ЖЭТФ, 2009, том 136, вып. 2 (8), стр. 272–281

ВЕРХНЕЕ КРИТИЧЕСКОЕ ПОЛЕ H_{c2} В АНИЗОТРОПНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКАХ С ПЕРЕМЕННОЙ ПЛОТНОСТЬЮ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА. ПРИМЕНЕНИЕ ТЕОРИИ К ДОПИРОВАННОМУ MgB_2

М. Е. Палистрант[*], *И. Д. Чеботарь, В. А. Урсу*

Институт прикладной физики академии наук Молдовы
2028, Кишинев, Молдова

Поступила в редакцию 28 января 2009 г.

Построена теория магнитных свойств двухзонного сверхпроводника с переменной плотностью носителей заряда. Определено верхнее критическое поле $H_{c2}^{(ab)}$, параллельное плоскости ab, и $H_{c2}^{(c)}$, параллельное оси **c** во всем температурном интервале $0 < T < T_c$. Выявлено значительное увеличение верхнего критического поля $H_{c2}^{(ab)}$ по сравнению с $H_{c2}^{(c)}$ из-за сильной анизотропии системы. Получена также анизотропия коэффициента $\gamma_H = H_{c2}^{(ab)}/H_{c2}^{(c)}$ как функция температуры для случая чистого MgB_2, а также химического потенциала при замещении атомов Mg и B другими химическими элементами. Обнаружена корреляция между изменением температуры сверхпроводящего перехода с ростом химического потенциала и магнитными критическими полями $H_{c2}^{(ab)}$ и $H_{c2}^{(c)}$. Определено также влияние допирования на магнитную анизотропию.

PACS: 74.25.Ha

1. ВВЕДЕНИЕ

Последние годы интенсивно ведутся исследования (теоретические и экспериментальные) различных физических свойств многозонных сверхпроводников, обладающих сильной анизотропией. Ярким примером такого сверхпроводника является диборид магния (MgB_2). Сверхпроводимость в этом соединении была открыта в 2001 г. группой японских ученых [1] ($T_c \sim 40$ К). Это открытие вызывало большой интерес, главным образом, благодаря обнаружению высоких значений сверхпроводящих характеристик в этом соединении при его достаточно простой кристаллической структуре.

Дальнейшие исследования показали, что сверхпроводящие свойства MgB_2 невозможно описать, используя известную теорию сверхпроводимости БКШ — Боголюбова–Элиашберга, предназначенную для объяснения сверхпроводящих свойств изотропных систем. Соединение MgB_2 является многозонным сверхпроводником. Перекрытие на поверхности Ферми энергетических полос приводит к большому количеству аномалий термодинамических и кинетических свойств этого соединения по сравнению с однозонными системами.

В MgB_2 имеются две энергетические щели Δ_1 и Δ_2 при фононном механизме сверхпроводимости, при этом выполняются соотношения $2\Delta_1/T_c > 3.5$ и $2\Delta_2/T_c < 3.5$, а также наблюдается малое значение относительного скачка электронной теплоемкости в точке $T = T_c$ (меньше значения 1.43, присущего однозонным сверхпроводникам, в двухзонном MgB_2 этот скачок равен 0.8), положительная кривизна верхнего критического поля H_{c2} вблизи температуры сверхпроводящего перехода, нарушение теоремы Андерсона при наличии немагнитной примеси и др. Эти и многие другие результаты являются классическими для двухзонной модели [2–4]. В ряде работ (например, [5, 6]), рекомендуется применять модель Москаленко [7] с перекрывающимися энергетическими полосами на поверхности Ферми (см. также работу [8], которая была предложена независимо) для описания сверхпроводящих свойств двухзон-

[*]E-mail: mepalistrant@yandex.ru

ных систем. Эта модель [7, 8] оказалась очень удачной для объяснения поведения физических свойств MgB_2 и продемонстрировала хорошее согласие двухзонной теории с экспериментальными данными. В качестве примера можно привести недавние работы авторов [9, 10], в которых ярко демонстрируется поведение термодинамических величин при допировании MgB_2 различными химическими элементами, способствующими введению электронов или дырок в рассматриваемую систему. В этих работах в основу исследований положены два механизма — эффект заполнения энергетических зон электронами и рассеяние электронов на примеси.

В соответствии с зонной структурой [11], MgB_2 может быть представлен на поверхности Ферми двумя энергетическими зонами разной размерности: двумерной зоной σ и трехмерной зоной π. В дальнейшем мы будем называть эти зоны соответственно 1 и 2.

Описанная выше анизотропия проявляется в поведении ряда магнитных характеристик. Многочисленные экспериментальные исследования магнитных свойств MgB_2 показывают наличие анизотропии верхнего критического поля H_{c2} (см., например, [12–15]). Верхнее критическое поле $H_{c2}^{(ab)}$, которое соответствует магнитному полю в плоскости ab, превышает в несколько раз значение $H_{c2}^{(c)}$, которое отвечает критическому магнитному полю параллельному оси c.

Отметим, что верхнее критическое поле H_{c2} на основе микроскопической теории сверхпроводимости для чистого однозонного сверхпроводника было рассчитано Горьковым [16] при температурах близких к T_c. В дальнейшем эта теория была обобщена Маки и Цудзуки для однозонных систем на весь температурный интервал $0 < T < T_c$ [17].

Развитие двухзонной сверхпроводимости (после публикации работ [7, 8]) содержало в себе также и необходимость построения микроскопической теории для верхнего критического поля H_{c2} чистого двухзонного сверхпроводника. Такая теория впервые была предложена Палистрант и Дедю [18] задолго до открытия сверхпроводимости в MgB_2.

Результаты этой работы показали, что учет лишь одного типа анизотропии (перекрытие двух энергетических зон на поверхности Ферми) приводит к качественно новому результату: возникновению положительной кривизны в зависимости H_{c2} от температуры [4, 18]. Этот результат возникает благодаря различию средних скоростей электронов на различных полостях поверхности Ферми рассматриваемых сферических зон.

Таким образом, наличие анизотропии в системе требует построения новой теории, в частности, для магнитных свойств интерметаллического соединения MgB_2.

В литературе имеются две теоретические работы, описывающие H_{c2} двухзонного чистого сверхпроводника с анизотропными свойствами присущими MgB_2.

Это работы [19] и [20]. В каждой из этих работ используется свой подход и своя методика. Так, для определения H_{c2} в работе [19] используется многозонная формулировка квазиклассической теории Эленбергера [21]. Благодаря сильной анизотропии возникает существенное отличие $H_{c2}^{(ab)}$ от $H_{c2}^{(c)}$ и возможность получить для чистого вещества MgB_2 результаты близкие к экспериментальным. Авторы работы [20] показывают, что $H_{c2}^{(ab)}/H_{c2}^{(c)}$ растет с убылью температуры.

Данная работа построена на классической теории сверхпроводимости анизотропной двухзонной системы. При этом развит подход, который позволяет учитывать изменение плотности носителей заряда. Имеются также работы, посвященные «грязным» системам, — мы их не рассматриваем.

Цель работы — построить микроскопическую теорию верхнего критического поля H_{c2} двухзонного сверхпроводника, справедливую в температурном интервале $0 < T < T_c$, и применить ее для описания температурной зависимости $H_{c2}^{(ab)}$ и $H_{c2}^{(c)}$ в MgB_2, а также определить коэффициент анизотропии $\gamma_H = H_{c2}^{(ab)}/H_{c2}^{(c)}$ как функцию температуры для соединения MgB_2, в котором плотность носителей заряда не является постоянной величиной.

Таким образом, мы рассматриваем систему, в которой возможно замещение атомов Mg и B другими химическими элементами, что позволяет увеличивать или уменьшать количество свободных электронов или дырок в системе. Фактически будет исследоваться влияние механизма заполнения энергетических зон на величины $H_{c2}^{(ab)}$ и $H_{c2}^{(c)}$.

Работа построена следующим образом.

В разд. 2 рассматривается случай $\mathbf{H} \parallel ab$, приводится уравнение Гинзбурга–Ландау для двухзонной системы с энергетическими зонами разной размерности и выполняется ряд операций для упрощения задачи. Приведен также способ обрезания интегралов по энергии в соответствии с переменной плотностью носителей заряда и электрон-фононным механизмом сверхпроводимости в MgB_2.

В разд. 3 получены уравнения для определения температуры сверхпроводящего перехода T_c и критического магнитного поля $H_{c2}^{(ab)}$. Эти уравнения дополняются соотношением для определения химического потенциала. Получены асимптотические выражения для функций, входящих в уравнение для $H_{c2}^{(ab)}$ в области температур близких к нулю и вблизи температуры сверхпроводящего перехода, выведены уравнения для величины $H_{c2}^{(ab)}$ и найдены их аналитические решения в указанных выше температурных областях.

Исследования выполнены на основании методики Маки и Цудзуки [16, 17], обобщенной на случай анизотропной двухзонной системы типа MgB_2 с переменной плотностью носителей заряда. Такой подход позволяет проследить влияние замещения атомов Mg и B другими химическими элементами периодической системы.

Наряду с этим, в разд. 4 приведены результаты для $H_{c2}^{(c)}$ — критического поля, направленного вдоль оси z. Аналитические формулы, определяющие $H_{c2}^{(c)}$ так же, как для $H_{c2}^{(ab)}$, приведены для области низких температур ($T \ll T_c$) и вблизи критической температуры для двухзонной допированной системы.

В разд. 5 приводятся численные решения и проводится анализ результатов зависимости величин $H_{c2}^{(ab)}$ и $H_{c2}^{(c)}$ от температуры и переменной концентрации носителей заряда, обязанной введению в MgB_2 примеси замещения различной валентности. Исследуется температурная анизотропия, а также анизотропия, связанная с изменением химического потенциала.

2. СИСТЕМА УРАВНЕНИЙ ДЛЯ ПАРАМЕТРОВ ПОРЯДКА $\Delta_m^*(\mathbf{r})$ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ H, НАПРАВЛЕННОМ ПАРАЛЛЕЛЬНО ПЛОСКОСТИ ab

Теория строится на основе классических принципов свойств сверхпроводников второго рода в магнитном поле [16, 17, 22]. Рассмотрим внешнее магнитное поле $\mathbf{H}$, параллельное оси y на плоскости ab. В этом случае для компонент векторного потенциала получаем

$$A_x = -\frac{H_0}{2}(x + x'), \quad A_y = A_z = 0.$$

В области значений $\mathbf{H} \to \mathbf{H}_0 = \mathbf{H}_{c2}$ параметр порядка $\Delta_m \to 0$ и можно ограничиться уравнением линейным по величине Δ_m^*. В случае двухзонной системы уравнение Гинзбурга – Ландау можно представить в виде результата работы [22]

$$\Delta_m^*(\mathbf{r}) = \sum_n V_{mn} \frac{1}{\beta} \sum_\omega \int d\mathbf{r}' \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{q}} g_n^0(\mathbf{k}, \omega) \times \\ \times g_n^0(\mathbf{q}, -\boldsymbol{\kappa}, -\omega) \Delta_n^*(\mathbf{r}') e^{2i\varphi(\mathbf{r}',\mathbf{r})} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}'-\mathbf{r})}, \quad (1)$$

$$g_n^0(\mathbf{k}, \omega) = [i\omega - \xi_n(k)]^{-1}, \quad (2)$$

где g_n^0 — электронная функция Грина нормального состояния в отсутствие магнитного поля, $\omega = \pi T(2\nu + 1)$ — мацубаровская частота, ν — целые числа, ξ_n — электронная энергия в n-ой зоне, V_{mn} — константа внутризонного ($m = n$) и межзонного электрон-электронного взаимодействия ($m \neq n$). Фазовый множитель $\varphi(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ при указанном выше направлении магнитного поля имеет вид

$$\varphi(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int_{\mathbf{r}'}^{\mathbf{r}} A(\mathbf{l})\, d\mathbf{l} = eH_0(x + x')(z - z'). \quad (3)$$

Представим закон дисперсии соответственно для σ- и π-зон:

$$\xi_1(\mathbf{k}) = \xi_1^0(\mathbf{k}) + \frac{k_z^2}{2M}, \quad \xi_2(\mathbf{k}) = \zeta_2 + \frac{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}{2m_2} - \mu,$$

где

$$\xi_1^0(\mathbf{k}) = \zeta_1 + \frac{k_x^2 + k_y^2}{2m_1} - \mu, \quad M \gg m_1. \quad (4)$$

Такой выбор закона дисперсии отвечает наличию слабой дисперсии энергии электрона первой зоны в направлении оси z и изотропному закону дисперсии во второй зоне. Подставив в уравнение (1) определение (2), выполним интегрирование по энергии в соответствии с законами дисперсии (4): по цилиндрической поверхности Ферми в первой зоне и сферической — во второй. Учитывается отличие проекции скоростей электронов на соответствующие оси для каждой зоны: в первой зоне $\nu_{1x} = \nu_1 \cos\varphi$, $\nu_{1y} = \nu_1 \sin\varphi$, во второй зоне $\nu_{2x} = \nu_2 \cos\theta$, $\nu_{2y} = \nu_2 \sin\theta \cos\varphi$, $\nu_{2z} = \nu_2 \sin\theta \sin\varphi$. Выполняя далее интегрирование частично по координатным переменным $\mathbf{r}'$ и $\mathbf{q}$, а также суммирование по ω, приведем систему уравнений (1) к виду

$$\Delta_1^*(x) = \lambda_{11} \frac{2T}{\nu_1} \int_1^\infty \frac{du}{\sqrt{u^2 - 1}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Delta_1^*(x)\, dx'}{\operatorname{sh} \dfrac{2\pi T |x - x'| u}{\nu_1}} \times \\ \times \frac{\sin\left(\tilde{\varepsilon} eH_0 u(x^2 - x'^2)\right)}{\tilde{\varepsilon} eH_0 u(x^2 - x'^2)} \theta\left(|x - x'| - \delta_{11}\right) + \\ + V_{12} N_2 \frac{\pi T}{\nu_2} \int_1^\infty \frac{du}{u} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx' \Delta_2^*(x')}{\operatorname{sh} \dfrac{2|x - x'| \pi T u}{\nu_2}} \times \\ \times J_0\left[(x^2 - x'^2) eH_0 \sqrt{u^2 - 1}\right] \theta\left(|x - x'| - \delta_{12}\right), \quad (5)$$

$$\Delta_2^*(x) = \frac{2T}{\nu_1} \int_1^\infty \frac{du}{\sqrt{u^2-1}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Delta_1^*(x)\,dx'}{\operatorname{sh}\dfrac{2\pi T|x-x'|u}{\nu_1}} \times$$
$$\times \frac{\sin\left(\tilde{\varepsilon} e H_0 u (x^2 - x'^2)\right)}{\tilde{\varepsilon} e H_0 u (x^2 - x'^2)} \theta\left(|x-x'| - \delta_{21}\right) +$$
$$+ \frac{\pi T}{\nu_2} \int_1^\infty \frac{du}{u} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx'\,\Delta_2^*(x')}{\operatorname{sh}\dfrac{2|x-x'|\pi T u}{\nu_2}} \times$$
$$\times J_0\left[(x^2 - x'^2) e H_0 \sqrt{u^2-1}\right] \theta\left(|x-x'| - \delta_{22}\right), \quad (6)$$

где λ_{nm} — константы электрон-фононного взаимодействия, перенормированные в двухзонной теории с сильной связью и с учетом кулоновского электрон-электронного взаимодействия [9], θ — ступенчатая функция, соответствующая обрезанию интегралов в координатном пространстве, а анизотропные величины δ_{ij} отвечают обрезанию интегралов по энергии в импульсном пространстве. В формулах (5), (6) $\tilde{\varepsilon} = p_0 \varepsilon / m_1 \nu_1$ — малый параметр, а J_0 — функция Бесселя.

При $\lambda_{11}\lambda_{22} \gg \lambda_{12}\lambda_{21}$ решение для параметров порядка $\Delta_n(x)$ можно выбрать в виде

$$\Delta_1(x) = e^{-\tilde{\varepsilon} e H_0 x^2} \Delta_1, \quad \Delta_2(x) = e^{-e H_0 x^2} \Delta_2. \quad (7)$$

Воспользовавшись решением (7) и выполнив в системе уравнений (5), (6) ряд преобразований (см. Приложение А в работе [23]), приведем ее к виду

$$\begin{aligned} \Delta_1^* &= \Delta_1^* \lambda_{11} \xi^{(1)}(T_c) + \Delta_1^* \lambda_{11} \left[\xi^{(1)}(T) - \xi^{(1)}(T_c)\right] - \\ &- \lambda_{11} f_{11}(\rho_1 \tilde{\varepsilon}) \Delta_1^* + \tilde{\lambda}_{12} \Delta_2^* \xi^{(2)}(T_c) + \\ &+ \tilde{\lambda}_{12} \left[\xi^{(2)}(T) - \xi^{(2)}(T_c)\right] \Delta_2^* - \tilde{\lambda}_{12} f_{12}(\rho_2 \tilde{\varepsilon}) \Delta_2^*, \\ \Delta_2^* &= \tilde{\lambda}_{21} \Delta_1^* \xi^{(1)}(T_c) + \tilde{\lambda}_{21} \Delta_1^* \left[\xi^{(1)}(T) - \xi^{(1)}(T_c)\right] - \\ &- \tilde{\lambda}_{21} f_{21}(\rho_1 \tilde{\varepsilon}) \Delta_1^* + \lambda_{22} \Delta_2^* \xi^{(2)}(T_c) + \\ &+ \lambda_{22} \left[\xi^{(2)}(T) - \xi^{(2)}(T_c)\right] - \lambda_{22} f_{22}(\rho_2 \tilde{\varepsilon}) \Delta_2^*, \end{aligned} \quad (8)$$

где

$$\begin{aligned} \xi^{(n)}(T) &= \int_{-d_n}^{d_{cn}} d\varepsilon \frac{\operatorname{th}(\beta\varepsilon/2)}{2\varepsilon}, \\ \xi^{(n)}(T_c) &= \int_{-d_n}^{d_{cn}} d\varepsilon \frac{\operatorname{th}(\beta_c\varepsilon/2)}{2\varepsilon}, \end{aligned} \quad (9)$$

$$\tilde{\lambda}_{12} = \tilde{\varepsilon}^{1/2} \sqrt{\frac{2}{\tilde{\varepsilon}+1}}, \quad \tilde{\lambda}_{21} = \sqrt{\frac{2}{\tilde{\varepsilon}+1}}\, \lambda_{21},$$

$\beta = 1/T$, $\beta_c = 1/T_c$, а значения $d_n = \mu - \zeta_n$, $d_{cn} = \zeta_{cn} - \mu$ — параметры обрезания интегралов по энергии при переменной плотности носителей заряда, μ — химический потенциал. При фононном механизме сверхпроводимости (случай MgB_2) эти параметры имеют вид

$$\begin{aligned} d_n &= \begin{cases} \mu - \zeta_n & \text{при} \quad \mu - \zeta_n \le \omega_n, \\ \omega_n & \text{при} \quad \mu - \zeta_n > \omega_n, \end{cases} \\ d_{cn} &= \begin{cases} \omega_n & \text{при} \quad \zeta_{cn} - \mu > \omega_n, \\ \zeta_{cn} - \mu & \text{при} \quad \zeta_{cn} - \mu < \omega_n. \end{cases} \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь ω_n — характерная фононная частота, соответствующая n-й энергетической зоне. Функции f_{nm}, содержащие зависимость от магнитного поля, имеют вид

$$f_{11} = \frac{(\tilde{\varepsilon}\rho_1)^{-1/2}}{\pi} \int_{-1}^{1} dy \int_1^\infty \frac{du}{\sqrt{u^2-1}} \times$$
$$\times \int_0^\infty \frac{d\zeta}{\operatorname{sh}(\zeta u / \tilde{\varepsilon}^{1/2} \rho_1^{1/2})} \times$$
$$\times \left(1 - \exp\left(-\frac{\zeta^2}{2}(1 + u^2 y^2)\right)\right), \quad (11)$$

$$f_{12} = \rho_2^{-1/2} \int_0^\pi d\varphi \int_1^\infty \frac{du}{u} \int_0^\infty \frac{d\zeta}{\operatorname{sh}(\zeta u / \rho_2^{1/2})} \times$$
$$\times \left(1 - \exp\left(\frac{-\zeta^2 (1+\tilde{\varepsilon})}{4} + \right.\right.$$
$$\left.\left. + \frac{\zeta^2 \left(\tilde{\varepsilon} - 1 + 2i\sqrt{u^2-1}\cos\varphi\right)^2}{4(1+\tilde{\varepsilon})}\right)\right), \quad (12)$$

$$f_{21} = \frac{\rho_1^{-1/2}}{\pi} \int_{-1}^{1} dy \int_1^\infty \frac{du}{\sqrt{u^2-1}} \int_0^\infty \frac{d\zeta}{\operatorname{sh}(\zeta u / \rho_1^{1/2})} \times$$
$$\times \left(1 - \exp\left\{\frac{-\zeta^2 (1+\tilde{\varepsilon})}{4} \times \right.\right.$$
$$\left.\left. \times \left[1 - \left(\frac{1 - \tilde{\varepsilon} - 2i\tilde{\varepsilon} u y}{1+\varepsilon}\right)^2\right]\right\}\right), \quad (13)$$

$$f_{22} = \rho_2^{-1/2} \int_1^\infty \frac{du}{u} \int_0^\infty \frac{d\zeta}{\operatorname{sh}(\zeta u / \rho_2^{1/2})} \times$$
$$\times \left[1 - \exp\left\{-\frac{\zeta^2}{4}(u^2+1)\right\} I_0\left(\frac{\zeta^2(u^2-1)}{4}\right)\right]. \quad (14)$$

В определения функций f_{mn} введен безразмерный параметр $\rho_n^{1/2} = \nu_n (eH_0)^{1/2} / 2\pi T$, который содержит критическое поле $H_0 = H_{c2}^{(ab)}$ и скорость электронов v_n на соответствующей полости поверхности Ферми.

3. УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ВЕРХНЕГО КРИТИЧЕСКОГО ПОЛЯ $H_{c2}^{(ab)}$ И КРИТИЧЕСКОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО ПЕРЕХОДА T_c. АНАЛИТИЧЕСКИЕ РЕШЕНИЯ

Дополним систему уравнений (8), являющуюся основой для определения верхнего критического поля $H_0 = H_{c2}^{(ab)}$, системой уравнений для определения температуры сверхпроводящего перехода. В пределе $H \to \infty$ система уравнений для параметров порядка Δ_{n0}^* имеет вид

$$\begin{aligned} \Delta_{10}^* &= \lambda_{11}\Delta_{10}^*\xi^{(1)}(T) + \lambda_{12}\Delta_{20}^*\xi^{(2)}(T), \\ \Delta_{20}^* &= \lambda_{21}\Delta_{10}^*\xi^{(1)}(T) + \lambda_{22}\Delta_{20}^*\xi^{(2)}(T). \end{aligned} \tag{15}$$

Из условия разрешимости этой системы для температуры сверхпроводящего перехода $T = T_c$ получаем

$$a\xi^{(1)}(T_c)\xi^{(2)}(T_c) - \lambda_{11}\xi^{(1)}(T_c) - \\ - \lambda_{22}\xi^{(2)}(T_c) + 1 = 0, \tag{16}$$

где $a = \lambda_{11}\lambda_{22} - \lambda_{12}\lambda_{21}$, а $\xi^{(n)}(T)$ дано формулой (9). Приравнивая нулю определитель системы уравнений (8) и используя уравнение (16), получаем уравнение для определения верхнего критического поля $H_0 = H_{c2}^{(ab)}$ для системы в магнитном поле $\mathbf{H} \parallel ab$. Это уравнение имеет вид

$$\lambda_{11}\lambda_{22}\tilde{F}_{11}\tilde{F}_{22} - \tilde{\lambda}_{12}\tilde{\lambda}_{21}\tilde{F}_{12}\tilde{F}_{21} + \\ +\lambda_{11}\left[1-\lambda_{22}\xi^{(2)}(T_c)\right]\tilde{F}_{11} + \lambda_{22}\left[1-\lambda_{11}\xi^{(1)}(T_c)\right]\tilde{F}_{22} + \\ + \tilde{\lambda}_{12}\tilde{\lambda}_{21}\xi^{(2)}(T_c)\tilde{F}_{21} + \tilde{\lambda}_{21}\tilde{\lambda}_{12}\xi^{(1)}(T_c)\tilde{F}_{12} = 0, \tag{17}$$

где

$$\tilde{F}_{mn} = f_{mn} + \xi^{(n)}(T_c) - \xi^{(n)}(T), \tag{18}$$

$$\begin{aligned} f_{mn} &= f_{mn}(\rho_n, \tilde{\varepsilon}), \\ \xi^{(n)}(T_c) - \xi^{(n)}(T) &= -\ln(T_c/T). \end{aligned} \tag{19}$$

Для изучения сверхпроводящих свойств системы с переменной плотностью носителей заряда необходимо уравнение (17) дополнить соотношением, которое определяет химический потенциал μ (плотность носителей заряда $\tilde{n}$) [24, 25]:

$$\tilde{n} = \sum_m N_m \int\limits_{-d_m}^{d_{cm}} d\varepsilon_m \left[\frac{E_m(\mathbf{k}) - |\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu|}{E_m(\mathbf{k})} + \right. \\ \left. + \frac{2|\varepsilon_m(\mathbf{k}) - \mu|}{E_m(\mathbf{k})}\,\frac{1}{1+\exp(\beta E_m(\mathbf{k}))}\right]. \tag{20}$$

Полагая d_m/T_c, $d_{mc}/T_c \gg 1$, на основании соотношения (20) получаем

$$\tilde{n} = \sum_n N_n\left[\zeta_{cn} - \zeta_n - |\zeta_{cn} - \mu| + |\zeta_n - \mu|\right]. \tag{21}$$

Система уравнений (16), (17) и (21) позволяет определить значение критической температуры T_c и верхнего критического поля $H_{c2}^{(ab)}(T)$ при любой плотности носителей заряда. Если мы фиксируем химический потенциал μ (плотность носителей заряда $\tilde{n}$) на уровне его значения для чистого MgB_2 (скажем $\mu = \mu_0$, $\tilde{n} = \tilde{n}_0$), то указанная система уравнений позволит нам определить температуру сверхпроводящего перехода T_c и верхнее критическое поле $H_{c2}^{(ab)}$ чистого MgB_2.

Уравнение (17) содержит сложные интегральные зависимости f_{mn} (11)–(14), в результате чего решение такого уравнения возможно во всем температурном интервале $0 < T < T_c$ только лишь численными методами. Однако можно найти аналитические решения этого уравнения в двух предельных случаях: вблизи критической температуры $\tilde{\varepsilon}\rho_n \ll 1$ при $T_c - T \ll T_c$ и в области низких температур $\tilde{\varepsilon}\rho_n \gg 1$ при $T \ll T_c$. (Вычисления асимптотик функций f_{mn} см. в Приложении В работы [23].) Рассмотрим по отдельности каждую из этих областей.

а) Вблизи температуры сверхпроводящего перехода ($T_c - T \ll T_c$), $\tilde{\varepsilon}\rho_n \ll 1$, $\rho_n \ll 1$ для функций f_{mn} ($m, n = 1, 2$) на основании определений (11)–(14) получаем

$$\begin{aligned} f_{11}(\rho_1, \tilde{\varepsilon}) &= \frac{35}{24}\varsigma(3)\tilde{\varepsilon}\rho_1 - \\ &- \frac{109\cdot 31}{40\cdot 16}\varsigma(5)\tilde{\varepsilon}^2\rho_1^2 + \ldots, \\ f_{12}(\rho_2) &= \frac{7}{6}\varsigma(3)\rho_2 - \frac{31}{10}\varsigma(5)\rho_2^2 + \ldots, \\ f_{21}(\rho_1, \tilde{\varepsilon}) &= \frac{7(3+2\tilde{\varepsilon})}{12(1+\tilde{\varepsilon})}\varsigma(3)\tilde{\varepsilon}\rho_1 - \\ &- \frac{31\left(25 + 80\tilde{\varepsilon} + 4\tilde{\varepsilon}^2\right)}{160(1+\tilde{\varepsilon})^2}\varsigma(5)\tilde{\varepsilon}^2\rho_1^2 + \ldots, \\ f_{22}(\rho_2) &= \frac{7}{6}\varsigma(3)\rho_2 - \frac{31}{10}\varsigma(5)\rho_2^2 + \ldots, \end{aligned} \tag{22}$$

где $\varsigma(x)$ — дзета-функция Римана.

б) Вблизи нулевой температуры $T \ll T_c$, $\tilde{\varepsilon}\rho_n \gg 1$, $\rho_n \gg 1$ асимптотики функции f_{mn} имеют вид

$$
\begin{gathered}
f_{11}(\rho_1,\tilde\varepsilon)=\ln\left(\kappa\sqrt{\tilde\varepsilon\rho_1\gamma}\right)-\\
-\frac{1}{\pi^2\rho_1\tilde\varepsilon}\left[\varsigma'(2)-\frac{\varsigma(2)}{2}\ln\left(\frac{\tilde\varepsilon\rho_1\gamma\pi^2}{2e_0^{1/2}}\right)\right]+\ldots,\\
f_{12}(\rho_2,\tilde\varepsilon)=\ln\left(\frac{2\sqrt{2\rho_2\gamma}}{e_0}\right)-\\
-\frac{1}{\pi^2\rho_2}\left[\varsigma'(2)-\frac{\varsigma(2)}{2}\ln\left(\frac{\rho_2\gamma\pi\,(1+\tilde\varepsilon)}{4}\right)\right]+\ldots,\\
f_{21}(\rho_1,\tilde\varepsilon)=\ln\left(c\,(\tilde\varepsilon)\sqrt{\tilde\varepsilon\rho_1\gamma}\right)-\frac{1+\tilde\varepsilon}{2\pi^2\rho_1\tilde\varepsilon^{3/2}}\times\\
\times\left[\varsigma'(2)-\frac{\varsigma(2)}{2}\left(\ln\left(\frac{\tilde\varepsilon\rho_1\gamma\pi^2}{1+\tilde\varepsilon}\right)-\frac{\tilde\varepsilon}{2}\right)\right]+\ldots,\\
f_{22}(\rho_2)=\ln\left(\frac{2\sqrt{2\rho_2\gamma}}{e_0}\right)-\\
-\frac{1}{\pi^2\rho_2}\left[\varsigma'(2)-\frac{\varsigma(2)}{2}\ln\left(\frac{\rho_2\gamma\pi^2)}{2}\right)\right]+\ldots,\\
\kappa=\frac{1+\sqrt2}{\sqrt2}\,e_0^{1-\sqrt2}\approx1.12,
\end{gathered}
\tag{23}
$$

$$
c\,(\tilde\varepsilon)=\frac{\sqrt{2.41\left(1+\sqrt{1+\tilde\varepsilon^2}\,\right)}}{\sqrt{1+\tilde\varepsilon}}\times\\
\times\exp\left(-0.205+\frac{1}{\tilde\varepsilon}\sqrt{1+\frac{1}{\tilde\varepsilon^2}}\right),
$$

e_0 — основание натурального логарифма, $C=\ln\gamma$ — постоянная Эйлера.

Перейдем к некоторым упрощениям, полагая $\xi^{(1)}(T)=\xi^{(2)}(T)=\xi(T)$ и $\xi_1(T_c)=\xi_2(T_c)=\xi(T_c)$, а затем рассмотрим по отдельности каждую из приведенных выше температурных областей.

а) $\tilde\varepsilon\rho_n\ll1$, $\rho_1\ll1$, $T_c-T\ll T_c$. В этом случае в уравнении (17) можно отбросить члены, содержащие произведения $f_{11}f_{22}$ и $f_{12}f_{21}$, поскольку при них имеются коэффициенты $\lambda_{11}\lambda_{22}$, $\lambda_{12}\lambda_{21}$, которые для MgB_2 являются малыми (гораздо меньше единицы). Это приближение равнозначно пренебрежению членами порядка $\rho_n^3\ll1$. При этом уравнение (17) приобретает вид

$$
\lambda_{11}f_{11}(\rho_1,\tilde\varepsilon)+\lambda_{22}f_{22}(\rho_2)+\\
+\xi(T_c)\left(\tilde\lambda_{12}\tilde\lambda_{21}f_{21}(\rho_1,\tilde\varepsilon)-\lambda_{11}\lambda_{22}f_{11}(\rho_1,\tilde\varepsilon)\right)+\\
+f_{22}(\rho_2)\left[\lambda_{22}-a\xi(T_c)\right]-\tilde\nu\ln(T_c/T)=0, \tag{24}
$$

где

$$
\tilde\nu=a\varphi\pm\sqrt{(\lambda_{11}-\lambda_{22}-a\varphi)^2-4a\psi},\\
a=\lambda_{11}\lambda_{22}-\lambda_{12}\lambda_{21}. \tag{25}
$$

Значения функций φ и ψ вытекают из определения температуры сверхпроводящего перехода, из обрезания интегралов по энергии (10) и определения химического потенциала μ (21). Возникают соотношения:

1. при $\mu-\varsigma_2<\omega_0$, $\varsigma_{c1}-\mu>\omega_0$ имеем

$$
\varphi=\frac12\ln\frac{\mu-\varsigma_2}{\omega_0},\quad \psi=1-\lambda_{22}\frac12\ln\frac{\mu-\varsigma_2}{\omega_0},
$$

2. при $\mu-\varsigma_2>\omega_0$, $\varsigma_{c1}-\mu>\omega_0$ имеем

$$
\varphi=0,\quad\psi=1,
$$

3. при $\mu-\varsigma_2>\omega_0$, $\varsigma_{c1}-\mu<\omega_0$ имеем

$$
\varphi=\frac12\ln\frac{\varsigma_1-\mu}{\omega_0},\quad \psi=1-\lambda_{11}\frac12\ln\frac{\varsigma_{c1}-\mu}{\omega_0}. \tag{26}
$$

При этом в точках $\mu=\varsigma_2$ и $\mu=\varsigma_{c1}$, получаем соответственно,

$$
\xi_c=\frac{2\lambda_{11}+\lambda_{22}\pm\sqrt{(2\lambda_{11}-\lambda_{22})^2+8\tilde\lambda_{12}\tilde\lambda_{21}}}{2a},\\
\xi_c=\frac{\lambda_{11}+2\lambda_{22}\pm\sqrt{(\lambda_{11}-2\lambda_{22})^2+8\tilde\lambda_{12}\tilde\lambda_{21}}}{2a}. \tag{27}
$$

Подставляя в (17) разложения (22) и ограничившись квадратными членами по искомой величине $\rho_1=\nu_1eH_0/(2\pi T)^2$, получаем уравнение

$$
\tilde\alpha\rho_1^2+\tilde\beta\rho_1+\tilde\chi=0, \tag{28}
$$

где

$$
\begin{gathered}
\tilde\alpha=-\frac{31}{10}\varsigma(5)\left[\frac{\lambda_{22}-a\xi_c}{\lambda^4}-\right.\\
-\frac{\tilde\varepsilon^2}{16}\xi_c\left(\frac{109}{4}\lambda_{11}\lambda_{22}-\frac{\left(25+80\tilde\varepsilon+4\tilde\varepsilon^2\right)}{(1+\tilde\varepsilon)^2}\tilde\lambda_{12}\tilde\lambda_{21}\right)+\\
\left.+\frac{109}{64}\tilde\varepsilon^2\lambda_{11}\right],\\
\tilde\beta=\frac76\varsigma(3)\left[\frac{\lambda_{22}-a\xi_c}{\lambda^2}-\right.\\
\left.-\frac{\tilde\varepsilon}{2}\xi_c\left(\frac52\lambda_{11}\lambda_{22}-\frac{(3+2\tilde\varepsilon)}{2\,(1+\tilde\varepsilon)}\tilde\lambda_{12}\tilde\lambda_{21}\right)+\frac54\tilde\varepsilon\lambda_{11}\right],\\
\tilde\chi=-\tilde\nu\left(\theta+\frac{\theta^2}{2}\right).
\end{gathered}
\tag{29}
$$

Решение уравнения (28) с последующим разложением этого решения по величине $\theta=1-T/T_c$ определяет верхнее критическое поле $H_{c2}^{(ab)}(T)=H_0(T)$ вблизи температуры сверхпроводящего перехода:

$$
\rho_1=\frac{\tilde\nu}{\tilde\beta}\,\theta+\left(\frac{\tilde\nu\left(\tilde\beta^2-2\tilde\alpha\tilde\nu\right)}{2\tilde\beta^3}\right)\theta^2. \tag{30}
$$

Формулу (30) нетрудно преобразовать к виду

$$\tilde{\rho} = \rho_1 \lambda^{-1} \left(\frac{T}{T_c^0}\right)^{-2} = \left(\frac{\tilde{\nu}\theta}{\tilde{\beta}} + \right.$$
$$\left. + \left(\frac{\tilde{\nu}\left(\tilde{\beta}^2 - 2\tilde{\alpha}\tilde{\nu}\right)}{2\tilde{\beta}^3}\right)\theta^2\right)\lambda^{-1}\left(\frac{T}{T_c^0}\right)^{-2}. \quad (31)$$

Введем далее величину $\tilde{\rho} = \nu_1\nu_2 e H_0(T)/(2\pi T_c^0)^2$, которая выступает как безразмерное верхнее критическое поле ($\tilde{\rho} \sim H_0(T)$).

б) Область низких температур $T \ll T_c$, $\tilde{\varepsilon}\rho_n \gg 1$. Подставляя в уравнение (17) асимптотические формулы (23), с учетом основных членов разложения нетрудно получить уравнение, определяющее величину $H_0 = H_{c2}^{(ab)}$ в области низких температур:

$$\tilde{a}(\ln x)^2 + B\ln x + \overline{C} + F(T) = 0, \quad (32)$$
$$x = \sqrt{\tilde{\varepsilon}\gamma\rho_c},$$

где

$$\tilde{a} = \lambda_{11}\lambda_{22} - \tilde{\lambda}_{12}\tilde{\lambda}_{21}, \quad B = \tilde{a}\ln\frac{2\sqrt{2}}{e_0} + \tilde{\nu} - \Lambda,$$
$$\overline{C} = \Lambda\xi_c - \tilde{a}\ln\lambda +$$
$$+ \left(0.04\tilde{a} - \tilde{a}\ln\sqrt{\tilde{\varepsilon}} + \lambda_{11} - \lambda_{22} + \Lambda\right)\ln\sqrt{\lambda} +$$
$$+\lambda_{11}\ln\kappa - \left(0.4 - \tilde{a}\ln\sqrt{\tilde{\varepsilon}}\right)\left(\Lambda + \tilde{a}\xi_c - \lambda_{22}\right), \quad (33)$$
$$\Lambda = \tilde{\lambda}_{12}\tilde{\lambda}_{21}\ln c(\tilde{\varepsilon}) - \lambda_{11}\lambda_{22}\ln\kappa,$$
$$\rho_c = \frac{\nu_1\nu_2 e H_0}{(2\pi T_c)^2}.$$

Первые три члена в уравнении (32) не зависят от температуры, вся температурная зависимость содержится в функции $F(T)$, определяемой выражением

$$F(T) = \tilde{\lambda}_{12}\tilde{\lambda}_{21}\left(\xi(T_c) - \ln\left(x\sqrt{\lambda}\,c\left(\tilde{\varepsilon}\right)\right) + q_{21}\right)q_{12} -$$
$$- \left(\ln\frac{2\sqrt{2}\,x}{e_0\sqrt{\lambda\tilde{\varepsilon}}} - \xi_c\right)q_{21} -$$
$$- q_{22}\left(\left(\xi(T_c) - \ln\left(cx\sqrt{\lambda}\right)\right)\lambda_{11} - 1\right)\lambda_{22} +$$
$$+ q_{11}\lambda_{11}\left(\left(-\ln\frac{2\sqrt{2}\,x}{e_0\sqrt{\lambda\tilde{\varepsilon}}} + \xi(T_c) + q_{22}\right)\lambda_{22} - 1\right). \quad (34)$$

Здесь

$$q_{11}(T) = \frac{1}{\pi^2\rho_c\tilde{\varepsilon}\lambda}\left(\frac{T}{T_c}\right)^2 \times$$
$$\times \left[\varsigma'(2) - \frac{\varsigma(2)}{2}\ln\left(\frac{\tilde{\varepsilon}\rho_c\gamma\pi^2\lambda}{2e_0^{1/2}}\left(\frac{T_c}{T}\right)^2\right)\right],$$

$$q_{12}(T) = \frac{\lambda}{\pi^2\rho_c}\left(\frac{T}{T_c}\right)^2 \times$$
$$\times \left[\varsigma'(2) - \frac{\varsigma(2)}{2}\ln\left(\frac{\rho_c\gamma\pi^2\left(1+\tilde{\varepsilon}\right)}{4\lambda}\left(\frac{T_c}{T}\right)^2\right)\right],$$

$$q_{21}(T) = \frac{(1+\tilde{\varepsilon})}{2\pi^2\rho_c\lambda\tilde{\varepsilon}^{3/2}}\left(\frac{T}{T_c}\right)^2 \times$$
$$\times \left[\varsigma'(2) - \frac{\varsigma(2)}{2}\left(\ln\left(\frac{\tilde{\varepsilon}^2\rho_c\gamma\pi^2\lambda}{1+\tilde{\varepsilon}}\left(\frac{T_c}{T}\right)^2\right) - \frac{\tilde{\varepsilon}}{2}\right)\right],$$

$$q_{22}(T) = \frac{\lambda}{\pi^2\rho_c}\left(\frac{T}{T_c}\right)^2 \times$$
$$\times \left[\varsigma'(2) - \frac{\varsigma(2)}{2}\ln\left(\frac{\rho_c\gamma\pi^2}{2\lambda}\left(\frac{T_c}{T}\right)^2\right)\right].$$

Имеет смысл оценить изменение верхнего критического поля $H_0 = H_{c2}^{(ab)}$ при изменении плотности носителей заряда $\tilde{n}$. С этой целью мы рассмотрим случай $T = 0$. Решение уравнения (32) для допированного MgB_2 при $T = 0$ имеет вид

$$\rho_c = (\gamma\tilde{\varepsilon})^{-1}\exp\left\{-\frac{B \pm \sqrt{B^2 - 4\tilde{a}\overline{C}}}{\tilde{a}}\right\}. \quad (35)$$

На основании формулы (35) и определения величины $\tilde{\rho}$ имеем выражение для верхнего критического поля $H_{c2}^{(ab)}$ при $T = 0$:

$$\tilde{\rho} = (\gamma\tilde{\varepsilon})^{-1}\exp\left\{-\frac{B \pm \sqrt{B^2 - 4\tilde{a}\overline{C}}}{\tilde{a}}\right\}\left(\frac{T_c}{T_c^0}\right)^2. \quad (36)$$

Из формулы (36) нетрудно определить величину $H_{c2}^{(ab)}$ для чистого MgB_2. Для этого следует заменить величину μ на значение $\mu_0 = 0.74$ эВ, соответствующее чистому MgB_2.

4. СЛУЧАЙ H‖c. ОПРЕДЕЛЕНИЕ $H_{c2}^{(c)}$

Выше мы привели теорию верхнего критического поля $H_{c2} \parallel ab$ для двухзонной анизотропной системы. В MgB_2 значение верхнего критического поля максимально. Представляет интерес привести результаты вычисления минимального значения верхнего критического поля в интерметаллическом соединении MgB_2 при магнитном поле $\mathbf{H} \parallel \mathbf{c}$. Эта информация вместе с результатами для $H_{c2} \parallel ab$ позволит получить температурную зависимость коэффициента $\gamma_H = H_{c2}^{(ab)}/H_{c2}^{(c)}$, определяющего анизотропию верхнего критического поля.

В случае $\mathbf{H} \parallel \mathbf{c}$ можно выбрать $A_x = A_z = 0$, $A_y = H_0(x+x')/2$ и для фазового множителя имеем

$$2\varphi(\mathbf{r}', \mathbf{r}) = eH_0(x+x')(y'-y). \quad (37)$$

В рассматриваемом здесь случае $\mathbf{H} \parallel \mathbf{c}$ важную роль играет средняя скорость электронов в плоскости ab для обеих энергетических зон, а значение скорости в направлении оси z оказывается несущественным. Это обстоятельство избавляет нас от необходимости введения параметра, определяющего отклонение σ-зоны от двумерности, и делает задачу менее анизотропной (детально см. [26]). Приведем некоторые результаты. Критическое магнитное поле $H_{c2}^{(c)}$ определяется уравнением

$$a\tilde{f}_1(\rho_1)\tilde{f}_2(\rho_2) + [\lambda_{11} - a\xi_c]\,\tilde{f}_1(\rho_1) + \\ + [\lambda_{22} - a\xi_c]\,\tilde{f}_2(\rho_2) = 0, \quad (38)$$

где

$$\tilde{f}_1(\rho_1) = f_1(\rho_1) - \ln\left(\frac{T_c}{T}\right)^{1/2}, \\ \tilde{f}_2(\rho_2) = f_2(\rho_2) - \ln\frac{T_c}{T}, \quad (39)$$

$$f_1(\rho_1) = \frac{\rho_1^{-1/2}}{\pi}\int\limits_1^\infty \frac{du}{\sqrt{u^2-1}}\int\limits_0^\infty \frac{d\xi}{\operatorname{sh}\dfrac{\xi u}{\rho_1^{1/2}}} \times \\ \times\left[1 - \exp\left(-\frac{\xi^2 u^2}{2}\right)\right]. \quad (40)$$

Функция $f_2(\rho_2)$ соответствует выражению f_{22} (14). Асимптотики для функции $f_1(\rho_1)$ имеют вид

$$f_1(\rho_1) = \frac{7}{8}\varsigma(3)\rho_1 - \frac{31\cdot 3}{32}\varsigma(5)\rho_1^2 + \ldots \\ \text{при} \quad \rho_1 \ll 1, \\ f_1(\rho_1) = \frac{1}{4}\ln 2\gamma\rho_1 + \frac{1}{\rho_1}\,\frac{3}{2\pi^2}\varsigma(2) - \\ -\frac{1}{\rho_1^2}\,\frac{9}{4\pi^4}\varsigma(4) + \ldots \quad \text{при} \quad \rho_1 \gg 1. \quad (41)$$

Асимптотики для функции $f_2(\rho_2)$ совпадают с формулами (23) и (24).

Решение уравнения (38) с учетом приведенных выше асимптотик для функций $f_n(\rho_n)$ позволяет получить решение в области температуры, близкой к критической $(T_c - T) \ll T_c$, $\rho_n \ll 1$ и вблизи нулевой температуры $(T \ll T_c)$, $\rho_n \gg 1$. Эти решения имеют следующий вид:

при $\rho_n \ll 1$

$$\rho_1(T) = \frac{\nu_1^2 eH_0(T)}{(2\pi T_{c0})^2} = \alpha_1\theta + \alpha_2\theta^2, \quad (42)$$

$$\alpha_1 = \frac{\eta_1 + 2\eta_2}{7\varsigma(3)\left[\dfrac{\eta_1}{4} + \dfrac{\eta_2}{3}\,\dfrac{1}{\lambda^2}\right]}, \\ \alpha_2 = \alpha_1\left\{\frac{\left[\dfrac{31\cdot 3}{16}\eta_1 + \dfrac{31}{5}\,\dfrac{1}{\lambda^2}\eta_2\right]\varsigma(5)\alpha_1}{\left[\dfrac{1}{4}\eta_1 + \dfrac{1}{3}\,\dfrac{1}{\lambda^2}\eta_2\right]7\varsigma(3)} + 1\right\}. \quad (43)$$

Здесь

$$\theta = 1 - \frac{T}{T_c}, \\ \eta_{1,2} = \frac{1}{2}[1 \pm \eta], \\ \eta = (\lambda_{11} - \lambda_{22})\left[(\lambda_{11} - \lambda_{22})^2 + 4\lambda_{11}\lambda_{22}\right]^{1/2}; \quad (44)$$

при $\rho_n \gg 1$

$$\tilde{\rho}(T) = \frac{\nu_1\nu_2 eH_0(T)}{(2\pi T_c)^2} = \\ = \frac{e_0}{4\gamma}\exp\left(\frac{1}{2}\eta_- - \frac{3}{2}\nu(1) + \Omega(\lambda)\right) \times \\ \times\left[1 - \frac{F_\parallel^c(T)}{\Omega(\lambda)}\right]\left(\frac{T_c}{T_c^0}\right)^2, \quad (45)$$

$$\eta_- = \frac{\lambda_{11} - \lambda_{22}}{a}, \\ \nu(1) = \frac{1}{a}\sqrt{(\lambda_{11} - \lambda_{22} - a\ln\lambda)^2 + 4\lambda_{12}\lambda_{21}}, \quad (46)$$

$$\Omega(\lambda) = \left\{\left[-\ln\frac{e_0\lambda}{2} + \frac{3}{2}\eta - \frac{1}{2}\nu(1)\right]^2 + \frac{8\lambda_{12}\lambda_{21}}{a^2}\right\}. \quad (47)$$

Выражение (42) определяет $H_{c2}^{(c)}$ вблизи критической температуры $T_c - T \ll T_c$, а формула (45) определяет эту же величину вблизи нулевой температуры при произвольном значении химического потенциала μ. При $\mu = \mu_0$ $(T_c = T_{c0})$ получим значения этих величин для чистого MgB_2.

5. ЧИСЛЕННЫЕ РАСЧЕТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Данная работа посвящена исследованию магнитных свойств двухзонного сверхпроводника в области магнитных полей, близких к верхнему критическому полю H_{c2}.

Для выполнения этих исследований нами на основании работ [16, 17] развита микроскопическая теория, которая содержит методику определенного аналитического расчета и позволяет учесть анизотропные свойства двухзонной системы, характерные

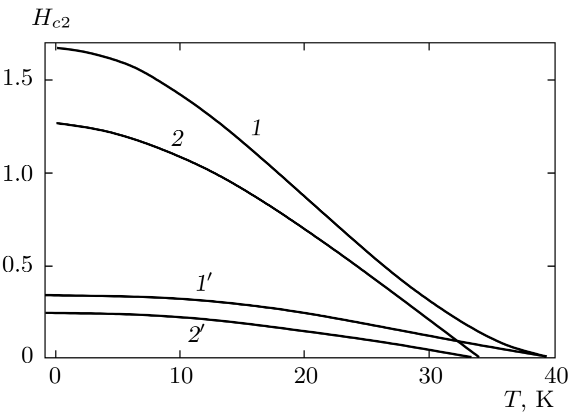

Рис. 1. Зависимости величин верхнего критического поля $H_{c2}^{(ab)}$, $H_{c2}^{(c)}$ (соответственно кривые *1*, *1′*) в чистом $\mathrm{MgB_2}$ и тех же величин (кривые *2*, *2′*) в допированном $\mathrm{MgB_2}$ от температуры

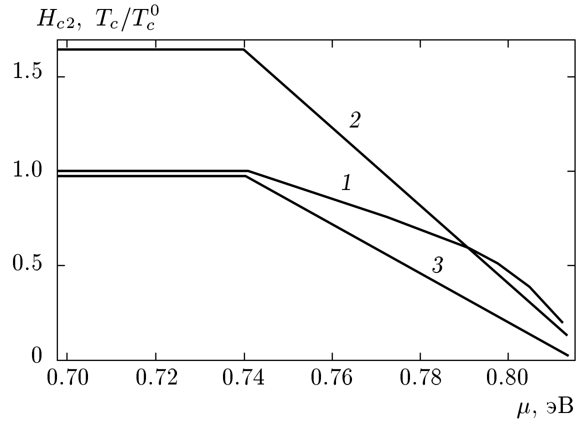

Рис. 2. Зависимости отношения критических температур допированного и чистого $\mathrm{MgB_2}$ (кривая *1*), а также критических полей $H_{c2}^{(ab)}$ (кривая *2*) и $H_{c2}^{(c)}$ (кривая *3*) от химического потенциала μ. Параметры те же, что и на рис. 1

для $\mathrm{MgB_2}$. Учет же анизотропии приводит к аномалиям физических характеристик этого соединения. Предложенная методика позволяет одновременно рассматривать как чистый анизотропный двухзонный сверхпроводник, так и интерметаллическое соединение $\mathrm{MgB_2}$, в котором выполнено замещение атомов Mg и B другими элементами периодической системы элементов.

На наш взгляд, этот более общий подход удобен, поскольку позволяет, основываясь на полученных уравнениях, параллельно извлекать результаты для случая чистого и допированного сверхпроводников, сравнивать и анализировать их.

Приведем результаты численных расчетов, полученные для верхнего критического поля $H_{c2}^{(ab)}$ с помощью уравнения (17) и соотношения (21), определяющего значение химического потенциала, а также уравнения (38), позволяющего определить верхнее критическое поле $H_{c2}^{(c)}$.

Используем константы электрон-фононного взаимодействия, соответствующие $\mathrm{MgB_2}$: $\lambda_{11} = 0.302$; $\lambda_{22} = 0.135$; $\lambda_{12} = 0.04$; $\lambda_{22} = 0.038$, а также $\lambda = \nu_1/\nu_2 = 0.8$ [9]. Полагаем также, что значение химического потенциала в $\mathrm{MgB_2}$ без допирования составляет $\mu_0 = 0.74$ эВ [11]. Для всех приведенных в работе рисунках выбран параметр $\tilde{\varepsilon} = 0.31$. Это значение дает наиболее близкие к экспериментальным результаты.

На рис. 1 мы представляем зависимость верхних критических полей $H_{c2}^{(ab)}$, $H_{c2}^{(c)}$ от температуры для случая чистого $\mathrm{MgB_2}$ (соответственно кривые *1* и *1′*) и случая допированной электронами системы $\mathrm{MgB_2}$ величины $\tilde{H}_{c2}^{(ab)}$ и $\tilde{H}_{c2}^{(c)}$ (соответственно кривые *2* и *2′*). Мы получаем $H_{c2}^{(ab)} \gg H_{c2}^{(c)}$. Этот результат хорошо согласуется как с результатами многих теоретических работ, так и с экспериментальными данными. Сильная анизотропия верхнего критического поля объясняется слабой дисперсией энергии электронов в направлении оси c и малым значением средней скорости электронов на поверхности Ферми в этом направлении. В случае замещения Mg и B другими химическими элементами, которые способствуют допированию электронами (увеличению химического потенциала), поведение верхнего критического поля как функции температуры (кривые *2* и *2′*) аналогично случаю чистого $\mathrm{MgB_2}$. Однако значения этих величин уменьшаются по сравнению со случаем чистого $\mathrm{MgB_2}$. Имеет место корреляция между температурой сверхпроводящего перехода T_c и величинами верхнего критического поля с ростом химического потенциала. Увеличение же дырочной проводимости не влияет на значения температуры сверхпроводящего перехода и верхнего критического поля.

На рис. 2 приведена зависимость отношения критических температур допированного и чистого $\mathrm{MgB_2}$ (*1*), а также критических полей от электронной плотности (химического потенциала μ). Получаем, что при $\mu > 0.74$ эВ все величины убывают с ростом электронной плотности носителей заряда, оставаясь постоянными при $\mu < 0.74$ эВ. Следовательно, дырочное допирование оставляет постоянными величины температуры сверхпроводящего перехода и верхнего критического поля.

На рис. 3 дана зависимость коэффициента анизотропии от температуры в чистом $\mathrm{MgB_2}$ ($\mu_0 =$

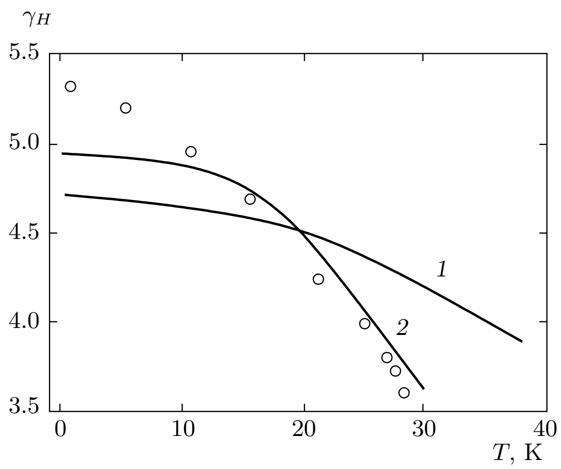

Рис. 3. Зависимости коэффициента анизотропии от температуры для чистого MgB_2 ($\mu_0 = 0.74$ эВ, кривая *1*) и для допированного MgB_2 ($\mu = 0.76$ эВ, кривая *2*). Параметры те же, что и на рис. 1. Приведенные на рисунке кружки отвечают экспериментальным данным, взятым из работы [15]

$= 0.74$ эВ) и допированном MgB_2 ($\mu = 0.76$ эВ). Приведенные на рисунке кружочки отвечают экспериментальным данным работы [15].

Полученные выше результаты неплохо согласуются с экспериментальными данными магнитных свойств интерметаллического соединения MgB_2 как чистого, так и допированного электронами и дырками, что говорит о способности рассмотренной выше двухзонной модели описывать свойства реальных материалов и способности вычислять аномалии физических свойств, порожденных анизотропией системы.

Отметим, что основным механизмом действия примеси замещения на систему в данной работе рассматривался эффект заполнения энергетических зон, полагалось, что рассеяние на примесном потенциале является слабым. Учет рассеяния электронов на примеси существенно усложняет результаты для систем, в которых примесное рассеяние является сильным.

ЛИТЕРАТУРА

1. L. Nagamatsu, N. Nekagawa, T. Marenaka et al., Nature (London) **410**, 63 (2001).

2. В. А. Москаленко, Л. З. Кон, М. Е. Палистрант, *Низкотемпературные свойства металлов с особенностями зонного спектра*, Штиинца, Кишинев (1989).

3. V. A. Moskalenko, L. Z. Kon, and M. E. Palistrant, *Teoria Supraconductibilitatii Multibanda*, Editura Tehnica, Bucureşti (2008).

4. В. А. Москаленко, М. Е. Палистрант, В. М. Вакалюк, УФН **161**, 155 (1991).

5. H. L. Choi, D. Roundy, H. Sun et al., Phys. Rev B **66**, 020513 (2002); Nature **418**, 758 (2002).

6. A. L. Liu, L. I. Mazin, and I. Kartus, Phys. Rev. Lett. **87**, 0877005 (2001).

7. В. А. Москаленко, ФММ **8**, 503 (1959).

8. H. Suhl, B. T. Matthias, and L. R. Walker, Phys. Rev. Lett. **3**, 552 (1959).

9. М. Е. Палистрант, В. А. Урсу, ЖЭТФ **131**, 59 (2007).

10. M. E. Palistrant and V. A. Ursu, J. Supercond. Nov. Magn. **21**, 171 (2008).

11. L. M. An and W. E. Pickett, Phys. Rev. Lett. **86**, 4366 (2001).

12. M. Angst, D. Di. Castro, and R. Puzniak, Physica C **385**, 143 (2003).

13. Yu. Eltsev, K. Nakao, S. Lee et al., Physica C **378**, 61 (2002).

14. M. Angst, R. Puzniak, A. Wisniewski et al., Phys. Rev. Lett. **88**, 167004 (2002).

15. M. Angst, S. L. Bud'ko, R. H. T. Wilke, and P. C. Canfield, Phys. Rev. B **71**, 144512 (2005).

16. Л. П. Горьков, ЖЭТФ **37**, 833 (1959).

17. K. Maki and T. Tsuzuki, Phys. Rev. A **139**, 868 (1965).

18. М. Е. Палистрант, В. И. Дедю, в сб.: *Исследования по квантовой теории систем многих частиц*, РИО Академия наук МССР, Кишинев (1969).

19. T. Dahm and N. Schopohl, Phys. Rev. Lett. **91**, 017001 (2003).

20. P. Miranovic, K. Machida, and V. G. Kogan, J. Phys. Sos Jpn. **72**, 221 (2003).

21. C. T. Rieck, R. Scharnberg, and N. Schopohl, J. Low Temp. Phys. **84**, 981 (1991).

22. В. А. Москаленко, ЖЭТФ **51**, 1163 (1966).

23. M. E. Palistrant, I. D. Cebotari, and V. A. Ursu, Moldavian J. Phys. Sci. **7**, № 3 (2008).

24. M. E. Palistrant and F. G. Kochorbe, Physica C (Amsterdam) **194**, 351 (1992); ФНТ **26**, 1077 (2000).

25. V. A. Loktev, R. M. Quick, and S. G. Sharapov, Phys. Rep. **349**, 1 (2001).

26. В. А. Москаленко, М. Е. Палистрант, В. А. Урсу, ТМФ **154**, 113 (2008).