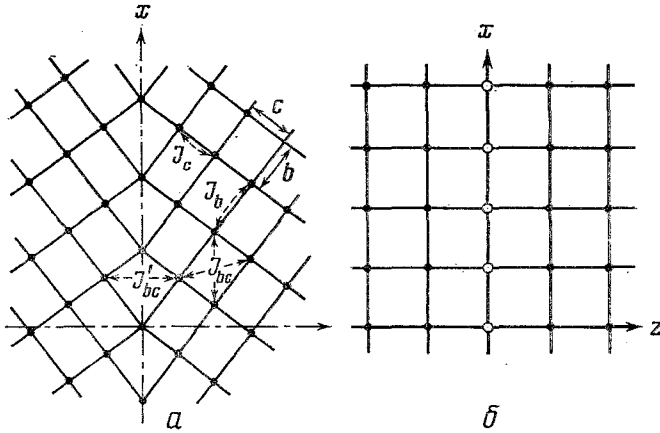


Рис. 1

плоском дефекте. Как выяснится ниже, при определенных условиях результатам работы [5] может быть дано микроскопическое обоснование. В работе [6] получен результат $\delta T_c \sim T_{c0}$ за счет изменения состояний непрерывного спектра без учета вклада таммовских уровней; этот результат, как мы увидим, ошибочен.

В настоящей работе предпринят последовательный микроскопический анализ, развивающий идеи заметок [7] и основанный на исследовании гамильтониана БКШ, обобщенного на случай пространственной неоднородности [8]:

$$\hat{H} = \int d\mathbf{r} \left\{ \hat{\Psi}_\alpha^+(\mathbf{r}) \hat{H}_0 \hat{\Psi}_\alpha(\mathbf{r}) - \frac{1}{2} V(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_\alpha^+(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_\beta^+(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_\beta(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_\alpha(\mathbf{r}) \right\},$$

$$\hat{H}_0 = \mathbf{p}^2/2m + U(\mathbf{r}), \quad (2)$$

где $U(\mathbf{r})$ — потенциал решетки с двойниковой границей, $V(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ — потенциал межэлектронного взаимодействия.

2. Качественная картина

Плоскость двойниковогоания (рис. 1, а) отличается от дефекта типа монослоя чужеродных атомов (рис. 1, б) топологическим свойством: при фиксированном выборе системы координат электронные спектры $\varepsilon_1(\mathbf{k})$ и $\varepsilon_2(\mathbf{k})$ справа и слева от нее различны, хотя и связаны некоторым преобразованием симметрии. Интересен вопрос: существенны ли топологические свойства плоскости двойниковогоания для эффектов, обнаруженных в [1]? В рамках гамильтониана (2) ответ на этот вопрос отрицательный; в частности, если существенные волновые функции электрона меняются достаточно медленно, то существует строгая теорема (см. разд. 4): каждой плоскости двойниковогоания можно сопоставить дефект типа рис. 1, б (будем называть его рассеивающим), который имеет неотличимые сверхпроводящие свойства. В этом разделе ограничимся более простым случаем рассеивающего дефекта, который считаем лежащим в плоскости $z=0$.

Ввиду трансляционной инвариантности в плоскости xy одноэлектронные волновые функции имеют вид

$$\Psi_n(\mathbf{r}) = S^{-1/2} \exp(ik_{\parallel} r_{\parallel}) \varphi_{s\hbar_{\parallel}}(z), \quad r_{\parallel} = (x, y), \quad k_{\parallel} = (k_x, k_y), \quad (3)$$

(s — поперечное квантовое число, S — площадь системы в плоскости xy), где функции $\varphi_{s\hbar_{\parallel}}(z)$ удовлетворяют одномерному уравнению Шредингера, описывающему цепочку с дефектом в начале координат. Спектр этого

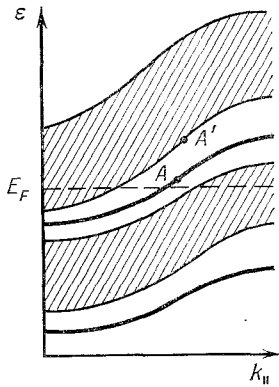


Рис. 2

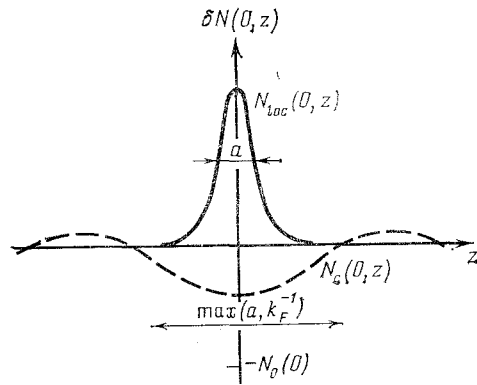


Рис. 3

уравнения есть совокупность зон, от каждой из которых отщеплен локальный уровень; с учетом продольного квазиимпульса $k_{||}$ локальные уровни становятся двумерными зонами и полный спектр имеет вид, показанный на рис. 2. Отщепление двумерных зон является основным эффектом, приводящим к существованию локализованной сверхпроводимости.

Естественным обобщением константы $\lambda = VN(0)$ на неоднородный случай является функция

$$\lambda(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r})N(0, \mathbf{r}), \quad (4)$$

где $N(\varepsilon)$ и $N(\varepsilon, \mathbf{r})$ — средняя и локальная плотности состояний:

$$N(\varepsilon) = \Omega^{-1} \sum_n \delta(\varepsilon - \varepsilon_n), \quad (5)$$

$$N(\varepsilon, \mathbf{r}) = \sum_n |\Psi_n(\mathbf{r})|^2 \delta(\varepsilon - \varepsilon_n) = \frac{1}{S} \sum_{k_{||}} \sum_s \delta(\varepsilon - \varepsilon_s(k_{||})) |\varphi_{s, k_{||}}(z)|^2 \quad (6)$$

(энергия отсчитывается от уровня Ферми, Ω — объем системы). В силу (3) $N(\varepsilon, \mathbf{r})$ зависит лишь от z и представляется в виде

$$N(\varepsilon, z) = N_0(\varepsilon) + N_{loc}(\varepsilon, z) + N_c(\varepsilon, z), \quad (7)$$

откуда при $V(\mathbf{r}) = \text{const}$ следует разбиение для $\lambda(z)$:

$$\lambda(z) = \lambda_0 + \lambda_{loc}(z) + \lambda_c(z) \equiv \lambda_0 + \delta\lambda(z), \quad (8)$$

Здесь $N_0(\varepsilon)$ — плотность состояний идеального кристалла, $N_c(\varepsilon, z)$ возникает из-за изменения состояний непрерывного спектра в сумме по s выражения (6), величина $N_{loc}(\varepsilon, z)$ связана с локальными уровнями: в случае одного уровня — это просто нулевой член суммы по s в (6):

$$N_{loc}(\varepsilon, z) = \frac{|\varphi_0(z)|^2}{S} \sum_{k_{||}} \delta(\varepsilon - \varepsilon_0(k_{||})) = N_{2D}(\varepsilon) |\varphi_0(z)|^2, \quad (9)$$

где $\varepsilon_0(k_{||})$ и $N_{2D}(\varepsilon)$ — спектр и плотность состояний отщепленной двумерной зоны (зависимость $\varphi_0(z)$ от $k_{||}$ пренебрегаем). Величина $N_{loc}(\varepsilon, z)$ положительна и приводит к локальному увеличению λ , однако она может компенсироваться величиной $N_c(\varepsilon, z)$ (рис. 3).

Двумерная зона конечной ширины с необходимостью имеет ван-хововские особенности $N_{2D}(\varepsilon) \propto \ln|\varepsilon - \varepsilon_0|$, которые могут резко увеличивать $N_{loc}(\varepsilon, z)$. Учитывая, что при вычислении T_c особенности обрезаются на масштабе дебаевской энергии ω_D (см. Приложение 1), получим оценку для

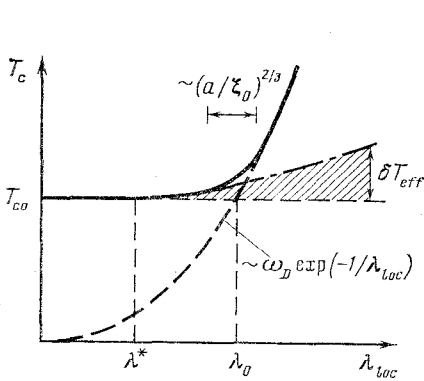


Рис. 4

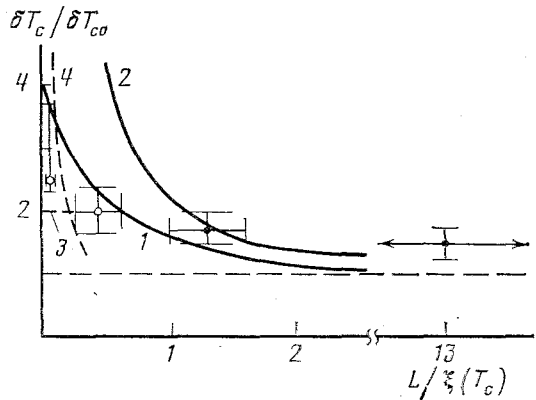


Рис. 5

Рис. 4. Зависимость температуры перехода T_c от параметра λ_{loc} , характеризующего амплитуду $\lambda_{loc}(z)$; λ^* — нижняя граница существования локализованной сверхпроводимости. Заштрихована область практического наблюдения локализованной сверхпроводимости

Рис. 5. Зависимость температурного интервала существования локализованной сверхпроводимости δT_c от расстояния L_0 между плоскостями двойникового (δT_{c0} — значение для уединенной плоскости): ● — экспериментальные точки для двух близко расположенных плоскостей; ○ — для образца с высокой концентрацией плоскостей двойникового. Согласно [2], темные точки должны лежать на кривой 1, светлые — на кривой 2. Согласно излагаемой теории, роль δT_c играет δT_{eff} , и принятая обработка эксперимента имеет смысл лишь при $L_0 \ll \xi(T_c)$ (раздел 7); при этом темные точки выходят на значение 2 (кривая 3), а светлые ложатся на зависимость $L_0^{-7/2}$ с неопределенным коэффициентом — кривая 4 (коэффициент выбран из условия наилучшего согласия с экспериментом)

максимального $\delta\lambda$:

$$(\delta\lambda)_{max}/\lambda_0 \sim m \ln(J/\omega_D), \quad (10)$$

где J — ширина зоны, m — число ван-хововских особенностей, которое может быть велико (в Sn уровень Ферми пересекает пять трехмерных зон, а следовательно, четыре двумерных, в каждой из которых имеется несколько ван-хововских особенностей). Учет $N_c(\epsilon, z)$ не меняет оценки (10), так как $-N_c(\epsilon, z) \leq N_0(\epsilon)$. В принципе отношение $\delta\lambda/\lambda_0$ может быть большим, однако значения ~ 30 представляются маловероятными.

Выход из этой трудности состоит в следующем. Оценка (1) основана на предположении, что сверхпроводящий параметр порядка $\Delta(z)$ медленно меняется вблизи дефекта, так что $\delta\lambda$ усредняется на масштабе $\xi(T)$. Если же $\Delta(z)$ имеет вблизи $z=0$ резкий пик, то окрестность дефекта входит при усреднении с большим весом и T_c оказывается больше, чем предсказывается формулой (1). Анализ показывает, что $\Delta(z)$ представляется в виде ¹⁾

$$\Delta(z) = \Delta_0(z) + \psi(z), \quad (11)$$

где функция $\Delta_0(z)$ локализована при $|z| \leq a$, $\psi(z)$ меняется на масштабе $\xi(T)$. При $\lambda_{loc} \ll \lambda_0$ (λ_{loc} характеризует амплитуду $\lambda_{loc}(z)$) величина пика мала, $\Delta_0(z) \ll \psi(0)$ и для T_c справедлива оценка (1); при $\lambda_{loc} \gg \lambda_0$ оказывается, что $\Delta_0(z) \sim \psi(0) \xi_0/a$, т. е. параметр порядка локализован на атомном расстоянии от дефекта, имея лишь небольшие «хвосты», распространяющиеся на расстояния $\sim \xi(T)$; при этом $\delta T_c \sim T_{c0}$ (рис. 4). Любопытно, что сильно локализованный режим возникает лишь в случае, когда увеличение λ связано с $N(0, \mathbf{r})$; если же оно связано с $V(\mathbf{r})$, а $N(0, \mathbf{r}) = \text{const}$, то оценка 1) справедлива вплоть до $\delta\lambda/\lambda_0 \sim \xi_0/a$, т. е. практически всегда.

¹⁾ Такое разбиение не тождественно принятому в [5] делению параметра порядка на «двумерный» и «трехмерный»; последние выступали в [5] как компоненты вектора, а не в виде суммы.

Согласно теории [2], для существования локализованной сверхпроводимости требуется положительность величины

$$a\delta\lambda = \int \delta\lambda(z) dz = \int [\lambda_{loc}(z) + \lambda_c(z)] dz, \quad (12)$$

которая при $V(\mathbf{r}) = \text{const}$ определяется изменением средней плотности состояний $N(0)$ и с равной вероятностью может иметь любой знак; например она положительна, если ван-хововская особенность A (рис. 2) в результате отщепления двумерной зоны оказывается ближе к уровню Ферми, чем она была в неотщепленном состоянии A' , и отрицательна в противоположном случае. Эксперимент же указывает на сдвиг вероятности в сторону существования локализованной сверхпроводимости: она обнаружена в пяти металлах из семи исследованных [4]. Согласно излагаемой теории, положительность величины (12) требуется лишь в случае слабо рассеивающего дефекта, когда радиус связанного состояния a велик и амплитуды $N_c(\epsilon, z)$ и $N_{loc}(\epsilon, z)$ малы (см. рис. 3). Для достаточно сильного дефекта ввиду малости a выполняется условие $\lambda_{loc} \gg \lambda_0$ ($N_{2D}(\epsilon)$ в (9) ограничена снизу величиной атомного порядка) и локализованная сверхпроводимость существует независимо от величины $\lambda_c(z)$: точка λ^* на рис. 5 зависит от $\lambda_c(z)$, но всегда меньше λ_0 .

При $\lambda_{loc} \gg \lambda_0$ функция $\Delta(z)$ локализована при $|z| \lesssim a$ и T_c является практически ненаблюдаемой (чувствительность магнитометра в [4] позволяет зарегистрировать идеальный диамагнетизм слоя толщиной $\gtrsim 10a$). Наблюдение локализованной сверхпроводимости возможно лишь в окрестности T_{co} : $T_{co} < T \lesssim T_{co} + \delta T_{eff}$, когда амплитуда $\psi(z)$ становится достаточно большой; при $\lambda_{loc} \gg \lambda_0$ (разд. 6)

$$\frac{\delta T_{eff}}{T_{co}} \sim \frac{T_c}{T_{co}} \frac{a}{\xi_0}. \quad (13)$$

Подставляя $\delta T_{eff}/T_{co} \sim 10^{-2}$, $a/\xi_0 \sim 10^{-3}$, получаем $T_c/T_{co} \sim 10$, что достигается при $\delta\lambda/\lambda_0 \sim 3$.

Для двух близко расположенных плоскостей двойникования величина a заменяется на $2a$ и температурный интервал существования локализованной сверхпроводимости расширяется в четыре раза, согласно (1), и в два раза, согласно (13). Для системы периодически расположенных на расстоянии $L_0 \ll \xi(T_c)$ плоскостей двойникования $\delta T_c \propto L_0^{-1}$, согласно [2], и $\delta T_{eff} \propto L_0^{-2}$, согласно разд. 7; истинная T_c при $\lambda_{loc} \gg \lambda_0$ практически не зависит от L_0 : с уменьшением L_0 улучшаются лишь условия ее наблюдения (растут критический ток, магнитный момент и т. д.). Таким образом, при $\lambda_{loc} \gg \lambda_0$ предсказания излагаемой теории отличны от предсказаний работы [2] уже на феноменологическом уровне, что можно использовать для ее экспериментальной проверки (рис. 5).

Из сказанного ясно, что для двойниковых границ в Sn отношение $\delta\lambda/\lambda_0$ составляет несколько единиц, тогда как, согласно (10), оно может быть значительно больше. Поэтому становится актуальным поиск дефектов с большими $\delta\lambda/\lambda_0$. Например, можно вводить в сверхпроводник монослой инородного материала и, меняя последний, регулировать положение ван-хововских особенностей. Создание таких структур возможно на современных установках; при этом в отличие от рассмотренных выше систем с двойниками концентрация плоских дефектов может быть сделана очень большой. Не исключено, что высокотемпературную сверхпроводимость оксидов [9] можно интерпретировать в рамках предложенной схемы, рассматривая плоскости Cu—O как плоские дефекты; в частности квазифазовый переход при $\lambda_{loc} \approx \lambda_0$ (см. рис. 4) можно использовать для интерпретации «сверхпроводящего взрыва» 1987 г. [7].

3. Исходные соотношения

Сформулируем в виде постулатов свойства плоских дефектов, которые будут использованы в дальнейшем (разд. 5—7); в рамках некоторых модельных предположений они будут обоснованы в разд. 4.

1. Предполагаем трансляционную инвариантность в плоскости xy , вследствие которой волновые функции записываются в виде (3); отличием блоховских функций идеального кристалла от плоских волн будем пренебрегать.

Уравнения сверхпроводимости для системы, описываемой гамильтонианом (2), имеют вид обычных уравнений Горькова [10], но входящая в них мацубаровская функция Грина $G_{\omega}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ нормального металла должна строиться по собственным функциям гамильтониана \hat{H}_0 ; ввиду разделения переменных она имеет вид

$$G_{\omega}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{S} \sum_{k_{\parallel}} \exp[ik_{\parallel}(r_{\parallel} - r'_{\parallel})] G_{\omega k_{\parallel}}(z, z'), \quad (14)$$

$$G_{\omega k_{\parallel}}(z, z') = \sum_s \frac{\varphi_{sk_{\parallel}}(z) \varphi_{sk_{\parallel}}^*(z')}{i\omega - \varepsilon_s(k_{\parallel})}.$$

Итерирруя уравнения Горькова, можно получить уравнение, содержащее в качестве неизвестной функции лишь сверхпроводящую щель $\Delta(\mathbf{r})$ [11]; с учетом одномерности геометрии задачи оно имеет вид

$$\Delta(z) = V(z) T \sum_{|\omega| < \omega_D} \int \frac{d^2 k_{\parallel}}{(2\pi)^2} \left\{ \int dz_1 G_{\omega k_{\parallel}}(z, z_1) \Delta(z_1) G_{-\omega k_{\parallel}}(z_1, z) - \right.$$

$$- \int dz_1 dz_2 dz_3 G_{\omega k_{\parallel}}(z, z_1) \Delta(z_1) G_{-\omega k_{\parallel}}(z_1, z_2) \Delta^*(z_2) G_{\omega k_{\parallel}}(z_2, z_3) \Delta(z_3) \cdot$$

$$\left. \cdot G_{-\omega k_{\parallel}}(z_3, z) + \dots \right\} \quad (15)$$

(n -й член ряда в правой части содержит $2n$ функций $G_{\omega k_{\parallel}}$ и $2n-1$ функций $\Delta(z)$ с общим коэффициентом $(-1)^{n+1}$).

2. Предполагаем наличие отщепленной двумерной зоны, так что одна из функций $\varphi_s(z)$ — для определенности с $s=0$ — локализована при $|z| \approx a$. Отделяя нулевой член в сумме по s в (14), получим разделение

$$G_{\omega k_{\parallel}}(z, z') = \bar{G}_{\omega k_{\parallel}}(z, z') + G_{\omega k_{\parallel}}^{loc}(z, z'), \quad G_{\omega k_{\parallel}}^{loc}(z, z') = \frac{\varphi_0(z) \varphi_0^*(z')}{i\omega - \varepsilon_0(k_{\parallel})}. \quad (16)$$

Пренебрегаем зависимостью $\varphi_0(z)$ от k_{\parallel} , что строго обосновано для спектра $\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon_1(k_{\parallel}) + \varepsilon_2(k_z)$.

3. Функция $\bar{G}_{\omega k_{\parallel}}(z, z')$ имеет порядок величины $1/v_F$, локализована по разности аргументов на масштабе $v_F/\omega \sim \xi_0$, а при $z, z' \gg \xi_0$ и $-z, -z' \gg \xi_0$ совпадает с функциями Грина $G_{\omega k_{\parallel}}^{(1)}(z-z')$ и $G_{\omega k_{\parallel}}^{(2)}(z-z')$ правой и левой половин кристалла.

4. Правую и левую части кристалла считаем либо одинаковыми, либо связанными зеркальной симметрией, так что функции $G_{\omega k_{\parallel}}^{(1)}(z-z')$ и $G_{\omega k_{\parallel}}^{(2)}(z-z')$ связаны одним из соотношений

$$G_{\omega k_{\parallel}}^{(1)}(z-z') = G_{\omega k_{\parallel}}^{(2)}(z-z'), \quad G_{\omega k_{\parallel}}^{(1)}(z-z') = G_{\omega k_{\parallel}}^{(2)}(z'-z). \quad (17)$$

Ядро $K(z, z')$ линеаризованного уравнения (15),

$$\Delta(z) = \int dz' K(z, z') \Delta(z'), \quad (18)$$

в силу (17) имеет при $z, z' \gg \xi_0$ и $-z, -z' \gg \xi_0$ одну и ту же величину $K_0(z-z')$, и для него справедливо разделение, следующее из (16) в пре-

небрежении свертками $\bar{G}G^{loc}$, имеющими малость $\sim a/\xi_0$ (см. разд. 6):

$$K(z, z') = K_0(z-z') + K_c(z, z') + K_{loc}(z, z'), \quad (19)$$

$$K_{loc}(z, z') = V(z) T \sum_{\omega} \int \frac{d^2 k_{\parallel}}{(2\pi)^2} \frac{|\Phi_0(z)|^2 |\Phi_0(z')|^2}{\varepsilon_0(k_{\parallel})^2 + \omega^2}, \quad (20)$$

где $K_0(z-z')$ локализовано при $|z-z'| \lesssim \xi_0$, $K_c(z, z')$ — при $|z|, |z'| \lesssim \xi_0$, $K_{loc}(z, z')$ — при $|z|, |z'| \lesssim a$.

5. Из (19) и правила сумм для ядра $K(z, z')$ [8]:

$$\int K(z, z') dz' = \lambda(z) \ln \frac{1,14 \omega_D}{T}, \quad (21)$$

следует разбиение (8) для $\lambda(z)$, причем функция $\lambda_c(z)$ из-за специфической знакопеременной структуры ядра $K_c(z, z')$ оказывается локализованной вблизи $z=0$ не на масштабе ξ_0 , а на атомном расстоянии.

4. Электронные свойства плоских дефектов

Дадим обоснование сформулированных в разд. 3 свойств плоских дефектов. Собственные функции гамильтониана \hat{H}_0 будем искать в узельном представлении, ограничиваясь для простоты одной зоной:

$$\sum_{\mathbf{r}'} J(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}') = E \Psi(\mathbf{r}). \quad (22)$$

Для дефектов, показанных на рис. 1, трансляционная инвариантность в плоскости xy очевидна и состоит в том, что $J(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = J(r_{\parallel}', -r_{\parallel}; z, z')$. Отделяя в (22) продольное движение, получим

$$\sum_{z'} J_{zz'}(k_{\parallel}) \varphi(z') = E \varphi(z), \quad J_{zz'}(k_{\parallel}) = \sum_{r_{\parallel}} J(r_{\parallel}; z, z') \exp(ik_{\parallel} r_{\parallel}). \quad (23)$$

Рассеивающий дефект

Для рассеивающего дефекта (рис. 1, б) интегралы перекрытия $J_{zz'}$ при фиксированном k_{\parallel} обладают свойством

$$J_{zz'} = J_{z'-z}^{(0)} + \delta J_{zz'}, \quad (24)$$

где величина $\delta J_{zz'}$ локализована при $|z|, |z'| \lesssim a$.

1. Вопрос о существовании локального уровня может быть решен методом Лифшица [12]. Вводя функцию Грина идеального кристалла $G_E^0(z-z')$ и используя (24), запишем (23) в интегральной форме. Границы спектра $\varepsilon(k_{\parallel}, k_z)$ идеального кристалла при фиксированном k_{\parallel} считаем соответствующими квазиимпульсам $k_z = k_0$ и $k_z = k_1$; при $E \approx \varepsilon(k_{\parallel}, k_{\alpha})$, $\alpha = 0, 1$ имеем

$$G_E^0(z-z') = \bar{G}_E(z-z') \exp[ik_{\alpha}(z-z')], \quad (25)$$

$$\varphi(z) = \bar{\varphi}(z) \exp(ik_{\alpha} z),$$

где $\bar{G}_E(z)$ и $\bar{\varphi}(z)$ — медленно меняющиеся функции z . Тогда (23) дает

$$\bar{\varphi}(z) = \bar{\varphi}(0) \bar{G}_E(z) W_{\alpha}, \quad (26)$$

$$W_{\alpha} = \sum_{z, z'} \delta J_{zz'} \exp[ik_{\alpha}(z'-z)].$$

Полагая $z=0$, получим уравнение для локального уровня [12]: ввиду рас-

ходимости $\bar{G}_E(0) = G_E^{(0)}(0)$ при $E \rightarrow \varepsilon(k_{\parallel}, k_x)$ он может существовать при сколь угодно малых $\delta J_{zz'}$. Для диагонального дефекта, $\delta J_{zz'} = \delta J_z \delta_{zz'}$, справедливо равенство $W_0 = W_1$ и уровень существует всегда; при $W_0 > 0$ он отщепляется от верхнего края зоны, при $W_0 < 0$ — от нижнего. Для недиагонального дефекта $W_0 \neq W_1$ и ситуация усложняется: при $W_0, W_1 > 0$ уровень отщепляется вверх, при $W_0, W_1 < 0$ — вниз, при $W_0 > 0, W_1 < 0$ уровень отсутствует, при $W_0 < 0, W_1 > 0$ уровни отщепляются от обоих краев зоны. Для типичных металлов это усложнение несущественно: уровень Ферми пересекает несколько зон (см. рис. 2), от каждой из которых отщепляется в среднем один уровень.

2. Вблизи края зоны любой дефект выглядит как точечный, $\delta J_{zz'} = W \delta_{z_0} \delta_{z'_0}$, для которого функция Грина уравнения (23) легко находится:

$$G_E(z, z') = G_E^0(z - z') + G_E^0(z) W [1 - W G_E^0(0)]^{-1} G_E^0(-z'). \quad (27)$$

Нужная нам функция $G_{\omega k_{\parallel}}(z, z')$ получается отсюда заменой $E \rightarrow i\omega$. Положим вблизи края зоны

$$\varepsilon(k_{\parallel}, k_z) = \sum_z J_z^{(0)}(k_{\parallel}) e^{ik_z z} = -\varepsilon_F + \frac{k_{\parallel}^2}{2m_{\parallel}} + \frac{k_z^2}{2m}, \quad (28)$$

$$k_z^0 = [2m(\varepsilon_F - k_{\parallel}^2/2m_{\parallel})]^{1/2}, \quad v_z = k_z^0/m, \quad \kappa = -mW$$

(ε_F — уровень Ферми, отсчитанный от края зоны). Выражение (27) зависит от параметра $(k_z^0)^2 = 2m(\varepsilon_F - k_{\parallel}^2/2m_{\parallel})$, причем интегрирование по k_{\parallel} в (15) захватывает как область $(k_z^0)^2 > 0$, так и $(k_z^0)^2 < 0$, в которых соответственно

$$G_{\omega k_{\parallel}}^0(z) \propto \exp(-|\omega z|/v_z), \quad G_{\omega k_{\parallel}}^0(z) \propto \exp(-|k_z^0||z|).$$

Во второй области существенна окрестность полюса $(k_z^0)^2 = -\kappa^2$, где $G_{\omega k_{\parallel}}$ совпадает с функцией $G_{\omega k_{\parallel}}^{loc}$, определенной в (16). Возникающая в результате разбегания (16) функция $\bar{G}_{\omega k_{\parallel}}$ имеет в основной области значений k_{\parallel} относительно малую величину $\sim 1/v_F$ и играет в (15) существенную роль лишь в случае, когда ее радиус локализации по z и z' велик, т. е. в области $\varepsilon_F - k_{\parallel}^2/2m_{\parallel} \sim \varepsilon_F$:

$$\begin{aligned} \bar{G}_{\omega k_{\parallel}}(z, z') &= G_{\omega k_{\parallel}}^0(z, z') + G_{\omega k_{\parallel}}^c(z, z'), \\ G_{\omega k_{\parallel}}^0(z - z') &= -\frac{i \operatorname{sgn} \omega}{v_z} \exp(ik_z^0|z - z'| \operatorname{sgn} \omega) \exp\left(-\frac{|\omega||z - z'|}{v_z}\right), \quad (29) \\ G_{\omega k_{\parallel}}^c(z, z') &= \frac{1}{v_z} \frac{\kappa}{k_z^0 - i\kappa \operatorname{sgn} \omega} \exp[ik_z^0(|z| + |z'|) \operatorname{sgn} \omega] \cdot \\ &\quad \cdot \exp\left[-\frac{|\omega|(|z| + |z'|)}{v_z}\right]. \end{aligned}$$

Из (29) очевидны перечисленные в разд. 3 свойства.

3. Локальная плотность состояний $N(0, z)$ находится из соотношения

$$N(0, z) = -\lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{\operatorname{sgn} \omega}{\pi} \operatorname{Im} \int \frac{d^2 k_{\parallel}}{(2\pi)^2} G_{\omega k_{\parallel}}(z, z). \quad (30)$$

Представляя $N(0, z)$ в виде (7), найдем асимптотики для $N_c(0, z)$:

$$N_c(0, z) = \begin{cases} -\frac{m_{\parallel}}{2\pi} \kappa \theta(\kappa) e^{-2\kappa|z|}, & k_F \gg \kappa \\ -\frac{m_{\parallel}}{4\pi^2} \frac{\sin 2k_F z}{z}, & k_F \ll \kappa \end{cases}, \quad (31)$$

где $k_F = (2m\varepsilon_F)^{1/2}$. Отсюда очевидна локализация $\lambda_c(z)$ при $|z| \lesssim a$.

4. Для системы конечной длины L вдоль оси z выражение (31) сохраняется с точностью $\sim a/L$ включительно, так что вклад дефекта в среднюю плотность состояний $N(\varepsilon)$ (5), имеющий порядок a/L , возникает лишь от окрестности дефекта и может быть получен интегрированием (31) по z (при вычислениях с точностью $\sim a/L$ величины $N(\varepsilon)$ и $N(\varepsilon, z)$ должны пониматься в сглаженном смысле для исключения эффектов размерного квантования [13]).

На первый взгляд, изменение $N(\varepsilon)$ должно привести к малому ($\sim a/L$) сдвигу уровня Ферми, согласно соотношению

$$\int_{-\infty}^{\varepsilon_F} N_0(\varepsilon) d\varepsilon = \int_{-\infty}^{\varepsilon_F + \delta\varepsilon_F} N(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (32)$$

который нужно было бы учитывать при рассмотрении периодических структур в разд. 7. Однако изменение $N(\varepsilon)$ набирается лишь от окрестности дефекта $|z| \lesssim a$, и сдвиг уровня Ферми приведет к разделению зарядов: вблизи дефекта возникнет поверхностная плотность заряда $\sim e/a^2$, а в объеме — компенсирующая объемная плотность $\sim e/a^2 L$. В результате в образце возникнет электрическое поле $\mathcal{E} \sim e/a^2$, энергия которого $\sim e^2 L/a^2$ на элементарную ячейку поверхности. Эта энергия может быть уменьшена до величины $\sim e^2/a$ путем а) перераспределения электронов, приводящего к экранировке избыточного заряда дефекта на масштабе $\sim a$, б) создания вблизи дефекта деформации решетки, компенсирующей избыточный электронный заряд за счет изменения плотности ионов. Эффекты а), б) приведут к устранению сдвига уровня Ферми путем изменения рассеивающих свойств дефекта, которые должны теперь определяться самосогласованно. В равновесии будет выполняться соотношение, аналогичное правилу сумм Фриделя [14]:

$$\int_{-\infty}^{\varepsilon_F} d\varepsilon \int_{-\infty}^{\infty} dz [N_{loc}(\varepsilon, z) + N_c(\varepsilon, z)] = Z_{eff}, \quad (33)$$

где $|e|Z_{eff}S$ — избыточный заряд ионов, локализованный вблизи дефекта. Для точечного дефекта соотношение (33) связывает параметр κ с Z_{eff} .

Плоскость двойникования

В простейшем случае плоскость двойникования является плоскостью зеркальной симметрии и интегралы перекрытия в (23) обладают свойством $(J_z^{(0)} \neq J_{-z}^{(0)})$

$$J_{zz'} = J_{z'-z}^{(0)} \text{ для } z, z' \gg a, \quad J_{zz'} = J_{z-z'}^{(0)} \text{ для } -z, -z' \gg a. \quad (34)$$

При $b=c$ система, изображенная на рис. 1, а, является периодической и локальный уровень отсутствует. Покажем, что он появится при сколь угодно малом отклонении b от c . Из (34) ясно, что при фиксированном $k_{||}$ спектры $\varepsilon_1(k_z)$ и $\varepsilon_2(k_z)$ правой и левой половин кристалла связаны соотношением $\varepsilon_1(k) = \varepsilon_2(-k)$; вблизи края зоны

$$\varepsilon_1(k) = E_0 + \beta(k - k_0)^2, \quad \varepsilon_2(k) = E_0 + \beta(k + k_0)^2. \quad (35)$$

Сделаем в (23) подстановку

$$\varphi(z) = \bar{\varphi}(z) e^{iu(z)}, \quad u(z) \rightarrow k_0 |z|, \quad |z| \rightarrow \infty. \quad (36)$$

Функция $\bar{\varphi}(z)$ является медленно меняющейся, и в (23) можно провести разложение по градиентам:

$$W(z)\bar{\varphi}(z) + \alpha(z)\bar{\varphi}'(z) - \beta(z)\bar{\varphi}''(z) = E\bar{\varphi}(z), \quad (37)$$

где

$$W(z) = \sum_{z'} \bar{J}_{zz'}, \quad \alpha(z) = \sum_{z'} (z' - z) \bar{J}_{zz'}, \quad \beta(z) = - \sum_{z'} \frac{(z' - z)^2}{2} \bar{J}_{zz'}, \quad (38)$$

$$\bar{J}_{zz'} = J_{zz'} \exp [iu(z') - iu(z)].$$

Сравнивая спектр уравнения (37) на больших расстояниях от дефекта со спектром (35), получим, что при $|z| \rightarrow \infty$

$$W(z) \rightarrow E_0, \quad \alpha(z) \rightarrow 0, \quad \beta(z) \rightarrow \beta. \quad (39)$$

Выделив из $W(z)$, $\alpha(z)$, $\beta(z)$ асимптотики (39), перенеся соответствующие члены в правую часть (37) и введя функцию Грина $G_E(z-z')$ правой части, получаем

$$\bar{\varphi}(z) = G_E(z) [W\bar{\varphi}(0) + A\bar{\varphi}'(0) + B\bar{\varphi}''(0)], \quad (40)$$

где

$$W = \sum_z [W(z) - E_0], \quad A = \sum_z \alpha(z), \quad B = \sum_z [\beta - \beta(z)]. \quad (41)$$

Из (40) следует уравнение, определяющее локальный уровень:

$$1 = WG_E(0) + AG_E'(0) + BG_E''(0). \quad (42)$$

При $|b-c| \ll c$ константы W , A , B малы. Поскольку из трех функций $G_E(0)$, $G_E'(0)$, $G_E''(0)$ при $E \rightarrow E_0$ расходится только первая, то в правой части уравнений (40), (42) достаточно сохранить лишь первый член, после чего они совпадают с аналогичными уравнениями для рассеивающего дефекта (см. (26)).

Выражение для константы W через интегралы перекрытия получается из (38) и в низшем порядке по $b-c$ имеет вид

$$W = \sum_{z, z' \geq 0} [J_{zz'} - J_{z'-z}^{(0)}] + \sum_{z, z' \leq 0} [J_{zz'} - J_{z-z'}^{(0)}] - [J_{00} - J_0^{(0)}] + \sum_{z \cdot z' < 0} [J_{zz'} - J_{z'-z}^{(0)}]. \quad (43)$$

В качестве $u(z)$ можно взять $k_0|z|$, так как различие в W , связанное с разными выборами $u(z)$, оказывается величиной более высокого порядка малости. В пренебрежении деформацией решетки

$$J_{zz'} = J_{z'-z}^{(0)} \text{ при } z, z' \geq 0, \quad J_{zz'} = J_{z-z'}^{(0)} \text{ при } z, z' \leq 0 \quad (44)$$

и в выражении (43) остается лишь последний член. В случае, когда интегралы перекрытия быстро убывают с расстоянием (см. обозначения на рис. 1, а),

$$W = 2(J_{bc}' - J_{bc}). \quad (45)$$

При учете лишь ближайших соседей локальный уровень отсутствует [15]. В условиях применимости (45) уровень отщепляется всегда, так как вблизи другого края зоны константа W оказывается той же самой.

Из сказанного ясно, что подстановка (36) сводит задачу о плоскости двойникования к задаче о некотором (существенно недиагональном) рассеивающем дефекте. Подставляя (36) в выражение для $G_{\sigma_{hk}} \parallel$ (14) и в уравнение Горькова (15), убеждаемся, что множители $\exp [iu(z)]$ сокращаются во всех членах этого уравнения. Таким образом, мы приходим к сформулированной в разд. 2 теореме об эквивалентности сверхпроводящих свойств плоскости двойникования и рассеивающего дефекта в случае, когда уровень Ферми лежит вблизи края зоны.

В общем случае выражения для функций Грина громоздки (см. Приложение 2) и существенно отличаются от таковых для рассеивающего дефекта, однако все сформулированные в разд. 3 свойства сохраняются.

5. Два режима локализации параметра порядка

1. Температура перехода T_c в состояние локализованной сверхпроводимости определяется из условия разрешимости уравнения (18) с ядром (19) (считаем $V(z) = \text{const}$). При близости уровня Ферми к ван-хововской особенности $N_{2D}(\varepsilon) \propto \ln |\varepsilon|$ можно пренебречь ядром $K_c(z, z')$ по сравнению с $K_{loc}(z, z')$. Полученное уравнение ввиду вырожденного характера ядра $K_{loc}(z, z')$ легко решается переходом к фурье-компонентам:

$$\Delta_q = \Delta_\varphi V N_{2D}(0) \ln \frac{1,14\omega_D}{T} \frac{(\varphi_0^2)_q}{1 - K_0(q)}, \quad \Delta_\varphi = \int dz \Delta(z) |\varphi_0(z)|^2. \quad (46)$$

Условие самосогласования этих выражений дает

$$1 = V N_{2D}(0) \ln \frac{1,14\omega_D}{T} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi} \frac{(\varphi_0^2)_q (\varphi_0^2)_{-q}}{1 - K_0(q)}. \quad (47)$$

Разобьем интеграл на области $|q| \lesssim \xi_0^{-1}$, $\xi_0^{-1} \lesssim |q| \lesssim \omega_D/v_F$ и $|q| \gtrsim \omega_D/v_F$; в первой области положим

$$K_0(q) = \lambda_0 \left[\ln \frac{1,14\omega_D}{T} - \frac{1}{2} (\xi_0 q)^2 \right], \quad \xi_0 = \frac{v_F}{T_{co}} \left[\frac{7\zeta(3)}{24\pi^2} \right]^{1/2}, \quad (48)$$

в третьей — $K_0(q) = 0$, интеграл от второй области мал. В результате получим

$$1 = \lambda_{loc} \ln \left(\frac{1,14\omega_D}{T} \right) \left\{ \frac{1}{\lambda_0} \frac{a}{\xi_0} \left[\frac{T_{co}}{2(T - T_{co})} \right]^{1/2} + 1 \right\}, \quad (49)$$

где введены обозначения

$$\lambda_{loc} = V N_{2D}(0) a^{-1}, \quad a^{-1} = \int_{-\infty}^{\infty} |\varphi_0(z)|^4 dz. \quad (50)$$

Величина a имеет порядок радиуса локализации функции $\varphi_0(z)$. Из (49) находим асимптотики для T_c ²⁾:

$$T_c = \begin{cases} T_{co} \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{a}{\xi_0} \frac{\lambda_{loc}}{\lambda_0(\lambda_0 - \lambda_{loc})} \right)^2 \right], & \lambda_0 - \lambda_{loc} \gg (a/\xi_0)^{2/3}, & (51a) \\ T_{co} [1 + (a/2^3 \lambda_0^2 \xi_0)^{2/3}], & |\lambda_0 - \lambda_{loc}| \ll (a/\xi_0)^{2/3}, & (51b) \\ 1,14\omega_D \exp(-1/\lambda_{loc}), & \lambda_{loc} - \lambda_0 \gg (a/\xi_0)^{2/3}. & (51b) \end{cases}$$

При изменении λ_{loc} переход между асимптотиками (51a) и (51b) происходит в узкой области $\sim (a/\xi_0)^{2/3}$ вблизи λ_0 (рис. 5). В пределе $a/\xi_0 \rightarrow 0$ точка λ_0 становится точкой настоящего фазового перехода. Из вида решения

$$\Delta(z) = \text{const} \left\{ a |\varphi_0(z)|^2 + \frac{a \xi(T_c)}{\lambda_0 \xi_0^2} \exp \left[-\frac{|z|}{\xi(T_c)} \right] \right\}, \quad \xi(T) = \xi_0 \left[\frac{T_{co}}{2(T - T_{co})} \right]^{1/2} \quad (52)$$

которое получается из (46), выясняется физический смысл фазового перехода: при $\lambda_{loc} \approx \lambda_0$ происходит переход от состояния, локализованного на

²⁾ Результаты (51) совпадают с результатами работы [5], где они выражены, однако, через феноменологические параметры. В работе [6] получен результат $\delta T_c \sim T_{co}$ без учета вклада таммовских уровней. Источником ошибки является неправильный вид осциллирующего множителя во втором члене выражения (П.3) для $G_0(x, x'; \mathbf{k})$ в [6], вследствие чего для константы L_0 в правильной формуле (10) получен результат $L_0 \sim \xi_0$. В действительности выражение для L_0 с помощью пра-

вила сумм (24) преобразуется к интегралу $\int \lambda_c(z) dz \sim a$.

масштабе $\xi(T)$, к состоянию, локализованному на атомном расстоянии вблизи дефекта.

Решение (52) является четным по z . Феноменологический анализ, проведенный Андреевым [16], показывает возможность существования нечетного по z решения, обладающего интересными свойствами. Такое решение не реализуется, если $V(\mathbf{r}) > 0$ и отсутствуют магнитные эффекты; тогда $G_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G_\omega(\mathbf{r}', \mathbf{r})$ и ядро

$$K(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = V(\mathbf{r}) T \sum_{\omega} |G_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|^2 \quad (53)$$

является положительно определенным. Куперовская неустойчивость возникает на собственной функции ядра $K(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, соответствующей наименьшему характеристическому значению; эта функция не имеет узлов [17].

2. В случае $N(0, z) = \text{const}$, $V(z) \neq \text{const}$ ядро $K(z, z')$ имеет структуру, отличную от (19):

$$K(z, z') = K_0(z - z') + \frac{\delta V(z)}{V} K_0(z - z'), \quad (54)$$

где $\delta V(z) = V(z) - V$. Второй член локализован при $|z| \leq a$, $|z'| \leq \xi_0$; он оказывается вырожденным, если положить $z = 0$ в аргументе ядра K_0 . При решении уравнения (18) описанным выше способом область интегрирования по q в выражении типа (47) оказывается ограниченной значениями $|q| \leq \xi_0^{-1}$ и сильно локализованный режим не возникает. Для T_c получается выражение [2]

$$\frac{T_c - T_{c0}}{T_{c0}} = \frac{1}{2} \left(\frac{\delta \lambda a}{\lambda_0^2 \xi_0} \right)^2, \quad a \delta \lambda = \int \delta \lambda(z) dz = \int N_0(0) \delta V(z) dz, \quad (55)$$

подтверждающее оценку (1) и справедливое при $\delta \lambda / \lambda_0 \leq \xi_0 / a$. Ясно, что увеличение $V(z)$ вблизи границы не имеет качественного значения, и в дальнейшем будем полагать $V(z) = \text{const}$.

3. Учет ядра $K_c(z, z')$ может быть проведен методами следующего раздела: результат (51в) сохраняется, а вместо (51а) получим

$$\frac{\delta T_c}{T_{c0}} = \frac{1}{2} \left(\gamma \frac{a}{\xi_0} \right)^2, \quad \gamma = \frac{(\lambda_0 \bar{\lambda}_c + \bar{\lambda}_c^2)(\lambda_0 - \lambda_{loc}) + \lambda_{loc}(\lambda_0 + \lambda_c)^2}{\lambda_0^3 (\lambda_0 - \lambda_{loc})} \quad (56)$$

для $\lambda_{loc} > \lambda^*$ и $\delta T_c = 0$ для $\lambda_{loc} < \lambda^*$. Здесь введены обозначения

$$\lambda_c = \int \lambda_c(z) |\varphi_0(z)|^2 dz, \quad \bar{\lambda}_c a = \int \lambda_c(z) dz, \quad \bar{\lambda}_c^2 a = \int \lambda_c^2(z) dz. \quad (57)$$

Качественное отличие от (51а) состоит в появлении нижней границы существования локализованной сверхпроводимости:

$$\lambda^* = \lambda_0 \frac{\lambda_0 \bar{\lambda}_c + \bar{\lambda}_c^2}{(\lambda_0 \bar{\lambda}_c + \bar{\lambda}_c^2) - (\lambda_0 + \lambda_c)^2} \theta(-\lambda_0 \bar{\lambda}_c - \bar{\lambda}_c^2). \quad (58)$$

По определению, $0 \leq \lambda^* < \lambda_0$, и при $\lambda_{loc} > \lambda_0$ локализованная сверхпроводимость существует независимо от величины $\lambda_c(z)$; при малых $\lambda_c(z)$ и $\lambda_{loc}(z)$ условие $\lambda_{loc} > \lambda^*$ сводится к требованию положительности величины (12).

6. Описание локализованной сверхпроводимости

В температурной области вблизи T_{c0} следует пользоваться нелинейным уравнением Горькова (15). Подставляя $G_{\omega k}$ в виде (16) и используя очевидную символическую запись, получаем

$$\Delta = [\bar{G} \Delta \bar{G} - \bar{G} \Delta \bar{G} \Delta \bar{G} \Delta \bar{G} + \dots] + [G^{loc} \Delta G^{loc} - G^{loc} \Delta G^{loc} \Delta G^{loc} \Delta G^{loc} + \dots]. \quad (59)$$

Функция $G^{loc} \sim 1/aT$ и локализована при $|z|, |z'| \ll a$, тогда как функция $\tilde{G} \sim 1/a\varepsilon_F$ и отличается от таковой в отсутствие дефекта при $|z|, |z'| \ll \xi_0$, поэтому сохранные в (59) члены одинаково существенны; перекрестные же члены типа $\tilde{G}^m (G^{loc})^n$ имеют лишнюю малость по a/ξ_0 .

Ввиду (52) решение надо искать в виде (14), где функция $\Delta_0(z)$ локализована при $|z| \ll a$, а $\psi(z)$ меняется на масштабе $\xi(T)$. В первой скобке (59) члены, содержащие n множителей Δ_0 , имеют малость $\sim (a/\xi_0)^n$ из-за ограничения области интегрирования по z_i — из них нужно сохранить лишь максимальный. В дальнейшем выяснится, что $\psi(z) \ll T_{co}$, а $\Delta_0(z)$ может быть как $\sim \psi(z)$, так и $\sim T_{co}$, поэтому следует ограничиться членами низшего порядка по ψ , но учитывать во всех порядках Δ_0 . В первой скобке (59) нужно сохранить члены

$$\tilde{G}\Delta_0\tilde{G} + \tilde{G}\psi\tilde{G} - \tilde{G}\psi\tilde{G}\psi\tilde{G}\psi\tilde{G} \quad (60)$$

(как обычно, сохранение кубичного по ψ члена связано с малостью коэффициента при члене $\sim \psi$); разложение по ψ во второй скобке (59) удобно сделать позже. Разбиение $\Delta = \Delta_0 + \psi$ конкретизируем следующим образом:

$$\Delta_0 = (\tilde{G}\psi\tilde{G} - G^0\psi G^0) + [G^{loc}\Delta G^{loc} - G^{loc}\Delta G^{loc}\Delta G^{loc}\Delta G^{loc} + \dots], \quad (61a)$$

$$\psi = G^0\psi G^0 - G^0\psi G^0\psi G^0\psi G^0 + \tilde{G}\Delta_0\tilde{G}. \quad (61b)$$

Функция $G_{\omega_k \parallel}^0$ определена выражением (29) для рассеивающего дефекта и выражениями (II.9) — (II.11) с $\chi = -\alpha = \pi/2$ для плоскости двойникования. Вследствие того что (см. (21))

$$\tilde{G}\psi\tilde{G} - G^0\psi G^0 \rightarrow \psi(0)\lambda_c(z)\ln(1,14\omega_D/T), \quad (62a)$$

$$\tilde{G}\psi\tilde{G}\psi\tilde{G}\psi\tilde{G} - G^0\psi G^0\psi G^0\psi G^0 \rightarrow -\psi(0)\frac{|\psi(0)|^2}{T_{co}^2}\lambda_c(z)\frac{7\xi(3)}{8\pi^2}, \quad (62b)$$

выражением (62b) можно пренебречь по сравнению с (62a), что уже сделано в (61). Ввиду (62a) все члены в правой части (61a) локализованы при $|z| \ll a$, что и было предположено для $\Delta_0(z)$. Члены в квадратных скобках в (61a) ввиду вырожденного характера G^{loc} суммируются в конечное выражение

$$VN_{2D}(0)|\varphi_0(z)|^2 T \sum_{|\omega| < \omega_D} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \frac{\Delta_\varphi}{\varepsilon^2 + \omega^2 + |\Delta_\varphi|^2}, \quad (63)$$

где Δ_φ определено в (46).

Уравнение (61b) без кубичного по ψ члена можно разрешить относительно ψ переходам в фурье-представление. Ввиду того что член $\tilde{G}\Delta_0\tilde{G}$ не содержит фурье-компонент с $|q| \gtrsim \xi_0^{-1}$, оказывается, что при $|T - T_{co}| \ll T_{co}$ функция $\psi(z)$ меняется на масштабе $\xi(T)$, что и было предположено выше. После разложения по градиентам ψ член $\tilde{G}\Delta_0\tilde{G}$ может быть заменен на δ -функцию и преобразован с помощью правила сумм (21). Сохранение этих свойств при наличии кубичного по ψ члена доказывается построением итерационного ряда. В результате приходим к системе уравнений локализованной сверхпроводимости:

$$\bar{\Delta}_0 = \lambda_{loc} \int_{-\omega_D}^{\omega_D} d\varepsilon \frac{\Delta_\varphi}{2(\varepsilon^2 + |\Delta_\varphi|^2)^{1/2}} \text{th} \frac{(\varepsilon^2 + |\Delta_\varphi|^2)^{1/2}}{2T}, \quad \Delta_\varphi = \gamma_0 \lambda_0 \psi(0) + \bar{\Delta}_0, \quad (64)$$

$$\Delta_0(z) = \lambda_0^{-1} \psi(0) \lambda_c(z) + \bar{\Delta}_0 a |\varphi_0(z)|^2, \quad (65)$$

$$-\frac{1}{2} \xi_0^2 \psi''(z) + \frac{T - T_{co}}{T_{co}} \psi(z) + \beta \frac{\psi(z) |\psi(z)|^2}{T_{co}^2} = \delta(z) a [\gamma_0 \bar{\Delta}_0 + \gamma_1 \psi(0)], \quad (66)$$

где введены обозначения

$$\gamma_0 = \frac{\lambda_0 + \lambda_c}{\lambda_0^2}, \quad \gamma_1 = \frac{\lambda_0 \bar{\lambda}_c + \lambda_c^2}{\lambda_0^3}, \quad \beta = \frac{7\xi(3)}{8\pi^2}. \quad (67)$$

Уравнение (66) легко решается:

$$\psi(z) = \frac{T_{co}(2t/\beta)^{1/2}}{\text{sh}[(2t)^{1/2}(z+z_0)/\xi_0]}, \quad t = \frac{T-T_{co}}{T_{co}}. \quad (68)$$

Решение $\Delta(z)$ полностью определено в (65), (68), если известны $\bar{\Delta}_0$ и $\psi(0)$, которые находятся из (64).

В случае $\lambda_0 - \lambda_{loc} \gg (a/\xi_0)^{2/3}$ величина $\bar{\Delta}_0$ оказывается пропорциональной $\psi(0)$ и на феноменологическом уровне система описывается теорией Буздина — Булаевского [2]:

$$\bar{\Delta}_0 = \frac{\lambda_{loc}(\lambda_0 + \lambda_c)}{\lambda_0(\lambda_0 - \lambda_{loc})} \psi(0), \quad \psi(0) = T_{co} \left(\frac{2(t_c - t)}{\beta} \right)^{1/2}. \quad (69)$$

Однако связь $t_c = \delta T_c / T_{co}$ с $\delta\lambda$ усложняется (см. (56)).

В случае $\lambda_{loc} - \lambda_0 \gg (a/\xi_0)^{2/3}$ теория [2] неприменима даже на феноменологическом уровне: в уравнении Гинзбурга — Ландау (66) кроме члена $\sim \psi(0)\delta(z)$ имеется член $\text{const} \delta(z)$. Феноменологически в методе Андреева [16] происхождение этого члена связано с существованием двумерного параметра порядка Δ_0 и наличием в поверхностной энергии членов типа $\Delta_0 \psi^*(0)$. Связь $\bar{\Delta}_0$ и $\psi(0)$ с микроскопическими параметрами имеет вид

$$\bar{\Delta}_0 = \begin{cases} 2\omega_D \exp(-1/\lambda_{loc}), & \lambda_{loc} \gg \lambda_0 \\ \frac{T_{co}}{\lambda_0} \left(\frac{\lambda_{loc} - \lambda_0}{\beta} \right)^{1/2}, & \lambda_{loc} - \lambda_0 \ll \lambda_0, \end{cases} \quad \psi(0) = T_{co} \left(\frac{\tau/\beta}{t/\tau + [1 + (t/\tau)^2]^{1/2}} \right)^{1/2}, \quad (70)$$

где параметр τ , определяющий температурный интервал δT_{eff} , в котором возможно наблюдение локализованной сверхпроводимости, имеет вид

$$\tau = \frac{\delta T_{eff}}{T_{co}} = \gamma_0 \beta^{1/2} \frac{\bar{\Delta}_0}{T_{co}} \frac{a}{\xi_0}. \quad (71)$$

7. Периодические структуры

Рассмотрим систему периодически расположенных плоских дефектов с расстоянием $L_0 \gg a$ между ними. Функция Грина $G_{\omega k \parallel}$ и параметр порядка $\Delta(z)$ представляются в виде

$$G_{\omega k \parallel}(z, z') = \bar{G}_{\omega k \parallel}(z, z') + \sum_{z_i} G_{\omega k \parallel}^{loc}(z - z_i, z' - z_i), \quad (72)$$

$$\Delta(z) = \psi(z) + \sum_{z_i} \Delta_0(z - z_i), \quad (73)$$

где z_i — координаты дефектов, $G_{\omega k \parallel}^{loc}$ определена в (16). Повторяя рассуждения разд. 6, приходим к системе уравнений типа (61); величина $G - G^0$, вообще говоря, не разбивается на сумму вкладов от отдельных дефектов, но в результате входит лишь величина $\lambda_c(z)$ (см. (62)), которая этим свойством обладает, поэтому единственное изменение в системе (64) — (66) состоит в замене $\delta(z)$ на сумму функций $\delta(z - z_i)$.

Линеаризация системы приводит к уравнению для определения T_c :

$$1 = \lambda_{loc} \ln \left(\frac{1,14\omega_D}{T} \right) \left\{ 1 + \lambda_0 \gamma_0^2 \left[-\gamma_1 + \frac{\xi_0^2}{a\xi(T)} \text{th} \frac{L_0}{2\xi(T)} \right]^{-1} \right\}, \quad (74)$$

которое при $L_0 \gg \xi(T_c)$ сводится к уравнению для изолированного дефекта,

а при $L_0 \ll \xi(T_c)$ дает

$$T_c = \begin{cases} T_{co}[1 + \gamma a/L_0], & \lambda_0 - \lambda_{loc} \gg (a/L_0)^{1/2} \\ T_{co}[1 + \gamma_0(a/L_0)^{1/2}], & |\lambda_0 - \lambda_{loc}| \ll (a/L_0)^{1/2} \\ 1,14\omega_D \exp(-1/\lambda_{loc}), & \lambda_{loc} - \lambda_0 \gg (a/L_0)^{1/2} \end{cases} \quad (75)$$

При $\lambda_{loc} \gg \lambda_0$ характерный температурный интервал наблюдения локализованной сверхпроводимости δT_{eff} определяется для периодически расположенных дефектов величиной

$$\tau_\infty \sim \tau [\xi(\tau)/L_0]^{1/2}, \quad L_0 \ll \xi(\tau), \quad (76)$$

а для двух дефектов, расположенных на расстоянии L_0 , величиной

$$\tau_2 = 2\tau, \quad L_0 \ll \xi(\tau). \quad (77)$$

При интерпретации эксперимента (см. рис. 5) нужно иметь в виду, что δT_{eff} имеет количественный смысл лишь при сравнении ситуаций, в которых температурные зависимости физических величин имеют одинаковую форму; по этой причине нельзя распространить результаты (76), (77) на область $L_0 \gg \xi(\tau)$ и определить коэффициент в (76).

Автор признателен А. Ф. Андрееву, М. С. Хайкину и И. Н. Хлюстикovu за обсуждение.

ПРИЛОЖЕНИЕ 1

Модификация формулы БКШ вблизи ван-хововской особенности

Подставляя в уравнение самосогласования теории БКШ

$$1 = V \int_{-\omega_D}^{\omega_D} N(\varepsilon) \frac{d\varepsilon}{2\varepsilon} \operatorname{th} \frac{\varepsilon}{2T} \quad (П.1)$$

плотность состояний в виде $N(0) \ln(J/|\varepsilon|)$ и полагая $\lambda_0 = VN(0)$, получим

$$\frac{1}{\lambda_0} = \frac{1}{2} \left(\ln \frac{\omega_D}{T_c} \right)^2 + \ln \frac{1,14J}{\omega_D} \ln \frac{\omega_D}{T_c} + \ln 1,14 \cdot \ln \frac{J}{\omega_D} + \int_0^\infty \frac{(\ln \varepsilon)^2 d\varepsilon}{4 \operatorname{ch}^2(\varepsilon/2)}. \quad (П.2)$$

Сохраняя поочередно один из дважды логарифмических членов, имеем

$$T_c \sim \begin{cases} \omega_D \exp[-(2/\lambda_0)^{1/2}], & \ln(\omega_D/T_c) \gg \ln(J/\omega_D), \\ \omega_D \exp[-1/\lambda_0 \ln(J/\omega_D)], & \ln(\omega_D/T_c) \ll \ln(J/\omega_D). \end{cases} \quad (П.3)$$

Результат (П.3) получен в [18, 19], он применим лишь в области $T_c \ll 1$ К, не представляющей интерес с точки зрения высокотемпературной сверхпроводимости. В области не слишком малых T_c для оценок можно пользоваться результатом (П.4), представляющим собой обычную формулу БКШ с ван-хововской особенностью, обрезанной на масштабе ω_D . Точность асимптотик (П.3), (П.4) невелика, из (П.2) можно получить и общее выражение

$$T_c = 1,14J \exp(-\{2/\lambda_0 + [\ln(J/\omega_D)]^2 - 1,31\}^{1/2}). \quad (П.5)$$

Дзялошинским [19] показано, что в случае, когда ван-хововская особенность связана с самопересечением двумерной ферми-поверхности под углом, близким к прямому, исследование области $1 \sim \lambda_0 [\ln(\omega_D/T)]^2$ требует суммирования «паркета». Это актуально лишь для аномально малых λ_0 , в противном случае члены $\sim \ln(\omega_D/T_c) \ln(J/\omega_D)$ являются главными и применима формула БКШ.

Функция Грина плоскости двойникования

Ввиду зеркальной симметрии функция $\varphi(z)$ имеет вид

$$\varphi(z) = \begin{cases} A|v_1|^{-1/2}e^{ik_1z} + B|v_2|^{-1/2}e^{ik_2z}, & z > 0 \\ C|v_1|^{-1/2}e^{-ik_1z} + D|v_2|^{-1/2}e^{-ik_2z}, & z < 0 \end{cases} \quad (\text{П.6})$$

где k_α есть решения уравнения $\epsilon_1(k) = E$, а $v_\alpha = (\partial\epsilon_1(k)/\partial k)_{k=k_\alpha}$. Коэффициенты A, B, C, D связаны унитарной матрицей, с учетом зеркальной симметрии имеющей вид

$$\begin{pmatrix} B \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\alpha} \cos \chi & ie^{i\alpha} \sin \chi \\ ie^{i\alpha} \sin \chi & e^{i\alpha} \cos \chi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ C \end{pmatrix}. \quad (\text{П.7})$$

Граничные условия в точках $z = \pm L/2$ состоят в отсутствии за пределами образца прошедших волн:

$$\begin{aligned} A \exp(ik_1L/2) &= B \exp(ik_2L/2 + i\varphi), \\ C \exp(ik_1L/2) &= D \exp(ik_2L/2 + i\varphi). \end{aligned} \quad (\text{П.8})$$

Находя собственные функции и собственные значения и вычисляя сумму по s в (14) при больших z, z' , получим для $z > 0, z' > 0$

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{\omega k_{\parallel}}(z, z') &= G_{\omega k_{\parallel}}^{(1)}(z - z') - i \operatorname{sgn} \omega \frac{\cos \chi}{|v_1 v_2|^{1/2}} \left\{ \exp[i(\alpha + k_2 z - k_1 z')] \cdot \right. \\ &\cdot \exp\left[-\left|\omega\left(\frac{z}{v_2} - \frac{z'}{v_1}\right)\right|\right] \theta\left(\omega\left(\frac{z}{v_2} - \frac{z'}{v_1}\right)\right) + \exp[i(-\alpha + k_1 z - k_2 z')] \cdot \\ &\cdot \exp\left[-\left|\omega\left(\frac{z}{v_1} - \frac{z'}{v_2}\right)\right|\right] \theta\left(\omega\left(\frac{z}{v_1} - \frac{z'}{v_2}\right)\right) \left. \right\}, \end{aligned} \quad (\text{П.9})$$

(П.10)

$$G_{\omega k_{\parallel}}^{(1)}(z - z') = -i \operatorname{sgn} \omega \sum_{\alpha=1,2} \frac{\exp[ik_\alpha(z - z')]}{|v_\alpha|} \exp\left(-\left|\omega\frac{z - z'}{v_\alpha}\right|\right) \theta\left(\omega\frac{z - z'}{v_\alpha}\right).$$

Для $z > 0, z' < 0$ имеем

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{\omega k_{\parallel}}(z, z') &= \operatorname{sgn} \omega \frac{\sin \chi}{|v_1 v_2|^{1/2}} \left\{ \exp[i(\alpha + k_2 z + k_1 z')] \exp\left[-\left|\omega\left(\frac{z}{v_2} + \frac{z'}{v_1}\right)\right|\right] \cdot \right. \\ &\cdot \theta\left(\omega\left(\frac{z}{v_2} + \frac{z'}{v_1}\right)\right) - \exp[i(-\alpha + k_1 z + k_2 z')] \exp\left[-\left|\omega\left(\frac{z}{v_1} + \frac{z'}{v_2}\right)\right|\right] \cdot \\ &\cdot \theta\left(\omega\left(\frac{z}{v_1} + \frac{z'}{v_2}\right)\right) \left. \right\}. \end{aligned} \quad (\text{П.11})$$

Остальные случаи получаются из соотношения $G_{\omega k_{\parallel}}(z, z') = = G_{\omega k_{\parallel}}(-z, -z')$.

Литература

1. Хайкин М. С., Хлюстикова И. Н. // Письма в ЖЭТФ. 1981. Т. 33. С. 167. 1982. Т. 36. С. 132. 1983. Т. 38. С. 191. *Khlyustikov I. N., Buzdin A. I.* // Adv. Phys. 1987. V. 36. P. 271.
2. Аверин В. В., Буздин А. И., Булаевский Л. Н. // ЖЭТФ. 1983. Т. 84. С. 737.
3. Пашицкий Э. А. // 23-е Всесоюз. совещ. по физике низких температур. Тез. докл. Ч. 1. Таллин, 1984. С. 182.
4. Набережных В. П., Селянов Б. И., Фельдман Э. П., Юрченко В. М. // Там же. с. 184.
5. Набуготовский В. М., Шапиро В. Я. // ЖЭТФ. 1983. Т. 84. С. 422.
6. Бурмистров С. Н., Дубовский Л. Б. // ФТТ. 1984. Т. 26. С. 1719.
7. Сулов И. М. // ФТТ. 1988. Т. 30. С. 1523. 1989. Т. 31. С. 278.
8. De Gennes R. G. // Rev. Mod. Phys. 1964. V. 36. P. 225.

9. Bednorz J. G., Müller K. A. // Z. Phys. B. 1986. V. 64. P. 189.
10. Абрикосов А. А., Горьков Л. П., Дзялошинский И. Е. // Методы квантовой теории поля в статистической физике. М.: Физматгиз, 1962. С. 415.
11. Куржниц Д. А., Максимов Е. Г. // ФММ. 1966. Т. 22. С. 520.
12. Лифшиц И. М. // УФН. 1964. Т. 83. С. 617.
13. Каган Ю. М., Дубовский Л. Б. // ЖЭТФ. 1977. Т. 72. С. 646.
14. Займан Дж. // Принципы теории твердого тела. М.: Мир, 1974. С. 182.
15. Мейерович А. Э., Мейерович Б. Э. // ЖЭТФ. 1987. Т. 93. С. 1461.
16. Андреев А. Ф. // Письма в ЖЭТФ. 1987. Т. 46. С. 463.
17. Владимиров В. С. // Уравнения математической физики. М.: Наука, 1967. С. 266.
18. Hirsh J. E., Scalapino D. E. // Phys. Rev. Lett. 1986. V. 56. P. 2732.
19. Дзялошинский И. Е. // ЖЭТФ. 1987. Т. 93. С. 1487.

Физический институт
им. П. Н. Лебедева Академии наук СССР

Поступила в редакцию
27.VI.1988

ON MECHANISM OF SUPERCONDUCTIVITY OF TWINNING PLANES

I. M. Suslov

The problem of calculating T_c of a superconductor with a plane defect is solved under some general assumptions regarding the defect. The equivalence of the superconducting properties of a topological defect of the twinning plane type and those of a scattering defect of the foreign atom monolayer type is proven. A set of nonlinear equations for localized superconductivity is derived. It is shown that along with the Buzdin – Bulayevsky [2] pattern a principally different one is possible which completely modifies the interpretation of the experimental data of Khaikin and Khlyustikov [1]. In contrast to the first interpretation this leads to reasonable values of the macroscopic parameters. Sets of periodically distributed plane defects are investigated. The possibility of attaining high T_c values in such systems at the expense of Van-Hove singularities in the spectrum of two-dimensional Tamm zones is discussed.