

LA TEMPERATURA CRITICA DE LA TRANSICION SUPERCONDUCTORA

L.E. Sansores

Centro de Investigación de Materiales, UNAM

RESUMEN

En este trabajo se revisan los diversos métodos utilizados para calcular la temperatura crítica de la transición superconductora empezando por la expresión dada por la teoría BCS como fue inicialmente concebida y terminando con el método computacional de Leavens. Utilizando el PdH, como ejemplo, se revisa también el efecto que tienen los fonones ópticos en las expresiones para la temperatura crítica. En la última parte se estudia el efecto que los fonones ópticos tendrían en tres tipos de materiales representados por espectros de la forma de Hg, Pb y Pd. Se obtiene que solo cambiar la posición del pico de Einstein asociado a los fonones ópticos lleva a un efecto isotópico inverso.

ABSTRACT

In this paper a review of the several techniques used for calculating the critical temperature of the superconducting transition is presented, beginning with the original BCS theory and concluding with the computational method of Leavens. Using PdH, as an example, the effect of the optical phonons on the critical temperature is also reviewed. In the final part the effect of the optical phonons is studied in three different types of materials which are represented by phonon spectra of the form of Hg, Pb and Pd. It is shown that just changing the position of the Einstein peak associated with the optical phonons will lead to an inverse isotopic effect.

REVISION DE LOS METODOS CONVENCIONALES

Empezaremos recordando la Teoría BCS:

En 1957 Bardeen, Cooper y Schrieffer⁽¹⁾ presentaron su teoría de la superconductividad basados en el hecho de que la interacción entre electrones por medio del intercambio virtual de fonones es atractiva cuando la diferencia de energía entre los estados electrónicos involucrados es menor que la energía fonónica $\hbar\omega$. Ellos describen el estado base de un

superconductor como una combinación lineal de estados normales, en los cuales, los electrones están excitados virtualmente en pares de espín y momento opuestos.

Para construir la función del estado base utilizan una aproximación tipo Hartree, en la cual, la probabilidad de que una configuración específica de pares ocurra, está dada por el producto de las probabilidades de ocupación de estados apareados individuales. Según esta teoría la energía libre de un superconductor es

$$F = 2 \sum_k |\epsilon_k| [f_k + (1 - 2f_k) h_k] - \sum_{k,k'} V_{kk'} [\bar{h}_k(1-h_k) h_{k'}(1-h_{k'})]^{1/2} (1-2f_k)(1-2f_{k'}) \quad (1)$$

- TS

donde ϵ_k es la energía de Bloch medida con respecto a la energía de Fermi, h_k la probabilidad de que el estado k esté ocupado, y

$$- V_{kk'} = \langle -k'\downarrow, k'\uparrow | H_I | -k\downarrow, k\uparrow \rangle + \langle k'\uparrow, -k'\downarrow | H_I | k\uparrow, -k\downarrow \rangle \quad (2)$$

H_I es la suma del potencial coulombiano y del potencial producido por la interacción virtual vía fonón de dos electrones,

$$f_k = 1/(e^{\beta E_k} + 1) \quad (3)$$

$$E_k = (\epsilon_k^2 + \Delta_0^2)^{1/2} \quad (4)$$

y $2 \Delta_0$ es la brecha de energía.

Minimizando la energía libre se obtiene

$$\frac{[h_k(1 - h_k)]^{1/2}}{1 - 2h_k} = \sum_{k'} \frac{V_{kk'}, [h_{k'}(1 - h_{k'})]^{1/2} (1 - 2f_{k'})}{2\varepsilon_k} \quad (5)$$

Si ahora se desprecian efectos de anisotropía y se supone que los elementos de matriz $V_{kk'}$, pueden ser reemplazados por un elemento de matriz promedio y constante V para la región $-\hbar\omega_D < \varepsilon < \hbar\omega_D$, o sea en la vecindad del nivel de Fermi, y por cero fuera de esta región, se obtiene

$$h_k = \frac{1}{2} [1 - (\varepsilon_k/E_k)] \quad (6)$$

$$[h_k(1 - h_k)]^{1/2} = \frac{1}{2} \Delta_0/E_k \quad (7)$$

donde

$$\Delta_0 = V \sum_{k'} [h_{k'}(1 - h_{k'})]^{1/2} (1 - 2f_{k'}) \quad (8)$$

Si introducimos (3), (4) y (6) en (8) obtenemos

$$\frac{1}{N(0)V} = \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\varepsilon}{(\varepsilon^2 + \Delta_0^2)^{1/2}} \tanh \left[\frac{1}{2} \beta(\varepsilon^2 + \Delta_0^2)^{1/2} \right] \quad (9)$$

Aquí $N(0)$ es la densidad de estados en el nivel de Fermi. Arriba de la temperatura crítica, $\Delta_0 = 0$ de manera que el material regresa a su estado normal, mientras que abajo de T_C la solución de (9) con $\Delta_0 \neq 0$ minimiza la energía libre y tenemos el estado superconductor, de manera que a $T = T_C$ podemos escribir (9) como

$$\frac{1}{N(0)V} = \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\varepsilon}{\varepsilon} \tanh\left(\frac{1}{2} \beta_C \varepsilon\right)$$

$$k_B T_c = 1.134 \hbar \omega_D \exp \left[- \frac{1}{N(0)V} \right] \quad (10)$$

que es la expresión que obtiene la teoría BCS para la temperatura crítica de la transición superconductor.

A partir de entonces se ha avanzado mucho y se sabe que esta teoría es razonablemente correcta en el límite de acoplamiento débil. Migdal⁽²⁾ mostró que en materiales normales es posible tratar la interacción electrón-fonón a una precisión de $(m/M)^{1/2}$. Eliashberg⁽³⁾ y Nambu⁽⁴⁾ extendieron el trabajo de Migdal al estado superconductor comenzando el desarrollo de la teoría de acoplamiento fuerte. En esta teoría se parte de un Hamiltoniano que contiene explícitamente las contribuciones fonónicas y electrónicas, la interacción electrón-fonón y la repulsión coulombiana.

Este problema puede ser resuelto utilizando el formalismo de las funciones termodinámicas de Green. La solución son un par de ecuaciones integrales acopladas para la función de la brecha de energía $\Delta(T, \omega)$ y la función de renormalización $Z(T, \omega)$ conocidas como ecuaciones de Eliashberg y escritas a temperaturas finitas por primera vez por Scalapino, Schrieffer y Wilkins⁽⁵⁾

$$\begin{aligned} \Delta(T, \omega) = & \frac{1}{Z(T, \omega)} \int_0^\infty d\omega' \operatorname{Re} \left\{ \frac{\Delta(T, \omega')}{\sqrt{\omega'^2 - \Delta^2(T, \omega')}} \right\} \left[\int_0^{\omega_c} dv \alpha^2(v) F(v) \right. \\ & \times \left. \left[[N(v) + f(-\omega')] \left[(\omega' + v + \omega)^{-1} + (\omega' + v - \omega)^{-1} \right] \right. \right. \\ & - \left. \left. [N(v) + f(\omega')] \left[(-\omega' + v + \omega)^{-1} + (-\omega' + v - \omega)^{-1} \right] \right] \right. \\ & \left. - U_c \tanh \frac{\beta \omega'}{2} \right] \quad (11a) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [1 - Z(T, \omega)] \omega = & \int_0^\infty d\omega' \operatorname{Re} \left\{ \frac{\omega'}{\sqrt{\omega'^2 - \Delta^2(T, \omega')}} \right\} \left[\int_0^{\omega_c} dv \alpha^2(v) F(v) \right. \\ & \times \left. \left[[N(v) + f(-\omega')] \left| (\omega' + \omega + v)^{-1} - (\omega' + v - \omega)^{-1} \right| \right. \right. \\ & \left. \left. - [N(v) + f(\omega')] \left| (-\omega' + \omega + v)^{-1} - (-\omega' - \omega + v)^{-1} \right| \right] \right] \quad (11b) \end{aligned}$$

donde $\alpha^2(\nu)$ es la interacción electrón-fonón, $F(\nu)$ la densidad de estados fonónicos, U_c la repulsión coulombiana efectiva entre electrones de un par, $N(\nu)$ y $f(\nu)$ las probabilidades de ocupación de Bose y Fermi respectivamente y ω_c la frecuencia fonónica máxima. Estas ecuaciones son exactas a $(m/M)^{1/2}$. Desde luego las ecuaciones (11) pueden ser resueltas por métodos computacionales, algunos de los cuales mencionaremos más adelante, pero primero revisaremos algunas soluciones analíticas aproximadas a $T = T_c$.

En todas estas soluciones que analizaremos en esta sección se parte de aproximar $\Delta(T, \omega)$ por un gap tipo BCS

$$\Delta(T, \omega) = \begin{cases} \Delta_0 & 0 \leq \omega \leq \omega_c \\ \Delta_\infty & \omega_c < \omega \end{cases} \quad (12)$$

despreciando la dependencia de $\Delta(T, \omega)$ con la frecuencia y también los fonones térmicos.

La ecuación más conocida es la de McMillan⁽⁶⁾ publicada en 1968. En ese trabajo resuelve analíticamente las ecuaciones de Eliashberg a $T = T_c$ utilizando la aproximación (12) y obtiene

$$\frac{T_c}{\omega_c} = \exp \left\{ - \frac{1 + \lambda}{\lambda - \mu^* - \frac{\lambda}{(\langle \omega \rangle / \omega_c) \lambda \mu^*}} \right\}$$

donde

$$\lambda = 2 \int_0^{\omega_c} \frac{d\omega'}{\omega'} \alpha^2(\omega') F(\omega') \quad (13)$$

es la constante del acoplamiento electrón-fonón y

$$\mu^* = U_c / [1 + U_c \ln(\omega_F / \omega_c)] \quad (14)$$

siendo ω_F la frecuencia correspondiente a la energía de Fermi. Después utiliza espectros fonónicos, todos del tipo del niobio, para ajustar su ecuación y obtener finalmente

$$T_C = \frac{\Theta}{1.45} \exp \left\{ - \frac{1.04(1+\lambda)}{\lambda - \mu^* (1+0.62\lambda)} \right\}$$

donde Θ es la temperatura de Debye.

Esta ecuación fue más tarde modificada por Dynes⁽⁷⁾ a su forma más conocida.

$$T_C = \frac{\langle \omega \rangle}{1.2} \exp \left\{ - \frac{1.04(1+\lambda)}{\lambda - \mu^* (1+0.62\lambda)} \right\} \quad (15)$$

con

$$\langle \omega \rangle = \frac{2}{\lambda} \int_0^{\infty} d\omega \alpha^2(\omega) F(\omega)$$

Debe tenerse en cuenta que esta ecuación fue obtenida para espectros fonónicos del tipo de Nb y que por lo tanto muestra discrepancias para materiales con espectros fonónicos que difieran apreciablemente del Nb.

Utilizando la aproximación (12), en 1973 Leavens⁽⁸⁾ resolvió analíticamente las ecuaciones de Eliashberg. En su trabajo reemplaza $N(\nu)$ y $f(\omega')$ por su valor a temperatura cero y reemplaza el límite inferior de la integral sobre ω' de la ecuación (11a) por el valor apropiado $k_B T_C / 1.134$ obtenido por Allender, Bray y Bardeen⁽⁹⁾ en su trabajo sobre el mecanismo de excitón para la superconductividad. Esto le permite resolver analíticamente las integrales y obtiene

$$k_B T_C = 1.134 \omega_C \exp \left\{ - \frac{1 + \lambda + \bar{\lambda}(T_C)}{\lambda - \mu^*} \right\} \quad (16a)$$

donde

$$\bar{\lambda}(T_C) = 2 \int_0^{\omega_C} \frac{d\nu}{\nu} \alpha^2(\nu) F(\nu) \ln \left| \frac{\nu + \omega_C}{\nu + k_B T_C / 1.134} \right| \quad (16b)$$

que son un par de ecuaciones acopladas que deben ser resueltas en un proceso iterativo. Si en nuestra primera iteración hacemos $T_C = 0$ obtenemos

$$k_B T_C = 1.134 \omega_C \exp \left\{ - \frac{1 + \lambda + \bar{\lambda}}{\lambda - \mu^*} \right\} \quad (17a)$$

donde

$$\bar{\lambda} = 2 \int_0^{\omega_C} \frac{d\nu}{\nu} \alpha^2(\nu) F(\nu) \ln \left[1 + \frac{\omega_C}{\nu} \right] \quad (17b)$$

ecuación obtenida por primera vez por Leavens y Carbotte⁽¹⁰⁾ para el caso en el cual los fonones de baja frecuencia son poco importantes, restricción no presente en las ecuaciones (16).

Por último, Allen y Dynes⁽¹¹⁾ utilizando tres clases diferentes de espectros fonónicos (pico de Einstein, Pb y Hg, vea Fig. 1) para resolver numéricamente las ecuaciones de Eliashberg, demuestran que la ecuación (15) es aceptable para $\lambda < 1.5$ pero incorrecta para valores de λ mayores. Lo que es más, ellos obtienen que aún para valores de $\lambda < 1.5$ una mejor solución se obtiene si en la ecuación (15) se reemplaza $\langle \omega \rangle$ por (vea Fig. 2)

$$\omega_{\log} = \exp \left(\frac{2}{\lambda} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\omega} \alpha^2(\omega) F(\omega) \ln \omega \right)$$

Allen y Dynes⁽¹¹⁾ utilizan 217 cálculos numéricos y los tres espectros mencionados para los intervalos $0 \leq \mu^* \leq .20$ y $0.3 < \lambda < 10$ y proponen

$$T_C = \frac{f_1 f_2 \omega_{\log}}{1.2} \exp \left\{ - \frac{1.04(1+\lambda)}{\lambda - \mu^*(1+0.62\lambda)} \right\} \quad (18a)$$

donde

$$f_1 = \left[1 + \left(\frac{\lambda}{2.46(1+3.8\mu^*)} \right)^{3/2} \right]^{1/3} \quad (18b)$$

$$f_2 = 1 + \frac{(\bar{\omega}_2/\omega_{\log} - 1)\lambda^2}{\lambda^2 + [1.82(1+6.3\mu^*) \bar{\omega}_2/\omega_{\log}]^2} \quad (18c)$$

y

$$\bar{\omega}_2^2 = \frac{2}{\lambda} \int_0^{\infty} d\omega \alpha^2(\omega) F(\omega) \omega \quad (19)$$

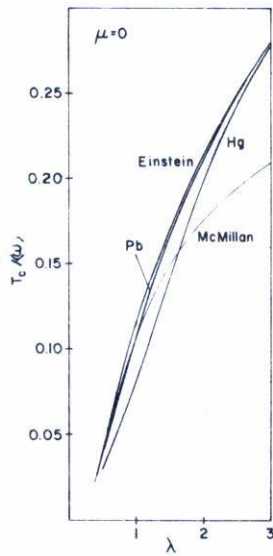


Fig. 1. Resultados numéricos de T_C para dos espectros típicos Pb y Hg y el espectro óptimo "un pico de Einstein".

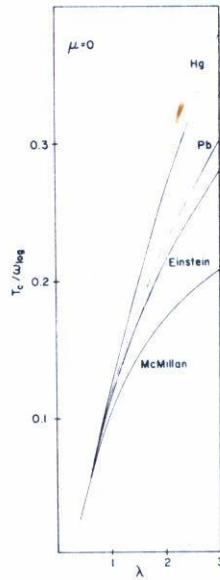


Fig. 2. Resultados numéricos de T_C para espectros de Hg, Pb y "pico de Einstein". La curva denotada por "McMillan" es la ecuación de McMillan substituyendo $\langle \omega \rangle$ por ω_{log} como sugieren Allen y Dynes⁽¹¹⁾.

La ecuación (18) tiene la característica de que para λ grande, T_C es -proporcional a $\lambda^{1/2}$, resultado obtenido por los mismos autores⁽¹¹⁾ para un espectro de Einstein, que como ellos demuestran es el espectro fónico óptimo.

Como podemos ver las expresiones para T_C son cada vez más complejas aunque también más exactas. En realidad si uno conoce $\alpha^2(\omega) F(\omega)$ y dispone de una computadora, lo más conveniente es resolver numéricamente las ecuaciones de Eliashberg para calcular la temperatura crítica por un método como el descrito por Leavens⁽¹²⁾.

Para este fin es conveniente usar la representación de Matsubara de la ecuación del "gap" o ecuaciones linearizadas de Eliashberg discutidas por Scalapino⁽¹³⁾ y Bergmann y Rainer⁽¹⁴⁾.

$$\Delta_i = \pi k_B T_C \sum_j \{ \lambda_{i-j} - \mu^* \} \frac{\Delta_j}{|\tilde{\omega}_j|} \quad (20a)$$

$$\tilde{\omega}_j = \omega_j + \pi k_B T_C \sum_{\ell=-\infty}^{\infty} \lambda_{j-\ell} \text{signo}(\omega_\ell) \quad (20b)$$

donde

$$\omega_j = (2j + 1) \pi k_B T_C \quad j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

y

$$\lambda_n = 2 \int_0^{\infty} \frac{d\omega \alpha^2(\omega) F(\omega) \omega}{\omega^2 + (2n\pi k_B T_C)^2}$$

siendo

$$\Delta_i = \Delta(i\omega_j)$$

La sumatoria en (20a) se lleva a cabo sobre el intervalo $-\omega_{jC} \leq \omega_j \leq \omega_{jC}$ con $\omega_{jC} = (2j + 1)\pi k_B T_C$. Es importante hacer notar que cuando se usan valores experimentales de $\alpha^2 F(\omega)$ y μ^* obtenidos de experimentos de efecto

túnel, ω_{j_c} debe ser efectivamente la misma ω_c utilizada en el programa de inversión de McMillan. Para mejorar el método de Bergman y Rainer, Leavens define $\Delta_i = F_i \Delta_0$ y después de cierta álgebra con la ecuación (20a) obtiene

$$F_i = \sum_{j=0}^{j_c} \{\lambda_{i-j} + \lambda_{i+j+1} - 2\mu^*\} \frac{F_j}{G_j} \quad (21)$$

$$G_j = (2j + 1) + \lambda_0 + 2(\lambda_1 + \dots + \lambda_j)$$

y la condición a la frontera $F_0 = 1$.

Para resolver este par de ecuaciones se usa un proceso iterativo y en la mayoría de los casos no se requieren más de 10 iteraciones para una convergencia en T_c de una parte en 10^5 .

Hidruros

Ahora revisaremos el estado en que se encuentra el problema de los hidruros. Entre ellos del que más información se tiene es del PdH por haber sido el primero en que se observó o al menos se reconoció el efecto de los fonones ópticos en sus propiedades superconductoras; Por esta razón empezaremos con un resumen de sus características.

El Pd tiene una estructura f.c.c. Cuando se introduce hidrógeno en Pd se pueden presentar dos fases, α y β . La fase α se presenta a bajas concentraciones de H mientras que la fase β a altas. La superconductividad se presenta en esta segunda fase en la cual el H ocupa sitios octaedrales en la estructura f.c.c. del Pd. Cálculos de LCAO de Switendick et al. ⁽¹⁵⁾ muestran que el modelo de Banda Rígida no es adecuado para describir la estructura electrónica de la aleación.

Con respecto a la densidad de estados fonónicos, medidas calorimétricas muestran que la temperatura de Debye no cambia con la presencia del H, esto es que dentro de la incertidumbre experimental la Θ es la misma para cualquier concentración de H en PdH que la Θ de Pd puro. Por otro lado, experimentos de dispersión elástica coherente e incoherente de neutrones muestran un pico en el espectro fonónico a 56 MeV

(vea Fig. 3). De hecho el espectro fonónico puede ser considerado como compuesto de dos contribuciones, una asociada con los iones de Pd y otra con los iones de H.

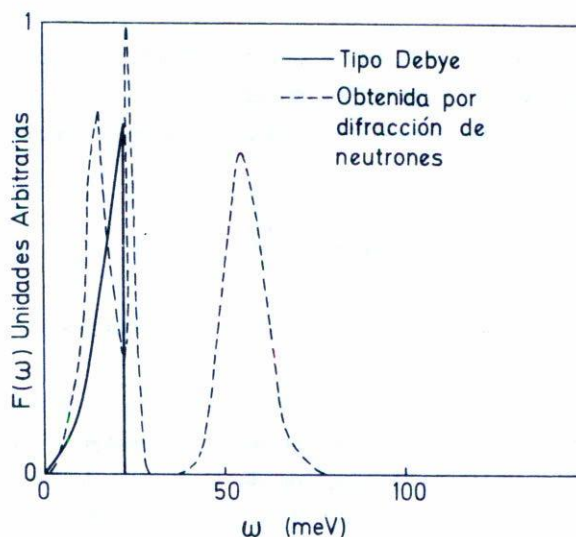


Fig. 3. Espectro fonónico del PdH y un espectro fonónico tipo Debye.

Hace algunos años Skoskiewicz⁽¹⁶⁾ encontró que cuando la razón de átomos H/Pd > 0.74 la aleación PdH presenta una transición superconductor con temperatura crítica dependiente de la concentración de H. Para H/Pd = 1.0 la temperatura crítica es 9 K. Por otro lado si en lugar de H introducimos D en Pd, la temperatura crítica para una concentración dada es superior, $T_C^D > T_C^H$ ó sea que presenta un efecto isotópico inverso.

A la luz de los resultados de dispersión neutrónica Ganguly⁽¹⁷⁾ fue el primero en reconocer que los fonones ópticos contribuían en la interacción que da lugar a la superconductividad. Para incluir estos fonones él propone el siguiente potencial (vea Fig. 3)

$$V = \begin{cases} -\lambda_D^* - \lambda_{1m}^* + \mu & 0 \leq \omega \leq \omega_D \\ -\lambda_{1m}^* + \mu & \omega_D < \omega < \omega_E \\ \mu & \omega_E < \omega \end{cases}$$

donde

$$\lambda^* = \lambda / (1.04)(1+\lambda), \quad \lambda_D = 2 \int \frac{d\omega}{\omega} \alpha_{Pd}^2 F_{Pd}(\omega), \quad \lambda_{1m} = 2 \int \frac{d\omega}{\omega} \alpha_E^2 F_E(\omega)$$

y ω_D es la frecuencia límite del espectro fonónico del paladio y ω_E la frecuencia central de la contribución del H.

Resolver las ecuaciones BCS para este nuevo potencial no es difícil y se obtiene

$$T_c = \frac{\theta}{1.45} \exp\left(-\frac{1}{g}\right)$$

$$g = \lambda_D^* + (\lambda_{1m}^* - \mu^*) / [1 - (\lambda_{1m}^* - \mu^*) \ln(\theta_E/\theta)]$$

Antes de analizar este resultado veamos el estudio realizado por Valladares y Sansores⁽¹⁸⁾, que consiste primero en construir la función $\alpha^2 F(\omega)$ para PdH y calcular la función de la brecha de energía utilizando el programa de inversión de McMillan. Una vez obtenida la forma detallada de $\Delta(\omega, T)$ se propone para esta función una aproximación coherente con los resultados numéricos y se resuelven analíticamente las ecuaciones de Eliashberg.

Para construir la función $\alpha^2 F(\omega)$ utilizan los siguientes tres hechos

- 1) La razón de las áreas de las contribuciones fonónicas debe ser proporcional a la razón atómica.

- 2)
$$\int_0^\infty F(\omega) d\omega = 3 + 3 (H/Pd)$$

- 3) Propone $\alpha^2 = 1$ y constante para todo el espectro.

El punto 3) les lleva a obtener $\lambda = 0.51$ que está en buena concordancia con la estimación de $\lambda = 0.6$ de Bennemann y Garland⁽¹⁹⁾ y con resultados de efecto túnel.

Los resultados para $\Delta(\omega, T)$ se muestran en las figuras 4, 5 para el caso del Hidrógeno y en la figura 6 para el Deuterio. Se puede observar que la función de la brecha energética está dividida en dos regiones, por lo que proponen

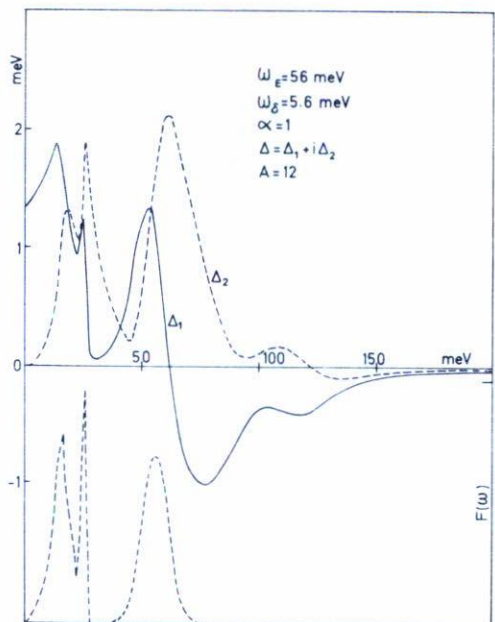


Fig. 4. Variación de la función de la brecha de energía como función de la frecuencia para PdH. En la parte inferior se muestra el espectro fonónico correspondiente.

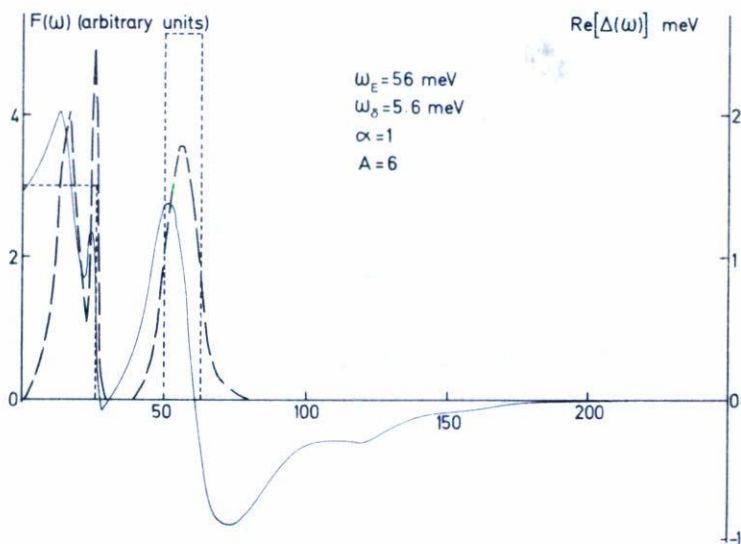


Fig. 5. Variación de $\text{Re}[\Delta(\omega)]$ como función de la frecuencia para PdH. También se muestra el espectro fonónico correspondiente y la aproximación propuesta en la referencia 18.

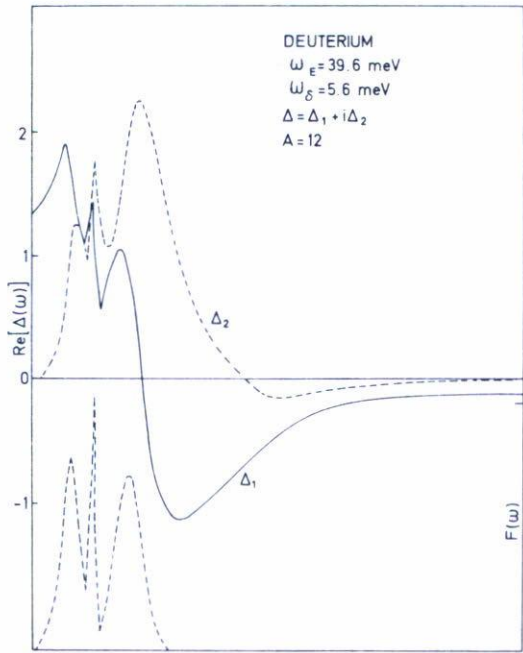


Fig. 6. Variación de la función de la brecha de energía como función de la frecuencia para PdD. En la parte inferior se muestra el espectro fonónico correspondiente.

$$\Delta = \begin{cases} \Delta_0 & 0 \leq \omega \leq \omega_D \\ 0 & \omega_D < \omega < \omega_E - \omega_\delta \\ \Delta_E & \omega_E - \omega_\delta \leq \omega \leq \omega_E + \omega_\delta \\ \Delta_\infty & \omega_E + \omega_\delta < \omega \end{cases}$$

siendo ω_δ el semiancho del pico de Einstein.

Utilizando esta aproximación y siguiendo a Leavens y Carbotte⁽¹⁰⁾ obtienen

$$k_B T_C = 1.134 \left(\frac{\omega_2}{\omega_1} \right)^m \omega_D \exp \left\{ - \frac{1 + \lambda + \bar{\lambda}}{\lambda - \mu^*} \right\}$$

donde

$$\omega_1 = \omega_E - \omega_\delta$$

$$\omega_2 = \omega_E + \omega_\delta$$

$$m = \Delta_E / \Delta_0$$

y

$$\bar{\lambda} = 2 \int_0^{\omega_C} \frac{d\nu}{\nu} \alpha^2(\nu) F(\nu) \ln \left[\left(1 + \frac{\omega_D}{\nu} \right) \left(\frac{\omega_1 + \nu}{\omega_2 + \nu} \right)^{-m} \right]$$

Utilizando los resultados $m = 2.1$ y $\mu^* = 0.01$ del programa de inversión y los valores obtenidos por Chowdhury y Ross⁽²⁰⁾ para ω_E y ω_δ calculan los siguientes valores para la temperatura de transición de algunos hidruros.

	Teórico	Experimental ^(16,21,22)
PdH	8.7	9.0
PdD	10.5	11.0
Pd 10 Ag-D	12.8	14.4
Pd 20 Ag-D	16.2	15.4

Como podemos ver ambos tratamientos tienen defectos: por un lado Ganguy no introduce el potencial correcto para el PdH y por otro Valladares y Sansores obtienen una expresión que sufre el defecto de contener la razón Δ_E/Δ_0 que no puede medirse experimentalmente y que más bien representa un parámetro ajustable. Por otro lado la discrepancia que existe para la razón λ_{1m}/λ_D que va desde 0.2 (Hertel⁽²³⁾) hasta 2.5-3.0 (Burger et al⁽²⁴⁾, Papaconstantopoulos y Klein⁽²⁵⁾) no permite hacer un cálculo definitivo. Por último Valladares y Sansores⁽¹⁸⁾ utilizan un programa como el descrito para resolver las ecuaciones de Eliashberg numéricamente para su $\alpha^2F(\omega)$ y obtienen para PdH, $T_c = 9.5$ K y para PdD, $T_c = 11.3$ K.

Papaconstantopoulos et al⁽²⁶⁾ emprenden una tarea todavía más completa. Ellos calculan la estructura electrónica de bandas para PdH estequiométrico utilizando el método APW. Los cálculos fueron hechos en forma autoconsistente en el esquema $X\alpha$. Una vez obtenida la densidad

de estados utilizan la teoría de Gaspari y Gyorffy⁽²⁷⁾ para calcular α_D^2 y α_{1m}^2 . Para calcular μ^* utilizan la fórmula de Bennemann y Garland⁽¹⁹⁾.

$$\mu^* = 0.26 N(0) / [1 + N(0)]$$

Ellos obtienen que para PdD y PdH estequiométricos $\lambda = 0.62$, $T_C = 9.6$ K y $\lambda = 0.54$, $T_C = 7.9$ K respectivamente y $\mu^* = 0.085$ para ambos casos. Para calcular T_C utilizaron una solución numérica semejante a la de Leavens⁽¹²⁾.

Aunque aparentemente el problema está resuelto, todavía existen dificultades cuando tratamos de extender estos resultados a otros hidruros. El Pd-Ag-H(D) presenta dependencia de T_C no sólo con la concentración de H, sino también, con la de plata, aumenta con la concentración, hasta un máximo en aproximadamente 20% at. de Ag y a partir de ese punto decrece hasta 0 a $\sim 40\%$ at de Ag. Papaconstantopoulos et al⁽²⁸⁾ han extendido su trabajo para este hidruro sin observar el decremento. Hay que hacer notar que para PdAgH sólo existen experimentos de dispersión inelástica incoherente de neutrones para 10 y 20% at de Ag. Esta información no es tan completa como la obtenida en dispersión inelástica coherente de neutrones, además han utilizado el modelo de Banda Rígida

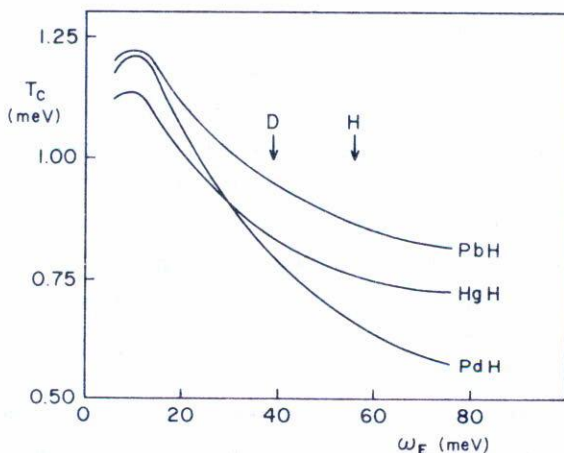


Fig. 7. Resultados numéricos de la variación de T_C como función de la posición del pico introducido por el H, para distintas clases de espectros.

lo cual como ya dijimos debe usarse con mucho cuidado en el sistema PdH y es de suponerse que también en esta aleación.

No todos los hidruros presentan efecto isotópico inverso, de hecho hay algunos como el PdAgH que cambian de un efecto isotópico normal a bajas concentraciones de Ag ($0 \leq x \leq 20$) a un efecto isotópico inverso ($20 \leq x \leq 40$). En la figura 7 mostramos el efecto en T_c cuando cambia la posición del pico de Einstein introducido por el hidrógeno en distintas clases de espectros fonónicos y podemos ver que sólo cuando es a muy bajas energías podría dar un efecto isotópico normal. En este punto debemos enfatizar que es necesaria mayor información experimental, puesto que con la que se cuenta no es suficiente.

Por último queremos mostrar algunos resultados numéricos obtenidos por el autor para distintos espectros fonónicos y compararlos con las predicciones de la ecuación de McMillan⁽⁶⁾. Se han utilizado los espectros del Hg, Pb y Pd como espectros fonónicos base. En las figuras 8 y 9

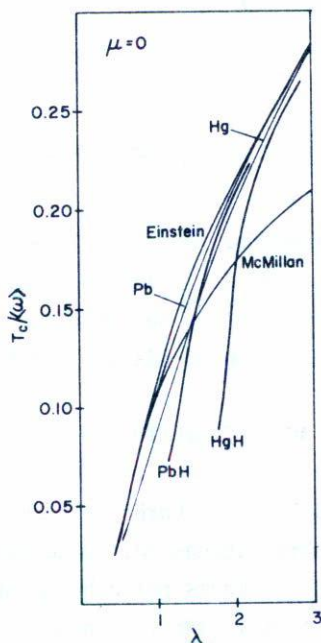


Fig. 8. Se muestran las desviaciones de la temperatura de transición obtenida numéricamente de la obtenida de la ecuación de McMillan.

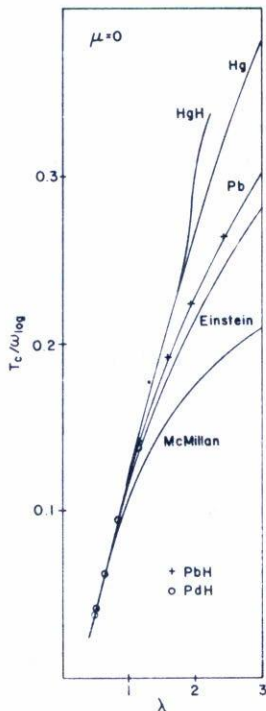


Fig. 9. Variación de T_c/ω_{\log} como función de λ .

se puede ver que para λ pequeñas $0 \leq \lambda \leq 1$ la ecuación de McMillan es bastante exacta pero que para $\lambda > 1$ las desviaciones son considerables. Si, como proponen Allen y Dynes⁽¹¹⁾ se reemplaza $\langle \omega \rangle$ por ω_{\log} como prefactor, los resultados son mucho más satisfactorios.

AGRADECIMIENTOS

Quiero agradecer al Dr. J.P. Carbotte todos sus muy útiles e interesantes comentarios sobre algunas partes de este trabajo, al mismo Dr. J.P. Carbote y la Dra. J. Daams por haberme proporcionado el programa computacional que he utilizado y en general a todo el grupo de temperaturas bajas del Centro de Investigación de Materiales por sus útiles comentarios.

REFERENCIAS

1. J. Bardeen, L.N. Cooper and J.R. Schrieffer; Phys. Rev. 108 (1957) 1175.
2. A.B. Migdal; Zh. Eksperim. i Teor. Fiz. 34 (1958) 1438.
[Soviet Phys. JETP 7 (1958) 996]
3. B.M. Eliashberg; Soviet Phys. JETP 11 (1960) 696; 12 (1961) 1000.
4. Y. Nambu; Phys. Rev. 117 (1960) 648.
5. D.J. Scalapino, J.R. Schrieffer and J.W. Wilkins; Phys. Rev. 148 (1966) 263.
6. W.L. McMillan; Phys. Rev. 167 (1968) 331.
7. R.C. Dynes; Solid State Commun. 10 (1972) 615.
8. C.R. Leavens; Solid State Commun. 13 (1973) 1607.
9. D. Allender, J. Bray and J. Bardeen; Phys. Rev. B3 (1973) 1020.
10. C.R. Leavens y J.P. Carbotte; J. Low Temp. Phys. 14 (1974) 195.
11. P.B. Allen and R.C. Dynes; Phys. Rev. B12 (1975) 905.
12. C.R. Leavens; Solid State Commun. 15 (1974) 1329.
13. D.J. Scalapino, Superconductivity (editado por R.D. Parks), Marcel Dekker, New York (1969).
14. G. Bergmann and D. Rainer; Z. Physik 263 (1973) 59.
15. A.C. Switendick; Ber. Bunsenges. Phys. Chem. 76 (1972) 535; Solid State Commun. 8 (1970) 1463; D.E. Eastman, J.K. Cashion and A.C. Switendick; Phys. Rev. Letters 27 (1971) 35.
16. T. Skoskiewicz; Phys. Stat. Sol. A 11 (1972) K123.
17. B.N. Ganguly; Z. Phys. 265 (1973) 433.
18. A.A. Valladares y L.E. Sansores "New Theoretical Results on the PdH System" CAP-APS-SMF Joint Congress, Quebec, Canada (1976).
19. K.H. Bennemann and J.W. Garland; Z. Physik 260 (1973) 367.
20. M.R. Chowdhury and D.K. Ross; Solids State Commun. 13 (1973) 229.
21. B. Stritzker and W. Buckel; Z. Phys. 257 (1972) 1; J.E. Schirber and C.J.M. Northrup, Jr.; Phys. Rev. B10 (1974) 3818; R.J. Miller and C.B. Satterthwaite; Phys. Rev. Letters 34 (1975) 144.
22. W. Buckel and B. Stritzker; Phys. Lett. 43A (1973) 403.
23. P. Hertel; Z. Phys. 268 (1974) 111.
24. J.P. Burger and D.S. MacLachlan; J. Phys. (Paris) 37 (1976) 1227.
25. D.A. Papaconstantopoulos and B.M. Klein; Phys. Rev. Letters 35 (1975) 110.
26. D.A. Papaconstantopoulos, B.M. Klein, E.M. Economou and L.L. Boyer; Phys. Rev. B17 (1978) 141.
27. G.D. Gaspari and B.L. Gyorffy; Phys. Rev. Letters 29 (1972) 801.