

INFLUENCIA DE LAS FLUCTUACIONES ESPINORIALES EN LAS CARACTERÍSTICAS I-V DEL NIOBIO SUPERCONDUCTOR

R. Baquero

Departamento de Física

Instituto de Ciencias de la Universidad Autónoma de Puebla

(recibido marzo 25, 1981; aceptado julio 3, 1981)

RESUMEN

Estudiamos el efecto que tiene la inclusión de fluctuaciones de espín (paramagnones) en la termodinámica del Nb en estado superconductor, usando las ecuaciones de Eliashberg generalizadas para incluir este tipo de excitaciones. Encontramos que las características corriente-voltaje varían a frecuencias del orden de meV. Este resultado tiene consecuencias para la inversión de estas ecuaciones, en sistemas donde las fluctuaciones mencionadas tengan importancia.

ABSTRACT

We consider the effect of paramagnons in the thermodynamics of superconducting Nb through the numerical solution of Eliashberg gap equation generalized to take into account this effect. We find that the I-V tunnelling characteristics are affected in the region of phonon frequencies although paramagnons occur at much higher energies. This result has implications for the inversion of Eliashberg equations in systems with a large amount of paramagnons.

I. INTRODUCCION

Los paramagnones tienen su origen en el espín de los electrones de la banda d en algunos metales de transición situados hacia el punto de la transición fenomagnética en la Tabla de Mendeleev. El caso más conocido es el paladio. Estas fluctuaciones de espín se deben a un estado ligado virtual que atrae electrones de la banda d alrededor de los iones de la red, donde interactúan alineando sus espines, que es el estado energéticamente favorable. En consecuencia, estas fluctuaciones generan un orden local de corto alcance que se contrapone al orden generado por la superconductividad, ya que ésta tiene su origen en la formación de pares de Cooper, que implican el ordenamiento anti-paralelo de los espines electrónicos. Los paramagnones, por lo tanto, limitan la superconductividad⁽¹⁾. La teoría de estas excitaciones fue elaborada por Berck y Schrieffer⁽²⁾. El posible efecto de los paramagnones en sistemas distintos al Pd se consideró tradicionalmente despreciable. Más recientemente, Rietschel y Winter⁽³⁾ estudiaron detenidamente la posible influencia de estas excitaciones en el Nb y el V. Al contrario de lo que se había aceptado comúnmente, encontraron que este efecto era muy pronunciado en ambos sistemas. La temperatura crítica, T_c , del Nb, por ejemplo, sería de 18°K y, por la limitación debida a los paramagnones, ésta se reduce al valor experimental de 9.2°K. Además, los mismos autores consideraron el factor de Stoner, S , definido como

$$S \equiv \frac{X(0,0)}{X_0} ,$$

donde $X(q,\omega)$ es la susceptibilidad magnética real y X_0 es la susceptibilidad magnética de Pauli que es igual a $\frac{1}{2} \mu_B N(0)$, donde μ_B es el magnetón de Bohr y $N(0)$ la densidad de estados sobre el nivel de Fermi para un solo estado de espín. En el caso del Nb, Rietschel y Winter encontraron $S = 2$. Este número es grande si se compara con el obtenido por Janak⁽⁴⁾ para el Pd: $S = 6$, donde el efecto es tan grande que la superconductividad es destruida totalmente por los paramagnones. Se cree que sistemas como Pd-H y Pd-D son superconductores debido a la destrucción de paramagnones por la introducción de las impurezas.

Las conclusiones de Rietschel y Winter fueron hechas en base a

la solución de las ecuaciones de Eliashberg linearizadas, válidas sólo a la temperatura crítica, T_c . Debido a la importancia atribuida por Rietschel y Winter al efecto de los paramagnones en Nb y V, Baquero, Daams y Carbotte⁽⁵⁾ emprendieron un estudio detallado del efecto de las fluctuaciones de espín en la termodinámica del Nb, en el estado superconductor. Reportamos aquí el efecto de los paramagnones en las curvas corriente-voltaje del Nb, superconductor.

II. GENERALIZACION DE LAS ECUACIONES DE ELIASHBERG

Las ecuaciones de Eliashberg generalizadas para incluir el efecto de los paramagnones, a temperatura T , son

$$|\tilde{\omega}_n| \bar{\Delta}_n = \pi T \sum_m \left\{ \lambda_{m,n}^- - \mu^* \right\} \frac{\bar{\Delta}_m}{\sqrt{1 + \bar{\Delta}_m^2}},$$

$$\tilde{\omega}_n = \omega_n + \pi T \sum_m \lambda_{m,n}^+ \frac{\text{sgn}(\omega_m)}{\sqrt{1 + \bar{\Delta}_m^2}},$$

donde

$$\lambda_{m,n}^\pm = 2 \int_0^\infty d\omega \frac{\omega \{ \alpha^2(\omega) F(\omega) \pm P(\omega) \}}{\omega^2 + (\omega_m - \omega_n)^2}$$

y

$$i\omega_n = i\pi T (2n+1), \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Aquí $i\omega_n$ son las frecuencias de Matsubara, definidas sobre el eje imaginario del plano complejo ω . En la relación para definir λ^\pm , $\alpha^2(\omega) F(\omega)$ y $P(\omega)$ son la densidad espectral de la interacción electrón-fonón y de paramagnones respectivamente. En la Fig.1, aparecen estas dos funciones para el caso del Nb. La función $\alpha^2(\omega) F(\omega)$ fue obtenida por Wolf et al.⁽⁶⁾

por medio de experimentos de tunelamiento. La función $P(\omega)$ fue calculada por nosotros para el caso $S=2$, en base a la teoría de Berk y

Schrieffer. Finalmente el parámetro μ^* caracteriza la repulsión Coulombiana entre electrones. Estas dos funciones y el parámetro μ^* caracterizan un material. Al resolver las ecuaciones de Eliashberg, se obtiene la función $\bar{\Delta}(\omega_n) \equiv \bar{\Delta}_n$, la brecha prohibida que caracteriza el estado superconductor, y de ésta, la energía libre, usando una fórmula que se debe a Wada⁽⁷⁾. Así se obtiene la termodinámica. La solución de las ecuaciones de Eliashberg se hace numéricamente⁽⁸⁾. Como ya mencionamos, la versión linearizada de estas ecuaciones vale a $T = T_c$. Esta última, permite obtener T_c y las derivadas funcionales como $\frac{\delta T_c}{\delta P(\omega)}$, que nos dice como cambia la temperatura crítica cuando variamos infinitesimalmente la distribución espectral de paramagnones en una frecuencia particular. También es de interés $\frac{\delta T_c}{\delta \alpha^2(\omega) F(\omega)}$. En la Fig.2, podemos observar la función $\frac{\delta T_c}{\delta P(\omega)}$. Esta función es siempre negativa, de donde deducimos que todos los paramagnones (cuya energía varía entre cero y más de 25 eV) reducen la temperatura crítica del sistema. Vemos además que los más efectivos son las excitaciones de energía muy baja, ya que ahí la función presenta una divergencia hacia menos infinito. Es decir, que los paramagnones de baja energía actúan casi como impurezas paramagnéticas. Vemos también que los paramagnones de muy alta frecuencia son muy inefectivos. La función varía como $\frac{1}{\omega}$ en los dos extremos (hacia 0 y hacia infinito). La divergencia no causa problema porque $P(\omega)$ varía como ω cerca del origen: $\frac{\delta T_c}{\delta P(\omega)}$. $P(\omega)$ no es divergente allí. Esta misma curva muestra que los detalles de $P(\omega)$ no van a ser importantes en el cálculo. En realidad, puesto que la mayoría de paramagnones se encuentran a energías altas, el cambio en la temperatura crítica va a depender fundamentalmente del primer momento inverso de $P(\omega)$ ($\lambda_{\text{espín}}$) y no de todos sus detalles:

$$\Delta T_c = \int_0^{\infty} \frac{\delta T_c}{\delta P(\omega)} \Delta P(\omega) d\omega \sim \int_0^{\infty} \frac{1}{\omega} P(\omega) d\omega \equiv \lambda_{\text{espín}}$$

Estrictamente: $2 \int_0^{\infty} \frac{P(\omega)}{\omega} d\omega = \lambda_{\text{espín}}$ (Para Nb, Rietschel y Winter obtuvieron $\lambda_{\text{espín}} = 0.2$). Esta última conclusión nos permite introducir un modelo para $P(\omega)$ con el fin de simplificar el trabajo numérico. Vamos a tomar

$$P(\omega) = A \delta(\omega - \omega_0)$$

y vamos a elegir $\omega_0 = 400$ meV, una elección muy justificable pero ciertamente arbitraria. Más adelante mostraremos como se puede determinar A.

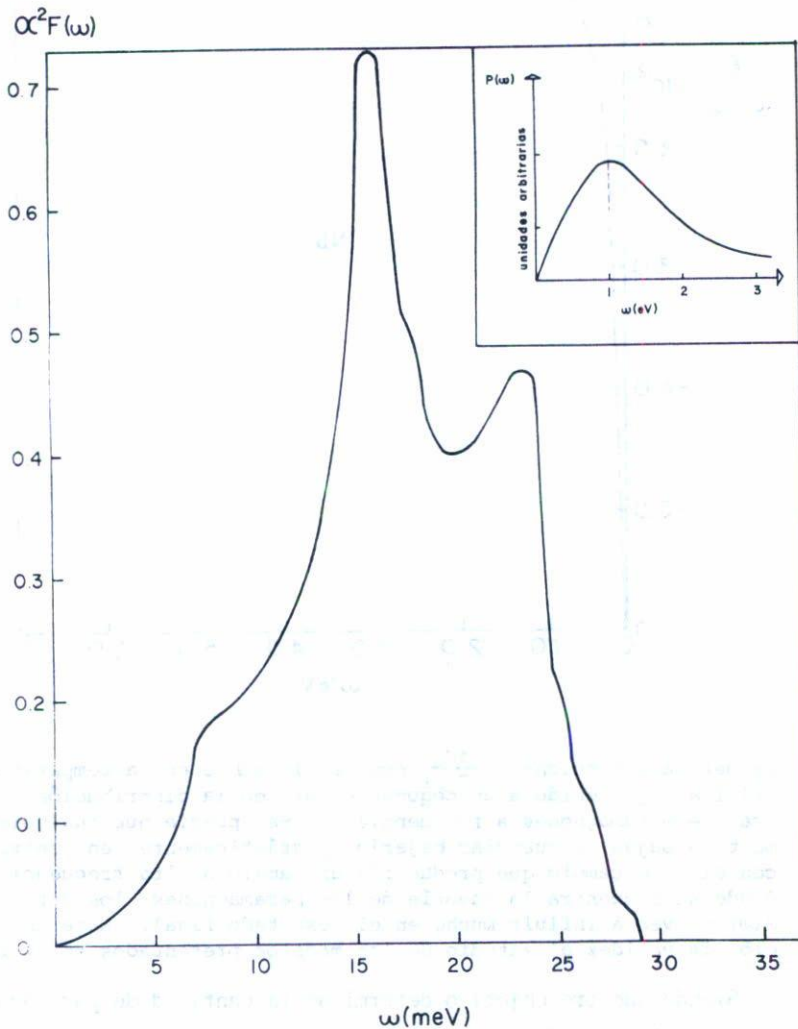


Fig.1 La curva (a) representa la función $\alpha^2 F(\omega)$ obtenida por Wolf et al.(6) de las curvas corriente-voltaje, I-V, por medio de la inversión de las ecuaciones de Eliashberg para el Nb. La curva (b) fue calculada por nosotros para el caso $S=2$, usando el modelo de Berk y Schrieffer para paramagnones(2).

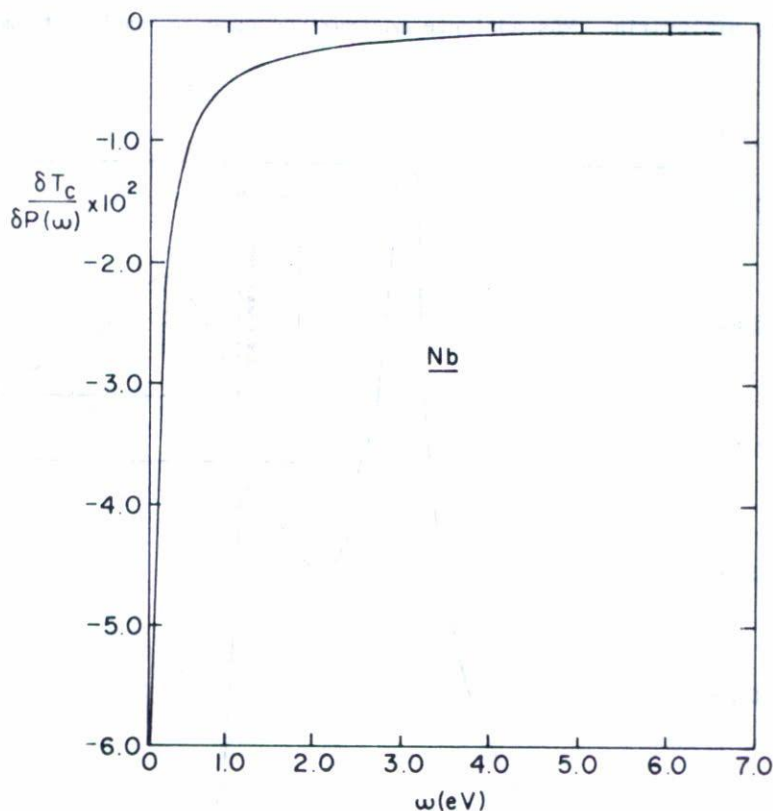


Fig.2 La derivada funcional $\frac{\delta T_C}{\delta P(\omega)}$ nos da el cambio en la temperatura crítica, T_C , debido a un pequeño cambio en la distribución espectral de paramagnones a frecuencia ω . Se aprecia que cualquier aumento a bajas frecuencias bajaría T_C drásticamente, en contraste con el poco cambio que produciría un cambio a alta frecuencia, donde se encuentra la mayoría de los paramagnones: los detalles de $P(\omega)$ no van a influir mucho en el resultado final. Esta observación da validez al estudio de los modelos presentados en el texto.

Siendo nuestro objetivo determinar la cantidad de paramagnones consistente con la termodinámica del Nb en estado superconductor, lo lógico es analizar los datos experimentales para establecer qué cantidad de éstos (ya sea a través del valor de $\lambda_{\text{espín}}$ o de S) es consistente con éstos.

III. SITUACION EXPERIMENTAL

El análisis detallado de los datos experimentales para el Nb en estado superconductor^(5,8,9) permite caracterizar ese material por medio de la Tabla I. Esta tabla muestra los promedios directos de aproximadamente 20 experimentos reportados en los últimos 10 a 15 años. Un análisis cuidadoso demuestra^(5,8,9) que la distribución de los resultados para un mismo experimento es demasiado ancha y no permite que se les tome de base para un análisis cuantitativo. Este hecho nos obliga a estudiar el efecto a través de dos modelos.

TABLA I

T_c °K	$\frac{r}{\text{mJ mole}^{-1}}$ °K ⁻¹	$\frac{\Delta C_V(T_c)}{\text{mJ mole}^{-1}}$ °K ⁻¹	$\frac{C_{es}}{\gamma T_c}$	$H_c(0)$ Gauss	$\frac{\gamma T_c^2}{H_c^2(0)}$	$-\frac{dH_c}{dT_c} \Big _{T_c}$ Gauss °K ⁻¹	max. of D(t)	min. of D(t)
9.16	7.78	139.	2.93	1996.	.153	419.	+ .0018	- .014

Tabla I. Esta tabla fue obtenida como el promedio directo de aproximadamente 15 experimentos estudiados. La variación que muestran entre ellos es considerable, lo cual imposibilita tomarlos de base para una cuantificación del efecto de los paramagnones. Estos valores deben ser tomados, en realidad, como órdenes de magnitud para el Nb.

IV. MODELOS ESTUDIADOS

Para caracterizar la influencia de los paramagnones en el estado superconductor utilizamos dos modelos extremos, uno sin paramagnones-sistema A-donde todo el efecto conjunto que reduce la temperatura crítica se atribuye a la repulsión coulombiana entre los electrones a través del parámetro μ^* y el segundo con paramagnones-sistema B-donde todo el efecto mencionado se atribuye a los paramagnones a través de la constante A (en la fórmula para $P(\omega)$) que así se determina. Ambos sistemas tienen la misma temperatura crítica, $T_c = 9.2^\circ\text{K}$. El cálculo fue repetido con varias de las funciones $\alpha^2(\omega)F(\omega)$ para el Nb que se conocen, tanto las calcula-

das como las obtenidas experimentalmente, con el fin de checar que el efecto no dependa de la densidad espectral electrón-fonón particular que se use. (Véase la Ref. 5).

V. RESULTADOS OBTENIDOS

A. Cuantificación del papel de los paramagnones en Nb

La Tabla II muestra los parámetros obtenidos para ambos sistemas, usando el espectro $\alpha^2(\omega)F(\omega)$ de Wolf et al. Nótese que el valor de $\lambda_{\text{espín}}$ en B, es el máximo posible que puede atribuirse al sistema si se usa el espectro de Wolf. Este valor es inferior a 0.2 obtenido por Rietschel y Winter con otro espectro. Esta última cifra podría resultar un poco elevada. El valor de $\mu^* = 0.243$ es más elevado que el que acostumbra a verse que es de 0.1. Esto indicaría que el Nb sí tiene una cierta cantidad de paramagnones pero, tal vez, no tan grande como lo atribuyen Rietschel y Winter⁽³⁾, ($\lambda_{\text{espín}} \sim 0.2$), sobre todo si creemos que la función $\alpha^2(\omega)F(\omega)$, obtenida por Wolf et al. del experimento, describe mejor el comportamiento del Nb. Es obvio que, en este caso, $\lambda_{\text{espín}}$ debería ser menor que 0.15.

Tabla II

	μ^*	$\lambda_{\text{spín}}$	T_c [°K]	P_0 [meV]
Sistema A	.243	0	9.2	0
Sistema B	0	.15	9.2	31

Tabla II. Características de los dos sistemas estudiados. Para ambos usamos la misma función $\alpha^2(\omega)F(\omega)$. Nótese que la temperatura crítica es la misma.

B. Efecto sobre la densidad de estados

Sin embargo, un resultado más importante es el que se muestra en la Fig. 3, donde aparece la densidad de cuasi-partículas $N(\omega)$ como función de ω . Esta densidad puede obtenerse de la expresión

$$N(\omega) = N(0) \operatorname{Re} \left\{ \frac{\omega}{\{\omega^2 - \Delta^2(\omega)\}^{1/2}} \right\} .$$

La función $\Delta(\omega)$ fue obtenida continuando analíticamente la función $\bar{\Delta}(\omega_n)$ que se obtiene de la solución de las ecuaciones de Eliashberg de la sección II, por el método de aproximantes de Padé. $N(0)$ es la densidad de electrones en el nivel de Fermi para un sólo valor del espín.

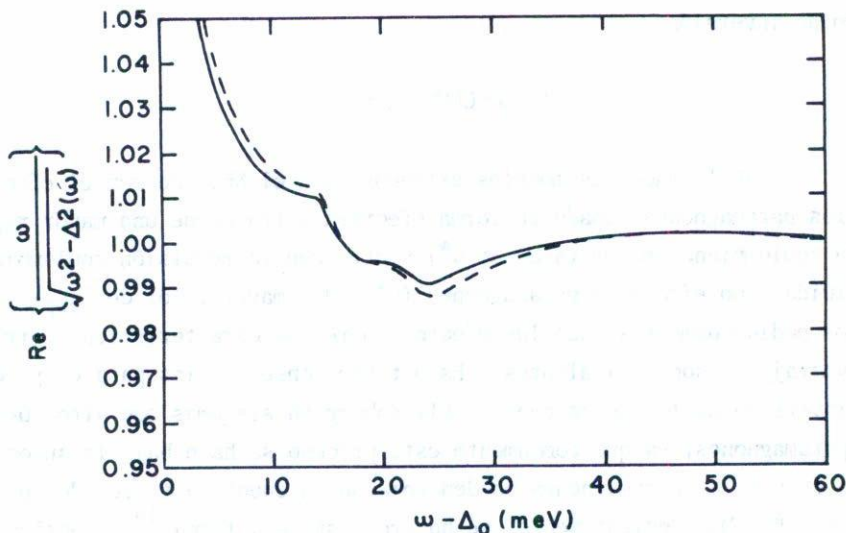


Fig.3 La densidad de cuasipartículas $N(\omega)$ a frecuencias del orden de meV, se ve afectada por la inclusión de paramagnones en una forma que no puede simularse con un alto valor de μ^* . Este resultado tiene consecuencias para el proceso de inversión de las ecuaciones de Eliashberg.

En la Fig. 3, puede observarse que a pesar de que los paramagnones son en su mayoría -¡en este modelo todos!- de alta energía, su presencia influye las características de tunelamiento en energías del orden de milielectrón-voltios. La importancia de este resultado puede apreciar-

se bajo la siguiente consideración: La función $\alpha^2(\omega)F(\omega)$ se obtiene mediante un proceso de inversión de las ecuaciones de Eliashberg. Este consiste en "adivinar" $\alpha^2(\omega)F(\omega)$ y μ^* , y resolver esas ecuaciones desde cuya solución uno puede obtener las características corriente-voltaje, I-V, que se miden en experimentos de tunelamiento. Las características I-V calculadas se comparan con las experimentales. Se modifican $\alpha^2(\omega)F(\omega)$ y μ^* hasta hacerlas coincidir. Este proceso no es tan "a ciegas" como puede parecer ya que $\alpha^2(\omega)F(\omega)$ no difiere mucho de $F(\omega)$, el espectro fonónico, que se puede conocer por dispersión inelástica de neutrones, por ejemplo. La inversión es una técnica completamente confiable. Sin embargo, el resultado aquí obtenido indica que no es correcto atribuir a la repulsión coulombiana (un alto valor de μ^*), el efecto de los paramagnones. Por lo tanto, éstos deben ser incluidos explícitamente en el proceso de inversión.

VI. CONCLUSIONES

Utilizando dos modelos extremos para el Nb, uno con el efecto de los paramagnones tomado en forma efectiva a través de una mayor repulsión coulombiana (mayor valor de μ^*) y otro con la repulsión coulombiana incluida como efecto de paramagnones ($\mu^* = 0$ y mayor valor de $\lambda_{\text{espín}}$), hemos podido demostrar que los efectos sobre las características corriente-voltaje no son equivalentes. Esto tiene consecuencias para el proceso de inversión de las ecuaciones de Eliashberg en sistemas con alto número de paramagnones, ya que comúnmente este proceso se hace bajo la suposición de que los paramagnones pueden tomarse en cuenta a través del parámetro μ^* . Muy recientemente, se ha propuesto una forma⁽¹⁰⁾ efectiva de incluir este efecto a posteriori, por un método que aunque aproximado, es ciertamente prometedor.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo es parte de una investigación realizada por el autor en conjunto con el Prof. J. P. Carbotte y la Dra. J. Daams de la Univ. de Mc Master, Hamilton, Ontario, Canadá, durante un año sabático (1979-1980). El autor agradece la hospitalidad del Dpto. de Física de la men-

cionada Universidad. El autor también agradece la invitación del Dr. R. Barrera del Instituto de Física de la UNAM a dar un seminario sobre este tema. Ese seminario fue basado en este artículo.

REFERENCIAS

1. Gladstone, G., Jensen M.A. y Schrieffer, J.R., en Superconductivity, editado por R.D. Parks, Marcel Dekker, New York, (1969) vol. 2.
2. Berk, N.F. y Schrieffer J.R., Phys. Rev. Lett. 17 (1966) 433.
3. Rietschel, H. y Winter, H., Phys. Rev. Letters 43 (1979) 1256.
4. Janak, J.F., Phys. Rev. B 16 (1977) 255.
5. Baquero, R., Daams, J.M. y Carbotte J.P. JLTP (en prensa).
6. Wolf et al. (comunicación privada).
7. Wada, Y., Phys. Rev. 135 (1964) A1481.
8. Daams, J.M., Ph. D. Thesis (1978). No publicada.
9. Daams, J.M. y Carbotte, J.P., JLTP (en prensa).
10. Daams, J.M., Mitrovic, B. y Carbotte, J.P., Phys. Rev. Lett. 46 (1981) 65.