

Supraleitung in Alkalimetallen?

Autor(en): **Schneider, T. / Stoll, E. / Bühler, W.**

Objektyp: **Article**

Zeitschrift: **Helvetica Physica Acta**

Band (Jahr): **42 (1969)**

Heft 1

PDF erstellt am: **08.08.2024**

Persistenter Link: <https://doi.org/10.5169/seals-114054>

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Inhalten der Zeitschriften. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern.

Die auf der Plattform e-periodica veröffentlichten Dokumente stehen für nicht-kommerzielle Zwecke in Lehre und Forschung sowie für die private Nutzung frei zur Verfügung. Einzelne Dateien oder Ausdrucke aus diesem Angebot können zusammen mit diesen Nutzungsbedingungen und den korrekten Herkunftsbezeichnungen weitergegeben werden.

Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. Die systematische Speicherung von Teilen des elektronischen Angebots auf anderen Servern bedarf ebenfalls des schriftlichen Einverständnisses der Rechteinhaber.

Haftungsausschluss

Alle Angaben erfolgen ohne Gewähr für Vollständigkeit oder Richtigkeit. Es wird keine Haftung übernommen für Schäden durch die Verwendung von Informationen aus diesem Online-Angebot oder durch das Fehlen von Informationen. Dies gilt auch für Inhalte Dritter, die über dieses Angebot zugänglich sind.

Supraleitung in Alkalimetallen?

von **T. Schneider**, **E. Stoll** und **W. Bührer**

Delegation für Ausbildung und Hochschulforschung am EIR, 5303 Würenlingen

(19. III. 68)

Summary. The contribution of the electron-phonon interaction to the density of states and other parameters of the superconducting state are calculated using the pseudopotential approach. On the basis of these calculations we discuss the occurrence of superconductivity in alkali metals.

1. Einleitung

Die Möglichkeit der Supraleitung in den Alkalimetallen wurde von verschiedenen Autoren experimentell [1, 2, 3] und theoretisch [4] untersucht. Die Experimente haben gezeigt, dass bis zu den folgenden Temperaturen keine Supraleitung auftritt: Natrium und Kalium bis $0,08^\circ\text{K}$ [1], Rubidium bis $0,8^\circ\text{K}$ [2] und Cäsium bis $0,35^\circ\text{K}$ [3]. Den Berechnungen von MOREL und ANDERSON [4] folgend muss andererseits angenommen werden, dass die Supraleitung in keinem Metall gänzlich ausgeschlossen werden kann. Nach diesen Berechnungen ist die kritische Temperatur in Natrium von der Grössenordnung 10^{-3}°K . In diesem Zusammenhang ist zu berücksichtigen, dass MOREL und ANDERSON [4] von einer vereinfachten Elektron-Phonon-Wechselwirkung ausgingen. Nachdem das Verständnis dieser Wechselwirkung wesentlich vertieft werden konnte, erscheint es sinnvoll, die Möglichkeit der Supraleitung in einfachen Metallen von neuem zu diskutieren.

In dieser Arbeit behandeln wir die Alkalimetalle. Um den Formalismus prüfen zu können, untersuchen wir auch Aluminium. Dabei benützen wir den Pseudopotential-Formalismus, welcher eine quantitative Diskussion zahlreicher Eigenschaften einfacher Metalle ermöglicht [5, 6, 7].

2. Allgemeines

Wir betrachten ein Elektron im effektiven Feld der übrigen Elektronen und Ionen. Das Energiespektrum dieses Elektrons wird durch die Elektron-Elektronen- und Elektron-Ionen-Wechselwirkung verändert. Der statische Anteil der Elektron-Ionen-Wechselwirkung führt zur üblichen Bandstruktur. Diese Bandstruktur wird durch den dynamischen Beitrag, welcher auf der Elektron-Phonon-Wechselwirkung beruht, modifiziert. Die erwähnten Wechselwirkungen führen somit zu einer Änderung des Energiespektrums und der Zustandsdichte freier Elektronen.

Am absoluten Nullpunkt der Temperatur wird der Beitrag der Elektron-Phonon-Wechselwirkung zur Zustandsdichte durch die folgende Beziehung beschrieben [8, 9]:

$$\frac{N(E_F)}{N_0(E_F)} = 1 + \lambda \quad (1)$$

mit

$$\lambda = \frac{m}{M 4 \pi^2 \hbar^2 k_F n} \sum_{\alpha} \int_0^{2k_F} H_{\alpha}(Q) U_I^2(Q) Q dQ \quad (2)$$

$$H_{\alpha}(Q) = \frac{1}{4 \pi} \int d\Omega \frac{[\mathbf{Q} \cdot \mathbf{e}_{\alpha}(\mathbf{Q})]^2}{\omega_{\alpha}^2(\mathbf{Q})} \quad (3)$$

- m Elektronenmasse; M Masse der Ionen;
 k_F Fermiwellenzahl; E_F Fermienergie;
 n Ionen pro Volumeneinheit;
 $U_I(Q)$ Fouriertransformierte des lokalen und selbstkonsistenten Modellpotentials;
 $\mathbf{e}_{\alpha}(Q)$ Polarisationsvektor eines Phonons des α -ten Astes mit Wellenvektor \mathbf{Q} ;
 $\omega_{\alpha}(Q)$ Frequenz eines Phonons mit Wellenvektor \mathbf{Q} des α -ten Astes.

Hierin wurde eine kugelförmige Fermifläche und ein lokales Pseudopotential $U_I(Q)$ angenommen. Experimentell äussert sich die durch die Elektron-Phonon-Wechselwirkung hervorgerufene Änderung der Zustandsdichte (1) im elektronischen Beitrag zur spezifischen Wärme und im effektiven Kopplungsparameter des supraleitenden Zustandes. Nach NOZIÈRES und PINES [8] besteht zwischen dem effektiven Beitrag der Elektronen zur spezifischen Wärme und dem zugehörigen Wert freier Elektronen der folgende Zusammenhang:

$$\frac{C}{C_0} = (1 + \lambda) (1 + \nu) \quad (4)$$

ν beschreibt den Beitrag der Elektron-Elektronen-Wechselwirkung zur Zustandsdichte auf der Fermifläche. In dieser Beziehung wurden die Bandstruktureffekte vernachlässigt.

Um die Möglichkeit der Supraleitung quantitativ diskutieren zu können, muss die Integralgleichung für die Energielücke gelöst werden. Die Herleitung dieser Gleichung und die damit verbundenen Probleme wurden von SCHRIEFFER [10] eingehend behandelt. Auf der Grundlage dieser Gleichung erhalten wir für die Energielücke den Ausdruck (5). In dieser Herleitung verwendeten wir die folgenden Näherungen: $T = 0$, $\Delta^2(\omega') \sim \Delta_0^2$ und $\Delta_0/\omega_D < 1$. ω' ist die Frequenz der Elektronen im Endzustand und ω_D die Debye-Frequenz. Ferner wurde eine kugelförmige Fermifläche und ein lokales Pseudopotential $U_I(Q)$ angenommen.

$$\ln \frac{2 \omega_D}{\Delta_0} = \left[\frac{\lambda - \mu^*}{(1 + \lambda) (1 - (\gamma/1 + \lambda))} \right]^{-1} \quad (5)$$

mit

$$\mu^* = \frac{\mu}{1 + \mu \ln(E_F)/\hbar \omega_D}, \quad \mu = \frac{1}{2 \pi a_0 k_F} \ln(1 + \pi a_0 k_F)$$

$$\gamma = \frac{m}{M 4 \pi^2 \hbar^2 k_F n} \sum_{\alpha} \int_0^{2k_F} Q dQ U_I^2(Q) \frac{1}{4 \pi} \int d\Omega \frac{[\mathbf{Q} \cdot \mathbf{e}_{\alpha}(\mathbf{Q})]^2}{\omega_{\alpha}^2(\mathbf{Q})} \ln \frac{\omega_{\alpha}(\mathbf{Q})}{\omega_D}$$

a_0 ist der Bohrsche Radius. In der BCS-Theorie besteht zwischen der Energielücke und dem effektiven Kopplungsparameter NV der folgende Zusammenhang:

$$\frac{1}{NV} = \ln \frac{2 \omega_D}{A_0} \quad (6)$$

wobei Supraleitung dann möglich ist, wenn der effektive Kopplungsparameter NV grösser als null ist. Mit (4) und (6) erhalten wir somit, in Übereinstimmung mit MOREL und ANDERSON [4], das folgende Kriterium für das Vorkommen der Supraleitung:

$$\lambda > \mu^* . \quad (7)$$

Ist dieses Kriterium erfüllt, so beträgt die kritische Temperatur T_C [10],

$$T_C = 1.14 \frac{\hbar \omega_D}{k_B} e^{-1/NV} = 1.14 \Theta e^{-1/NV} . \quad (8)$$

3. Resultate und Diskussion

Um den Beitrag der Elektron-Phonon-Wechselwirkung zur Zustandsdichte (2) berechnen zu können, ist die Kenntnis des Pseudopotentials, der Phonon-Dispersion und der Polarisationsvektoren erforderlich. In den Alkalimetallen und Aluminium können diese Grössen als bekannt vorausgesetzt werden [6, 7]. Auf Grund dieser Daten berechneten wir mit Hilfe der Beziehungen (1) bis (8) λ , μ^* , γ , NV , T_C und C/C_0 . Der Beitrag der Elektron-Elektronen-Wechselwirkung zur Zustandsdichte ν (4) wurde von RICE [11] übernommen. Die physikalischen Konstanten und die berechneten Parameter des supraleitenden Zustandes sind in Tabelle 1 zusammengestellt. In Tabelle 2 werden die berechneten und gemessenen elektronischen Beiträge zur spezifischen Wärme verglichen. In Anbetracht der vernachlässigten Bandstruktureffekte darf die Übereinstimmung (Tab. 2) als befriedigend betrachtet werden. Die in Cäsium auftretende Unstimmigkeit wird verständlich, wenn man bedenkt, dass dieses Element unter den Alkalimetallen die deformierteste Fermifläche besitzt [6].

Hinsichtlich der übrigen Parameter des supraleitenden Zustandes (Tab. 1) ist ein direkter Vergleich mit experimentellen Daten nur für Aluminium möglich. Aus Tunnel-Experimenten ergibt sich $NV = 0,173$ [15]. Die Übereinstimmung mit dem berechneten Wert (Tab. 1) ist so gut, wie es in Anbetracht des komplizierten Problems und den verschiedenen Näherungen in der Integralgleichung für die Energielücke, sowie deren Lösung (5) erwartet werden darf. Analoge Berechnungen wurden kürzlich von PYTTE [16] durchgeführt, wobei die Anisotropie der Phononen-Dispersion vernachlässigt wurde. Für λ und γ erhielt Pytte die folgenden Zahlenwerte: Harrison-Pseudopotential, $\lambda = 0,6$, $\gamma = -0,1$. Ashcroft-Pseudopotential, $\lambda = 0,46$, $\gamma = -0,05$. Unter Berücksichtigung der erwähnten Vernachlässigung und der unterschiedlichen Pseudopotentiale ist die Übereinstimmung mit den in Tabelle 1 aufgeführten Zahlenwerten erstaunlich gut.

Wenn wir nunmehr zu den Alkalimetallen zurückkehren, wird ersichtlich (Tab. 1), dass der effektive Kopplungsparameter NV in der Reihenfolge Li, Na, K, Rb, Cs abnimmt und für Rb und Cs negative Werte annimmt. Es scheint somit (7), dass Rubidium und Cäsium nicht supraleitend sind und Kalium eine kaum erreichbare

Tabelle 1

Physikalische Konstanten und berechnete Parameter des supraleitenden Zustandes. k_F in Einheiten von \AA^{-1} , E_F in Einheiten von 10^{-12} erg und Θ , sowie T_C in $^{\circ}\text{K}$.

		k_F	E_F	Θ	λ	μ^*	γ	NV	T_C
Li	bcc	1,117	7,606	335	0,238	0,116	-0,040	0,096	$1,1 \cdot 10^{-2}$
	fcc				0,218		-0,017	0,083	$2,2 \cdot 10^{-3}$
Na	bcc	0,923	5,193	156	0,183	0,114	-0,039	0,057	$3,7 \cdot 10^{-6}$
	fcc				0,173		-0,031	0,048	$1,4 \cdot 10^{-7}$
K	bcc	0,746	3,395	91	0,121	0,115	-0,024	0,005	0
Rb	bcc	0,698	2,972	55	0,106	0,111	-0,017	-0,005	-
Cs	bcc	0,645	2,537	40	0,099	0,110	-0,014	-0,010	-
Al	fcc	1,756	18,818	430	0,503	0,100	-0,252	0,230	6,34

kritische Temperatur besitzt. Dieses Resultat bestätigt die Regel, wonach in der Reihe der Alkalimetalle an der Stelle von Kalium eine abrupte Änderung der Eigenschaften auftritt. Hier möchten wir auf die Kristallstabilität [7, 17] und den Verlauf der effektiven Ion-Ion-Wechselwirkung im direkten Raum [18] hinweisen. Es scheint, dass diese Änderung auf der in Kalium, Rubidium und Cäsium nicht besetzten d -Elektronenkonfiguration beruht. Andererseits gilt es zu berücksichtigen, dass die Integralgleichung für die Energielücke und deren Lösung Näherungen darstellen. Bei dieser Sachlage kann die Möglichkeit der Supraleitung in Rubidium und Cäsium nicht gänzlich ausgeschlossen werden. Aber auch in diesem Fall wird NV so klein sein, dass magnetische Verunreinigungen oder die Hyperfeinstrukturaufspaltung die Supraleitung zerstören könnten.

Tabelle 2

Berechnete und experimentelle Werte des elektronischen Beitrages zur spezifischen Wärme. ν wurde von RICE [11] übernommen.

	$1 + \lambda$	$1 + \nu$	C/C_0	$(C/C_0)_{exp}$
Li	1,23	1,03	1,27	-
Na	1,18	1,06	1,25	1,27 [12]
K	1,12	1,11	1,24	1,25 [13]
Rb	1,11	1,13	1,25	1,26 [13]
Cs	1,10	1,15	1,27	1,43 [13]
Al	1,50	0,99	1,49	1,45 [14]

Hinsichtlich Lithium und Natrium ist zu bemerken, dass unterhalb 78°K beziehungsweise 35°K eine unvollständige Phasenumwandlung von der bcc- in die hcp-Struktur auftritt [7, 17]. Durch Kaltbearbeitung ist es schliesslich möglich hcp- und bcc-Lithium in die fcc-Phase überzuführen [17]. Da die Phasenumwandlungen unvoll-

ständig sind, liegt eine aus hcp- und bcc-Kristalliten bestehende Probe vor. Aus diesem Grund betrachten wir die Zahlenwerte von NV (Tab. 1) und die kritischen Temperaturen $T_C \sim 10^{-2}$ bis 10^{-3} °K für Lithium und $T_C \sim 10^{-6}$ bis 10^{-7} °K für Natrium als realistische Richtwerte für die bei Normaldruck zu untersuchende Probe.

Verdankungen

Wir danken Herrn Prof. W. BALTENSBERGER für anregende Diskussionen.

Literaturverzeichnis

- [1] B. B. GOODMAN, *Nature* 167, 111 (1951).
- [2] E. JUSTI, *Neue Phys. Blätter* 8, 207 (1946).
- [3] B. T. MATTHIAS, T. H. GEBALLE und V. B. COMPTON, *Rev. mod. Phys.* 35, 1 (1963).
- [4] P. MOREL und P. W. ANDERSON, *Phys. Rev.* 125, 1623 (1962).
- [5] W. A. HARRISON, *Pseudopotentials in the Theory of Metals* (Benjamin Inc., New York 1966).
- [6] T. SCHNEIDER und E. STOLL, *Phys. kondens. Mat.* 5, 331, 364 (1966); 6, 135 (1967).
- [7] T. SCHNEIDER und E. STOLL, *Phys. Lett.* 24A, 258 (1967).
- [8] D. PINES und P. NOZIÈRES, *The Theory of Quantum Liquids* (Benjamin Inc., New York 1966, S. 338).
- [9] S. NAKAJIMA und M. WATABE, *Prog. theoret. Phys.* 29, 341 (1963).
- [10] J. R. SCHRIEFFER, *Theory of Superconductivity* (Benjamin Inc., New York 1966, S. 188).
- [11] T. M. RICE, *Ann. Phys.* 31, 100 (1965).
- [12] D. L. MARTIN, *Phys. Rev.* 124, 438 (1961).
- [13] W. H. LIEN und N. E. PHILLIPS, *Phys. Rev.* 133, A1370 (1964).
- [14] F. A. OTTER und D. E. MAPOTHER, *Phys. Rev.* 125, 1171 (1962).
- [15] N. V. ZAVARITSKII, *JETP* 14, 370 (1961).
- [16] E. PYTTE, *J. Phys. Chem. Solids* 28, 93 (1967).
- [17] C. S. BARRETT, *Acta Cryst.* 9, 671 (1956).
- [18] T. SCHNEIDER und E. STOLL, *Solid State Commun.* 5, 837 (1967).