

МУЛЬТИЭЛЕКТРОННАЯ ТЕОРИЯ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ

Хорошавин Лев Борисович

докт.техн.наук, Уральский научно-исследовательский институт архитектуры и строительства (ОАО институт “УралНИИАС”) г.Екатеринбург,

Щербатский Виктор Борисович

канд.техн.наук, Региональный центр новых информационных технологий Уральского государственного технического университета (ГОУ ВПО “УГТУ-УПИ”) г. Екатеринбург,

Якушина Евгения Валерьевна

программист, Региональный центр новых информационных технологий Уральского государственного технического университета (ГОУ ВПО “УГТУ-УПИ”) г. Екатеринбург,

Дьячкова Татьяна Витальевна

канд. химических наук, ведущий научный сотрудник Института химии твердого тела УО РАН г. Екатеринбург.

Реферат

С применением искусственного интеллекта создана теория сверхпроводимости на основе новой частицы – мультиэлектрона. Теория соответствует современным требованиям, объясняет и обобщает известные экспериментальные результаты и устанавливает свойства комнатотемпературного сверхпроводника.

Введение

Нобелевский лауреат в области сверхпроводимости Э. Леггетт [1], опираясь на твердо установленные экспериментальные факты, сформулировал основные требования, которым должна соответствовать современная теория сверхпроводимости (СП):

- 1- использовать заряд носителя тока $-2e$;
- 2- учитывать спин носителя, равный 0 (синглетное состояние);
- 3- объяснить, почему именно в купратах (CuO_2) наблюдается высокотемпературная сверхпроводимость (ВТСП);
- 4- объяснить относительную независимость формирования эффекта ВТСП в смежных слоях купратов;
- 5- установить причину различия в изотопическом эффекте для химических элементов, являющихся низкотемпературными сверхпроводниками (НТСП);
- 6- объяснить эффект сверхпроводимости для d-электронов;
- 7- объяснить наблюдаемые размеры носителей тока в пределах 1..3 нм.;
- 8- выяснить причины возникновения и роль псевдощели в ВТСП, а также взаимодействие электронов в обращенном состоянии с различными спинами.

Все объяснения должны быть даны с единой точки зрения и в итоге теория СП обязана ответить на главный вопрос, каким должен быть сверхпроводник при комнатной температуре (КТСП).

Разработанная и изложенная ниже мультиэлектронная теория СП соответствует вышеперечисленным требованиям.

Метод изучения ВТСП на основе искусственного интеллекта

Новые возможности в установлении природы ВТСП предоставляют информационные технологии на основе искусственного интеллекта в виде нейронных сетей. Авторами предложено использовать аналогию между структурами электронных оболочек Периодической системы элементов и человеческого мозга. Известно, что мозг представляет собой разветвленную сеть, состоящую из нейронов. Периодические свойства элементов в системе Д.И. Менделеева и ассоциативные свойства нейронов в сети обеспечиваются, в том и другом случае, квантовыми эффектами. Моделирование структуры мозга в настоящее время хорошо изучено и доведено до уровня вычислительных программ. Например, многослойная компьютерная модель персептрона способна описать периодические нелинейные зависимости между свойствами элементов практически с любой заданной степенью точности [2]. В случае наличия в Периодической системе «генетической» информации об элементах, ответственных за ВТСП, обученная нейронная сеть позволяет их выявить и определить необходимые свойства.

Поэтому созданию теории СП предшествовало изучение Периодической системы указанным методом. Прежде всего, была установлена целесообразность представления периодических свойств в виде суперматрицы 8- и 10- кратных размеров с выделением особой роли четных элементов [3]. Затем, проверили надежность метода путем определения физико-химических свойств новых химических элементов. Предсказанные нейросетью свойства для элемента № 112 (февраль 2005г.) совпали с его реальными свойствами, установленными позже экспериментально (май 2006г.) [4]. После проверки надежности, нейронная сеть была применена для расчета влияния на температуру сверхпроводящего перехода (T_c) электронных плотностей вероятности в виде волновых функций валентных электронов химических элементов [5]. Выявлена уникальность их волновых свойств, проявляющаяся в виде высокой и сосредоточенной в области малых размеров электронной плотности. Было определено, что переход химических элементов в сверхпроводящее состояние сопровождается появлением качественно новой самостоятельной частицы, образующейся при взаимодействии двух и более электронов. Поскольку известные электронные образования типа “куперовская пара”, “предельно связанная”, “сконденсированная пара” и т.п. в данном случае не соответствовали найденной волновой функции, то эту частицу авторы назвали мультиэлектроном (me).

Предполагаемые причины образования мультиэлектрона

Полученные с помощью искусственного интеллекта результаты, указали на возможную аналогию между зарядонезависимым взаимодействием электронов (e^-) в поле атома при СП и мезонным обменом между нуклонами в модели атомного ядра Х. Юкавы [6]. Мезонная теория основывается на закономерности между радиусом взаимодействия частиц (R_u) и массой обменной частицы (m_x) в виде $R_u = \hbar / (c \cdot m_x)$ (рис.1). Создавая теорию, Юкава знал значение R_u , равное

размеру ядра атома (10^{-13} см), что позволило ему определить массу новой частицы – π – мезона и рассчитать обменный процесс в ядре. Сама частица, как теперь известно, была обнаружена значительно позднее.

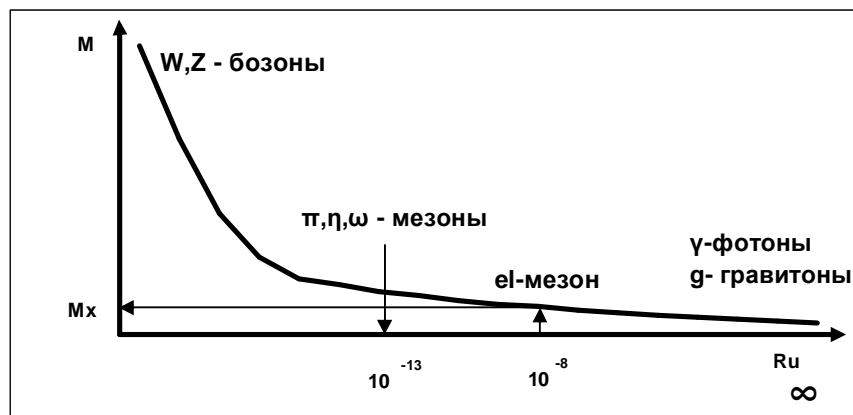


Рис1. Изменение массы носителей обменного взаимодействия между частицами в зависимости от расстояния (см).

При разработке теории СП применили известный подход Юкавы для определения характеристик предполагаемой виртуальной частицы (eI-мезона), которой могут обмениваться между собой e^- в мезонном поле атома. Для этого сопоставили значение R_u для m_e , вычисленное с помощью нейросети [5], с его экспериментальной величиной, найденной путем обработки рентгеновской картины распределения электронной плотности в базовой плоскости кристалла (рис 2а). В итоге получили наиболее вероятное значение **$R_u = 7,48$ нм**. Остальные параметры eI-мезона нашли по формулам Юкавы ($m_x = 26329$ эв (5,1% от массы e^-), изоспин 1, заряд 0, время взаимодействия $\tau = 2,3 \cdot 10^{-20}$ сек). Таким образом, eI-мезон занимает по массе промежуточное место между известными частицами: π^0 -мезоном и фотоном и согласно классификации частиц является псевдоголдстоуновским бозоном [7].

Юкава неоднократно подчеркивал, что его обменное взаимодействие носит универсальный характер. Например, применяют потенциал Юкавы для расчета химической связи, в предположении, что атомы обмениваются парой электронов как бозоном [8]. Электромагнитное взаимодействие также является частным случаем потенциала Юкавы при $m_x = 0$. Приведем ряд известных физических эффектов и экспериментальных фактов, которые косвенно подтверждают, что в поле “мезонного облака” атома возможно указанное взаимодействие между e^- :

- фотоэффект в He_4 , когда в начальный момент наблюдается вылет из атома связанной пары e^- , фиксируемой как m_e [9];

- эффект Рамзауэра, при котором наблюдается электронная “сверхпроводимость” в благородных газах [10]. Здесь возникновение и распад m_e происходит в поле нейтрального атома, в результате чего закон рассеивания e^- такой же, как и в случае резонансного рассеивания пучков тяжелых заряженных частиц – протонов, обменивающихся π -мезонами [11];

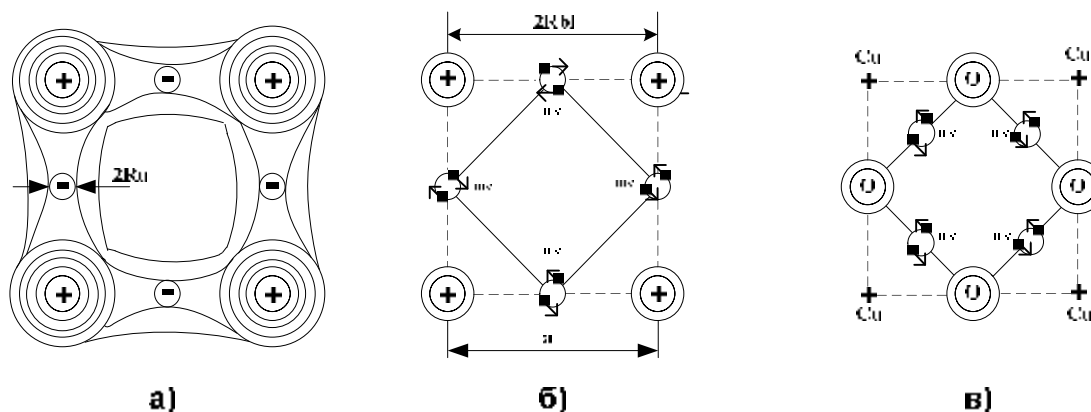


Рис 2. Аналогия в расположении мультиэлектрона в НТСП и ВТСП:

- а) определение радиуса Юкавы на основе рентнограммы электронной плотности в решетке алмаза по данным [15];
- б) электронная подрешетка из me в простых НТСП;
- в) электронная подрешетка из me на примере купратов в ВТСП.

-наличие в кристалле BiJ_3 биелектрона Гросса, энергетический спектр которого является спектром me [12];

-зафиксированные локальные “пики” электронной концентрации (горячие точки особенностей ван Хова), возникающие на поверхности Ферми при СП и соответствующие месту расположения me в кристалле [13];

-обнаруженная избыточная электронная плотность в средней точке между двумя соседними атомами Si в направлении (111) в его кристаллической решетке и равная электронной плотности me . Избыток плотности вызван обменным взаимодействием двух валентных e^- с помощью третьей частицы при образовании ими ковалентной связи[14];

-наличие запрещенного рентгеновского отражения (222) в кристалле алмаза, указывающего на повышенную концентрацию e^- (0,4 электрона, что совпадает с её приведенным значением для me), участвующих в ковалентной связи между соседними атомами [14].

Применение рентгеновских дифракционных методов и существующих способов электронной диагностики, из-за их ограниченного разрешения, не позволяет на современном этапе надежно идентифицировать me в твердом теле [14]. Тем более затруднительно обнаружить экспериментально e^- -мезон, имеющий прогнозируемую малую массу и нейтральный заряд.

Установленное с помощью искусственного интеллекта и метода Юкавы значение R_{Yu} было использовано в математической модели СП.

Математическая модель ВТСП на основе мультиэлектрона

Физическая постановка и математическая формулировка задачи расчета СП выполнены упрощенными и идеализированными. Однако идеализация и упрощения являются общепринятыми и апробированными на практике, что позволяет с достаточной точностью выполнять необходимые расчеты Тс.

Физическая постановка задачи. Приняли, что носителем заряда при СП является me , образующий простейшую водородоподобную систему из связанных e^- . Связанное состояние возникает при существенном сближении валентных e^- отдельных атомов как в случае образования ковалентной связи, так и при их движении на поверхности Ферми в ячейке кристалла (рис.3). Сближение происходит при охлаждении, когда расстояние между атомами уменьшается. Электроны рассмотрели с противоположно направленными спинами, когда, согласно принципу Паули, между ними возможно возникновение связанного состояния с общим спином равным нулю. Взаимодействие двух e^- осуществляется в результирующем поле сил, определяемом одновременно потенциалами Юкавы и Кулона. Силы Кулона для e^- , имеющих одинаковый по знаку заряд, являются отталкивающими силами.

Приняли, что при образовании me кинетическая энергия составляющих e^- переходит во вращательную энергию вокруг их общей оси и компенсируется потенциальной энергией притяжения. Следовательно, по отношению к кристаллической решетке me имеет момент и спин, равные нулю, отрицательный заряд $2e^-$ и малые размеры. Если me не участвует в ковалентной связи и находится в зоне проводимости, то в электрическом поле он становится носителем тока, который при своем движении не испытывает рассеивания на решетке.

Таким образом, me представляет собой квантовую частицу в виде своеобразного “электронного иона”, который находится в состоянии электростатического равновесия с окружающими его электронами и атомами.

Требуется определить размеры me , его энергию связи (диссоциации), определяющую Тс и условия образования.

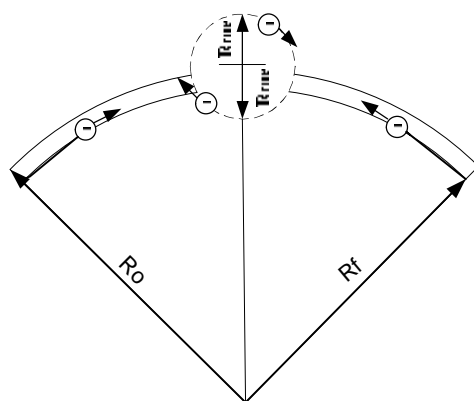


Рис.3. Образование мультиэлектрона вблизи поверхности Ферми (обозначения в тексте).

Математическая формулировка задачи. Условия образования и свойства мультиэлектрона описали следующими основными зависимостями

$$E_{\text{пост}} + E_{\text{кул}} + E_U + E_{\text{вращ}} + E_{\text{колеб}} + E_{\text{возмуц}} = E = -E_{\text{св}}; \quad (1)$$

$$-Cu \frac{1}{Rme} \exp\left(-\frac{Rme}{Ru}\right) + \frac{2n^2 r_b}{Rme^2} + \frac{1}{Rme} = -E_{\text{св}}; \quad (2)$$

$$-\frac{1}{Ro} + \frac{Rf}{Ro^2} = -E_{\text{св}}; \quad (3)$$

$$\frac{k_b Tc K_q}{2Ru\alpha} = |-E_{\text{св}}|; \quad Ro \leq r_b^* = \frac{e^2}{2E_u e^2}; \quad (4)$$

$$\frac{dR}{da} = \frac{Rbl - Ro}{Rbl K_{mp} Tc^2 + Rme K_{me_{mp}} Tc} = \exp(C_1 + C_2 \text{Ln}((Rbl K_{mp} Tc^2 + Rme K_{me_{mp}} Tc)^{-1})) \quad (5)$$

и вспомогательными уравнениями:

$$-\frac{1}{Rbl} + \frac{Rf}{Rbl^2} = -E_{\text{св}}(T_{\text{пл}}), \quad r_b = \frac{\hbar^2}{m_{\text{ме}} e^2}, \quad m_{\text{ме}} = \frac{m_e m_e}{m_e + m_e}, \quad Rf = \frac{1}{\sqrt[3]{3p^2 n_e}}, \quad n_e = \frac{zN_a \rho}{M}, \quad (6)$$

$$K_{mp} = \frac{g}{3B} \left(\frac{12p^4 N_a k_b}{5} \left(\frac{Tc}{q_D} \right)^3 + \frac{p^2 N_a k_b Tc}{T_f} \right), \quad g = \frac{p^2 N_a k_b^2 z}{2E_f}. \quad (7)$$

Принятые обозначения: $E = -E_{\text{св}}, E_{\text{пост}}, E_{\text{колеб}}, E_{\text{кул}}, E_U, E_{\text{вращ}}, E_{\text{возмуц}}, E_{\text{и}}$ – энергия связи, поступательная, колебательная, Кулона, Юкавы, вращательная и возмущения, ионизации соответственно; Cu – константа Юкавы; Rme – классический радиус me ; n – главное квантовое число me ; r_b, r_b^* – радиусы Бора для me и ионизации; Ro – радиус электростатического равновесия me в ячейке кристалла; Rf – радиус поверхности Ферми; Rbl – половина расстояния между ближайшими соседями; k_b – постоянная Больцмана; K_q – координационное число; α – постоянная Маделунга; Ru – постоянная Ридберга; a – постоянная решетки; $K_{\text{тр}}$ – коэффициент термического расширения решетки; $K_{me_{\text{тр}}}$ – коэффициент термического расширения me ; C_1, C_2 – коэффициенты адаптации модели; $T_{\text{пл}}$ – температура плавления кристалла; ε – диэлектрическая проницаемость; \hbar – постоянная Планка; e – заряд электрона; $m_{\text{ме}}$ – приведенная масса me ; m_e – масса электрона; n_e – электронная концентрация; z – валентность; N_a – число Авогадро; ρ – плотность; M – атомная масса; γ – коэффициент Грюнайзена; B – объемный модуль упругости; θ_D – температура Дебая; T_f, E_f – температура и энергия Ферми;

Особенности модели, базы исходных данных и решения

В рассмотренной физической постановке определяющим является компенсация кинетического момента e^- и электростатическое взаимодействие me , поэтому расчеты производили в упрощенном варианте, приняв в (1) $E_{\text{пост}} = E_{\text{колеб}} = E_{\text{возмуц}} = 0$ и при $n=1$. Уравнение (2) описывает конфайнмент (удержание) короткодействующими силами Юкавы электронов в me в зависимости от расстояния. Оно содержит дополнительный член, учитывающий квантование орбит по правилу Бора для атома водорода. Зависимость (3)

отражает классическую ионную связь [14], возникающую из-за компромисса между кулоновской силой притяжения и силой отталкивания центрального поля, действующего на расстоянии R_f . Радиусы R_{me} и R_o являются равновесными, определяющими размеры и местоположение в решетке m_e для искомой $-E_{св}$ и, согласно, (4) T_c . Условие $R_o \leq r_b^*$ определяет нахождение m_e в зоне проводимости. При $R_o = R_{bl}$ уравнение (3) переходит в зависимость (6) для ковалентной связи с энергией $-E_{св}(T_{пл})$. Таким образом, ковалентная связь представляется как частный случай ионной связи с участием m_e . По известным для кристалла $-E_{св}(T_{пл})$ и R_{bl} , находится соотношение K_v/a для m_e . Эмпирическая зависимость (5) в относительной форме связывает параметры m_e с размерами кристаллической решетки при её термическом расширении. Знаменатель (5) представляет линейную суперпозицию изменения размеров решетки и m_e . Коэффициенты C_1 и C_2 служат для адаптации модели к реальным условиям. Остальные уравнения соответствуют классическим представлениям свободного электронного газа Ферми и теории теплоемкости решетки по Дебаю. В итоге система трех основных уравнений (2), (3) и (5) содержит три неизвестных R_{me} , R_o и T_c и, следовательно, имеет решение.

Использованная в расчетах база данных, содержала только общеизвестные и доступные сведения о физико-химических свойствах элементов и НТСП, приведенных в справочниках и учебных пособиях [14,15,16]. Численные значения были взяты “как есть”, без какой-либо подгонки под модель. Характеристики ВТСП соответствовали значениям, приведенным в [17]. Численное значение константы Юкавы приняли такое же, как и для сильного взаимодействия нуклонов, с поправкой на расстояние из-за эффекта поляризации вакуума. $C_u = 41,1$ показывает, во сколько раз силы Юкавы превышают силы Кулона на расстоянии конфайнмента электронов [7].

Решение системы уравнений производили численным методом с помощью компьютерной программы, составленной с использованием нейрорепакетов ExNP, SNN 4.0F и процедур Excel.

Адаптация математической модели и проверка адекватности

Адаптацию провели путем определения C_1 и C_2 методом статистической обработки известных экспериментальных данных по НТСП и ВТСП, представленных в виде обобщающей зависимости (5). Результаты обработки приведены на рис. 4.

В итоге получены значения для $C_1 = 0,507138219$ (с ошибкой 7,3%) и $C_2 = 0,994150391$ (с ошибкой 0,5%). Показатель надежности адаптации в виде коэффициента корреляции для (5) составил $r = 0,9987$. Общая стандартная ошибка не превысила 23,2%, относительная - 17,7%. Поэтому был сделан вывод о достаточной степени адекватности разработанной математической модели СП и её пригодности для практического применения.

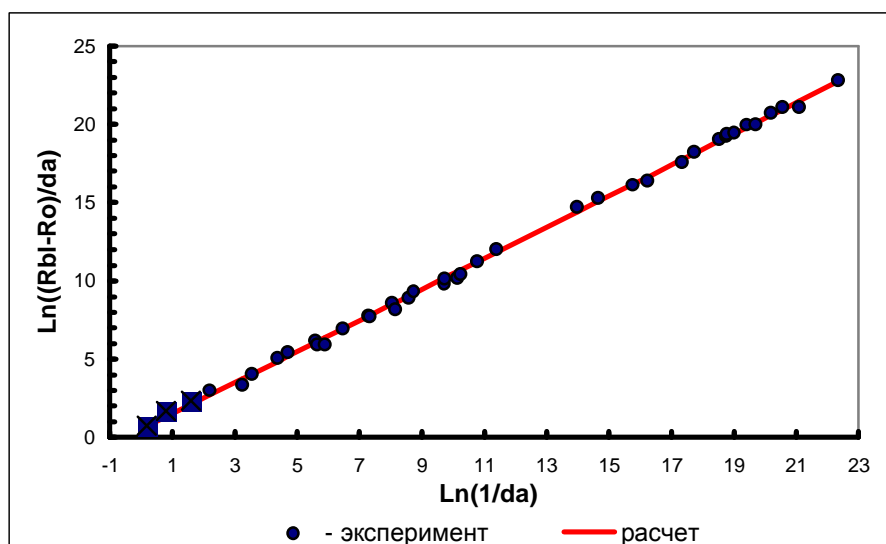


Рис.4. Обобщающая НТСП и ВТСП зависимость для адаптации и проверки адекватности математической модели m_e (квадратные точки - ВТСП, расположение точек соответствует ряду: $YBa_2Cu_3O_7$ - $SrNdCuO_2$ - $Bi_2Sr_2LaCuO_6$ - La - Se - Bi - Pb - Ba - Cs - Hg - P - Tc - Nb - Te - In - Ga - Sn - Tl - Ge - Sb - Si - V - Ta - Ce - Th - Y - Al - Zn - Cd - Re - Os - Ru - As - Mo - Zr - Ti - Ir - Hf - Be - W).

Свойства мультиэлектрона и сравнение их с известными теориями сверхпроводимости

Основные параметры и энергетические характеристики мультиэлектрона приведены в таблице 1 и на рис.5. Максимальная величина энергии связи (глубина “потенциальной ямы”) для m_e достигает $\sim 8,8$ эВ. Этой энергии достаточно для образования известных ковалентных связей в химических элементах и соединениях. В свободном состоянии m_e её значение ($E_{св} \sim 10^{-4}$ эВ) мало и частица может находиться за пределами «потенциальной ямы» на значительном расстоянии в результате туннельного эффекта (рис. 6) (по аналогии с дейтроном). Для $T_c = 300K$ расстояние, на котором имеет место туннельный эффект, равно 1,8 нм, а при $T_c = 10K$ – 9,6 нм. При исследованиях ВТСП эти расстояния фиксируются как размеры частицы. Туннельный эффект ответственен за коллективные процессы в кристалле, возникающие при СП.

Изотопический эффект для m_e получается естественным образом, так как массовое число M входит в расчетные выражения (6). Это позволяет обобщить экспериментальные данные по изотопическому эффекту и объяснить причину различной чувствительности влияния M на T_c . Результаты такого обобщения показаны на рис.7. Они имеют коэффициент корреляции $r = 0,948$ и стандартную ошибку 2,1%. Наглядно видно, что причиной неодинаковой чувствительности элементов к изотопическому эффекту является различное расположение в них m_e относительно поверхности Ферми, которое зависит от разности $(R_o - R_f)$ (см.рис.3). В свою очередь, указанная разность определяется индивидуальными для каждого элемента соотношением (K_q/α) и валентностью z .

Основные свойства мультиэлектрона

№ п/п	Параметр	Обозначение	Размерность	Значение
1	Приведенная масса	m_{me}	Ед. массы e	0,5
2	Заряд	e_{me}	Ед. заряда e	- 2
3	Спин	S	\hbar	0
4	Константа Юкавы	C_u	-	41,1
5	Радиус Юкавы	R_u	Ат.ед	0,141353
6	Масса обменной частицы	m_x	эв	26 329 ^{*)}
7	Радиус мультиэлектрона классический	R_{me}	Ат.ед.	0,13256609 ^{**)}
8	Энергия связи	$E_{св}$	эв	0,000294421 ^{**)}

*) - 0,051 от m_e ;

***) - средние величины для НТСП.

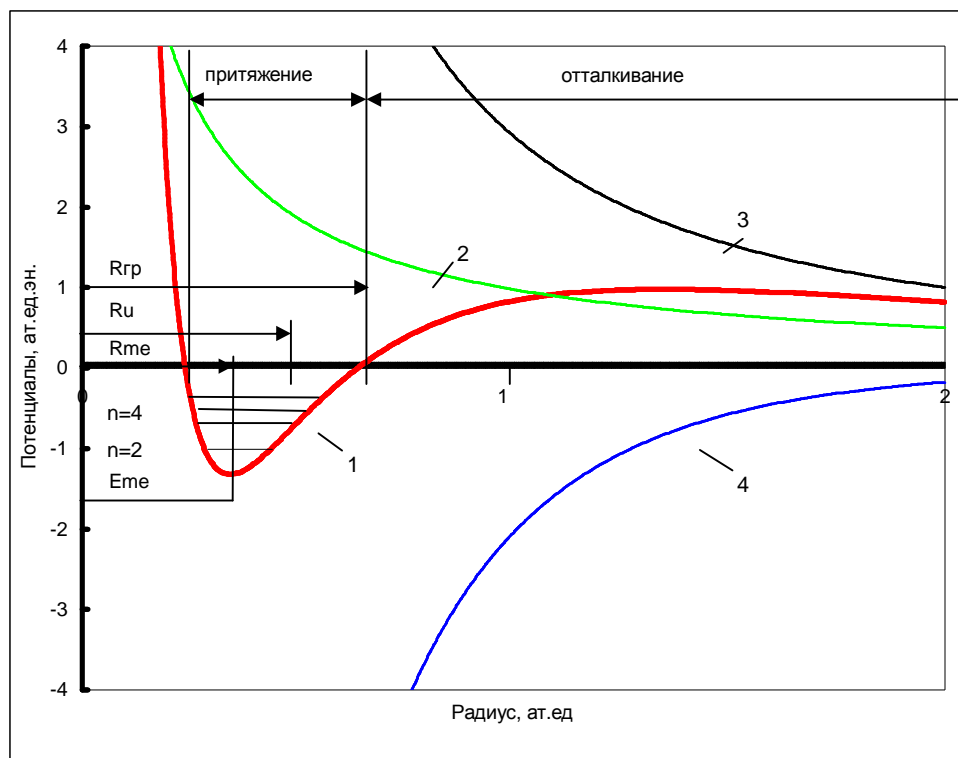


Рис.5. Энергетические зависимости для мультиэлектрона: 1 – энергия m_e , 2- энергия Кулона, 3- добавка к закону Кулона, учитывающая квантование орбиты m_e , 4- энергия Юкавы, R_{rp} – граница притяжения и отталкивания ($E_{св}$ условно показана не в масштабе).

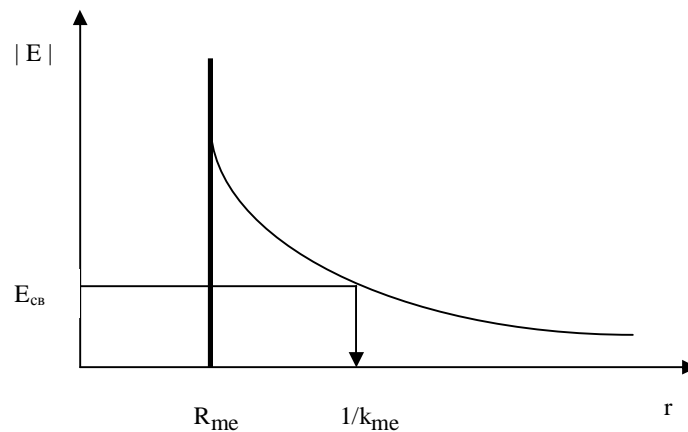


Рис.6. Зависимость между энергией (E) и расстоянием (r) для определения волнового вектора мультиэлектрона:
 R_{me} , k_{me} – радиус и волновой вектор me , соответственно;
 $1/k_{me}$ – расстояние, на котором происходит проникновение me сквозь потенциальный барьер путем туннельного эффекта.

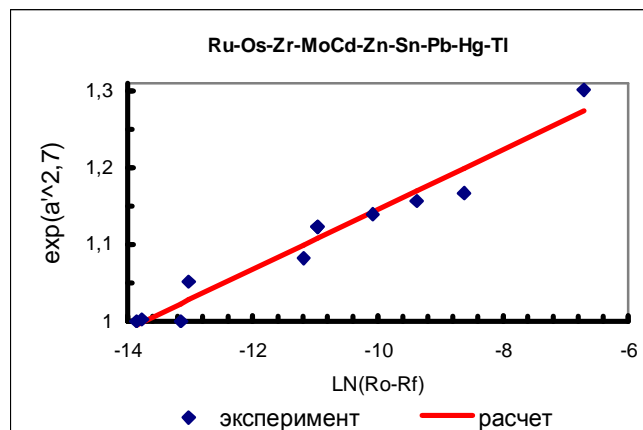


Рис.7. Изотопический эффект мультиэлектрона
(параметр a' соответствует зависимости $M^{a'}Tc=const$,
расположение экспериментальных точек
соответствует ряду элементов, указанному вверху).

Влияние электронной концентрации на Tc показано на рис.8. Экстремальный характер зависимости определяется соотношением (Rf/Ro^2) , входящим в (3). При увеличении электронной концентрации $Rf \downarrow$, а $Ro \uparrow$. В итоге имеет место оптимальная закономерность для Tc , наблюдаемая на практике [17].

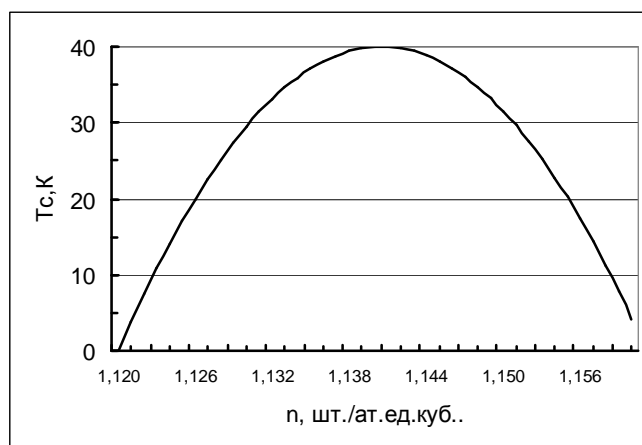


Рис.8. Расчетная зависимость T_c от электронной концентрации (n) для ВТСП $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (LSCO) с $T_c=40$ К.

Аналогичным путем можно проследить зависимости для магнитного поля или других возмущающих воздействий, задав необходимое $E_{\text{возмущ}} \neq 0$.

Потенциал Юкавы не накладывает ограничений на количество взаимодействующих электронов и их тип (s- или d-электроны). Эти особенности можно учесть, заменив (2) уравнением Шредингера для распределения электронной плотности вероятности в ме.

Сравнение параметров ме с характеристиками общепринятых теорий СП позволило установить их взаимосвязь. Например, теория БКШ [18] для расчета размера энергетической щели СП применяет выражение:

$$\Delta = 1,76k_B T_c.$$

Сравнение данной формулы с (4) показывает, что эмпирическая характерная величина 1,76 – это не что иное, как соотношение (K_q/α) для ме. Усреднение всех известных НТСП и ВТСП дает $(K_q/\alpha)=1,9$. Следовательно, модель ме позволяет определять эмпирическую константу в БКШ расчетным путем и, тем самым, уточняет известную теорию.

Конечный радиус корреляции параметра порядка $\xi(T)$ в теории Гинзбурга-Ландау [18] – является аналогом $1/k_{\text{ме}}$ для ме.

В теории БЭК (Бозе-Эйнштейна) [19] - радиус капли электронного конденсата R_k аналогичен $R_{\text{ме}}$.

Таким образом, модель ме уточняет и обобщает известные теории СП.

Эффект обратнотемпературной сверхпроводимости (ОТСП)

Уникальным свойством ме является то, что он имеет отрицательный коэффициент термического расширения $K_{\text{ме,тр}}$, который является следствием конфайнмента e^- , описываемого (2). Закономерность изменения $K_{\text{ме,тр}}$ показана на рис.9. Она объясняет процессы сжатия и расширения решетки, практически наблюдаемые в НТСП и ВТСП как температурные аномалии [20] и учитывает это явление в расчетах T_c .

Если $T < T_c$, то $K_{\text{ме,тр}}$ по абсолютной величине больше $K_{\text{тр}}$ и решетка сжимается, обеспечивая НТСП и ВТСП. В случае $T_c < T < T^*$, преобладает термическое расширение, при котором не выполняется условие $R_0 \leq r_b^*$ и ме,

хотя и существует, но не сверхпроводит, так как находится в запрещенной зоне. В итоге образуется псевдощель Δ^* , наблюдаемая экспериментально [20].

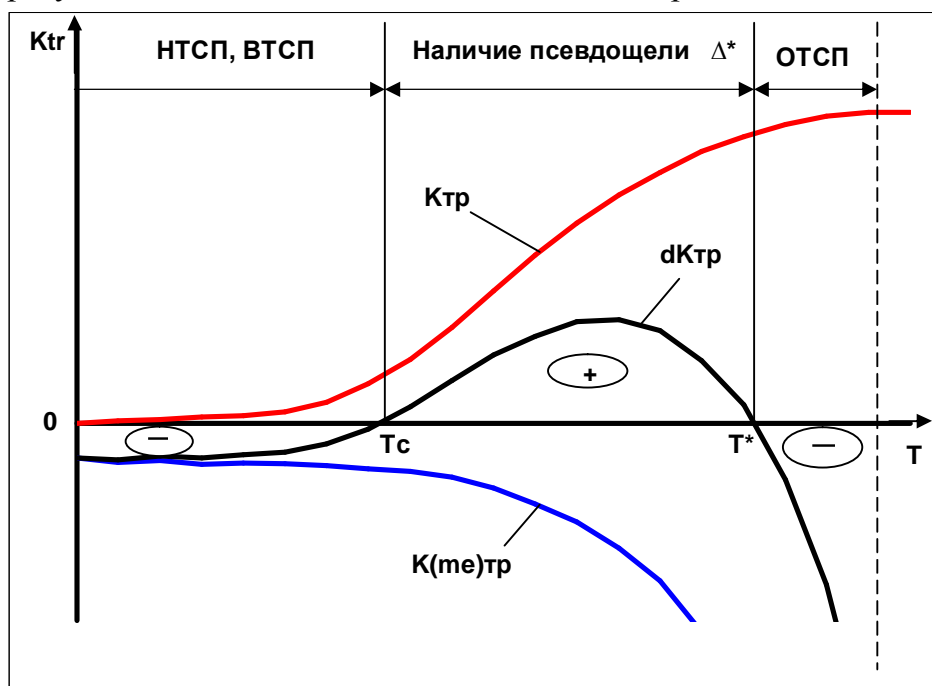


Рис.9. Расчетный эффект обратнотемпературной сверхпроводимости (ОТСП) ($dK_{тр}$ -изменение суммарного коэффициента термического расширения кристалла; T^* -температура образования псевдощели; \pm - зоны термического расширения и сжатия).

При $T > T^*$ снова происходит сжатие и становится возможен эффект ОТСП, при котором сверхпроводимость возникает при нагреве кристалла. Однако, при дальнейшем росте температуры, если тепловое возмущение превысит $-E_{св}$, то me распадается. В случае участия me в ковалентной связи может происходить фазовое изменение или разрушение структуры решетки (плавление кристалла). Из рис.9 видно, что температурный диапазон ОТСП относительно узок и относится к нестабильной области существования решетки. Это приводит к трудностям практического обнаружения прогнозируемого эффекта ОТСП, из-за размытости указанных температурных границ переходов и свойств кристалла.

Слоевой характер расположения электронных подрешеток в ВТСП (см.рис.2в) вызывает относительную независимость образования me в слоях купратов. Так, в реальных кристаллах всегда имеются те или иные слоистые неоднородности, что приводит к разности $-E_{св}$ для me в слоях и возникновению многощелевых СП. Поэтому КТСП следует ожидать в таких кристаллах, где имеется наибольшая вероятность образования электронной подрешетки из me . В купратах такую вероятность предоставляют, в первую очередь, атомы кислорода (О) (см.рис.2.в). T_c в них определяется комплексом физико-химических свойств О: $T_{пл}=54,8K$, M , ρ , z , B , $\theta_D, (K_ч/\alpha)$. Модель me указывает, что эти свойства влияют на T_c взаимнокомпенсирующим образом, поэтому простая замена О для получения эффекта КТСП, например, на галогены не приносит необходимого

результата. Для ответа на вопрос, каким должен быть КТСП, необходимо рассмотреть комплексный механизм СП на основе те.

Мультиэлектронный механизм сверхпроводимости

Акад. В.Л. Гинзбург подчеркивал, что в реальности одновременно присутствуют разные механизмы СП: электронный, фононный, экситонный [21]. Модель те позволяет рассмотреть совместное влияние на T_c электронного и фононного механизма на основе зависимости (5), которую представили в виде функции $T_c=f(da)$ и привели на рис.10.

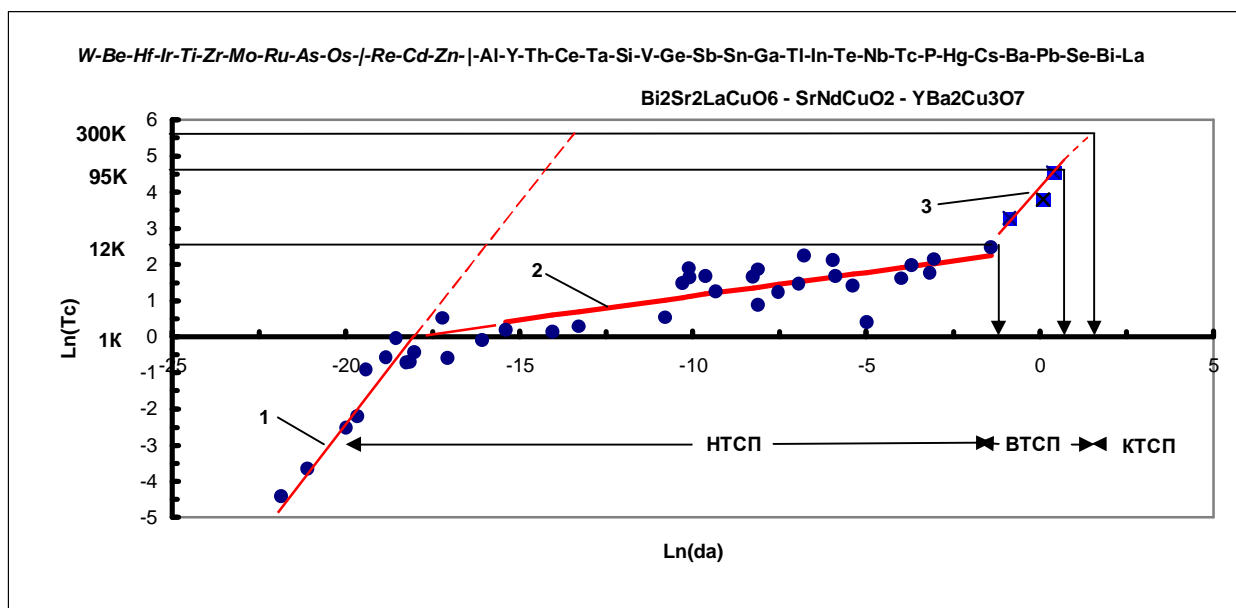


Рис10. Влияние термического расширения решетки на T_c :

- 1- преобладание электронного механизма;
- 2- преобладание фононного механизма в НТСП;
- 3 - компенсация фононного возмущения в ВТСП (купраты) (расположение экспериментальных точек соответствует порядку названий химических элементов и соединений: W..Os–элементы с отрицательным расширением; Re..Zn– элементы переходной группы; Al..La –элементы с положительным расширением).

При низких ($T_c=0,01..1K$) температурах фононные колебания в решетке практически отсутствуют и преобладает электронный (мультиэлектронный) механизм СП. Процесс характеризуется степенью эффективности в виде коэффициента, отражающего угол наклона обобщающей зависимости (1) (см.рис.10) к оси абсцисс и равного 0,82. При $T_c=1..12K$ преобладающим становится фононный механизм СП, согласно наклона зависимости (2), его эффективность понижается до 0,12, т.е. почти в 7 раз. В купратах, при $T_c=40K$ и выше, зависимость (3) снова имеет высокую крутизну, характерную для электронного механизма СП с эффективностью 0,88. Последнее становится возможным потому, что в электронных подрешетках с те имеет место сильное подавление тепловых колебаний “химическим” сжатием кристалла.

С помощью модели те установлено, какой размер решетки и коэффициент термического расширения должен иметь КТСП. Значения этих параметров приведены на рис.11.

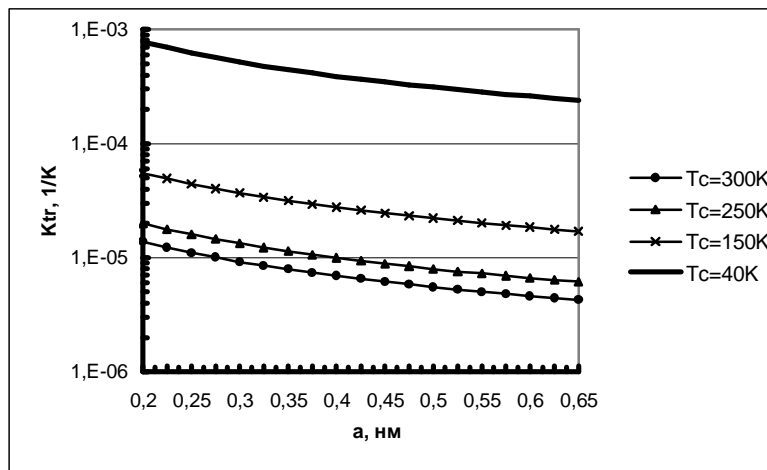


Рис11. Необходимые расчетные значения коэффициента теплового расширения и размеров кристаллической решетки для заданной T_c.

В реальности, одновременно с термическим расширением происходит изменение удельной электронной концентрации в объеме решетки. С помощью модели те возможно учесть и это явление (см.рис.8).

Экспериментальное подтверждение мультиэлектронной теории СП

Большой практический материал по синтезу и исследованию структурных и физических свойств ВТСП накоплен в ИХТТ УрО РАН. [22-25]. В качестве примера экспериментальной проверки мультиэлектронной теории сверхпроводимости здесь специально представлены объекты, являющиеся «родительскими» для всех купратных ВТСП. Этот класс сверхпроводников на основе SrCuO₂, получивших в литературе название “infinite layer” или IL («бесконечнослоевой»). Структура его нестабильна и стабилизируется кальцием (Sr_{1-x}Ca_xCuO_{2-δ}). Меняя x и δ, можно сделать это соединение как дырочным, так и электронным. Удивительным фактом является то, что в дырочном соединении T_c=110-120К, а в электронном – T_c=40К, при этом тип структуры остается неизменным. Кроме того, в этих соединениях отсутствует апикальный кислород. Эти факты также могут быть учтены мультиэлектронной теорией СП, использующей универсальный потенциал Юкавы.

Экспериментальная проверка теории заключалась в следующем. Вначале, на основе структурных данных как исходного IL-SrCuO₂, так и для допированных с различной степенью ВТСП-препаратов, были рассчитаны оптимальные параметры решетки, необходимые для возникновения СП свойств (табл.2). Мультиэлектронная теория СП дала прогноз возникновения эффекта ВТСП только для структуры Sr_{0,9}Nd_{0,1}CuO₂. Затем, было произведено определение T_c для этих соединений. Теоретическое значение T_c=40К для прогнозируемого соединения совпало с его экспериментальным значением (см.табл.2). В остальных структурах, как и ожидалось, эффект ВТСП обнаружен не был.

Таблица 2
Экспериментальное подтверждение мультиэлектронной теории СП

Состав	Условия синтеза			Размеры решетки		T _c , К расчет	T _c , К эксперимент
	P, ГПа	T, °C	τ, мин	a, нм	c, нм		
SrCuO ₂	4	800	2	0,39268(3)	0,34329(3)	не ВТСП	-
Sr _{0,5} Ca _{0,5} CuO ₂	4	950	5	0,38895(3)	0,33053(3)	не ВТСП	-
Sr _{0,9} Nd _{0,1} CuO ₂	4	700-800	30	0,39435(5)	0,33952(5)	40	40
Sr _{0,9} Li _{0,1} CuO ₂	4	800	2	0,39232(5)	0,34278(7)	не ВТСП	-

Далее, синтезированный ВТСП Sr_{1-x}Nd_xCuO₂ (x=0,10..0,13; T_c=40 К) применили для экспериментального подтверждения нового эффекта обратнотемпературной сверхпроводимости (ОТСП), предсказываемого мультиэлектронной теорией СП. Этот эффект был обнаружен и установлен при температуре T_{ОТСП}=773 К. Подробное описание определения эффекта сжатия ВТСП для этих условий приведено в экспериментальной работе [23].

Успешные результаты экспериментальной проверки разработанной мультиэлектронной теории СП позволили сформулировать основные практические требования к КТСП.

Каким должен быть сверхпроводник при комнатной температуре

1. КТСП должен иметь электронную подрешетку из мультиэлектронов.
2. Соотношение размеров кристаллической решетки и ее коэффициента термического расширения должно обеспечивать эффективное подавление фононной составляющей.
3. Электронная концентрация в КТСП должна обеспечивать образование мультиэлектронов и их нахождение в зоне проводимости кристалла.
4. Структура КТСП должна содержать дифференциальные слои с отрицательными и положительными коэффициентами термического расширения для реализации эффекта обратнотемпературной сверхпроводимости (ОТСП).

Последнее требование совпадает с прогнозом акад. В.Л. Гинзбурга о слоевой структуре будущего КТСП [21].

Конкретные значения параметров для выбранного типа КТСП следует определять с помощью мультиэлектронной теории сверхпроводимости.

Технологические требования к изготовлению КТСП и ВТСП

Комнатно- и высокотемпературные сверхпроводники в виде оболочек с изоляцией необходимо изготавливать по нанотехнологии из соединений с четной суммой четных и нечетных элементов для достижения четного количества электронов. Эти соединения необходимо подвергать лазерной и электромагнитной обработке с термозакалкой для устойчивого образования и стабилизации мультиэлектронных носителей тока [26-30].

Основным требованием к средствам диагностики технологического процесса является контроль размеров кристаллической решетки КТСП и ВТСП с точностью не менее 10^{-7} (семь знаков после запятой).

ВЫВОДЫ

1. С помощью обработки и обобщения экспериментальных данных искусственной нейронной сетью создана мультиэлектронная теория сверхпроводимости.
2. Установлен механизм сверхпроводимости на основе новой частицы-мультиэлектрона. Создана его математическая модель, позволяющая расчетным методом находить основные параметры процесса и сверхпроводника.
3. Практическое значение теории заключается в том, что она позволяет определить необходимые характеристики комнатотемпературных и высокотемпературных сверхпроводников, а также дать технологические рекомендации по их изготовлению с образованием мультиэлектронов.

ЛИТЕРАТУРА

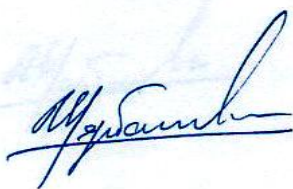
1. A.J. Leggett, *Natur Physics*, 2006, 2, 134.
2. Хорошавин Л.Б., Щербатский В.Б. Исследование взаимосвязи между свойствами химических элементов на основе Периодического закона// Объединенный научный журнал, 2005, № 5, с.71-81.
3. Хорошавин Л.Б., Щербатский В.Б., Якушина Е.В. Исследование свойств сверхпроводников на основе нейросетевых компьютерных программ// Объединенный научный журнал.- 2006. №24. с.62-69. Сайт: [http:// refractories1.narod.ru](http://refractories1.narod.ru).
4. Хорошавин Л.Б., Щербатский В.Б., Якушина Е.В. Совпадение расчетных и экспериментальных данных по свойствам элемента № 112// Объединенный научный журнал.- 2005. №3. с.65. Сайт: [http:// refractories1.narod.ru](http://refractories1.narod.ru).
5. Хорошавин Л.Б., Щербатский В.Б., Якушина Е.В. Мультиэлектрон – основа сверхпроводимости // Объединенный научный журнал.- 2007. №2. с.68-76 . Сайт: [http:// refractories1.narod.ru](http://refractories1.narod.ru).
6. H. Yukawa. On the interaction of elementary particle. *Proc. Phys. Math. Soc. Japan*. 1935. V. 17. P. 48.
7. Яворский Б.М. Справочник по физике для инженеров и студентов вузов/ Б.М.Яворский, А.А. Детлаф, А.К.Лебедев. – 8-е изд.,перераб. и испр.- М.:ООО”Издательство Оникс”:ООО”издательство “Мир и образование”, 2006.-1056 с.: ил.
8. Якубов А. Р. Юкавский потенциал и энергия химических связей //Химия и компьютерное моделирование. Бутлеровские сообщения. 2002. № 6. с.35.
9. Сантilli Р. М. Основы адронной химии. P.O.BOX 1577, Palm Harbor, FL34682,USA, www.magnegas.com.

10. *Карякин Н.И., Быстров К.Н., Киреев П.С.*, Краткий справочник по физике. Изд. Второе, стереотип., М.: "Высшая школа", 1963.- 560с.: ил.
11. *Ландау Л.Д., Лившиц Е.М.* Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Наука, 1974. – 752 с.
12. *Гросс Е.Ф.* Магнито-оптические свойства биэлектрона в кристалле BiJ_3 // Письма в ЖЭТФ, 1971, Т.13, с.503-506.
13. *Кулеева Н.А., Кучинский Э.З.* Сверхпроводимость в псевдощелевом состоянии в модели "горячих точек": уравнения Горькова//ФТТ, 2004, т.46. вып.9. с.1557-1565.
14. *Киттель Ч.* Введение в физику твердого тела, М., 1978,- 792 с.: ил.
15. *Ашкрофт Н., Мермин Н.* Физика твердого тела. М.:изд-во «Мир»,1979, Т.1,2 с.357-362.
16. *Эмсли Дж.* Элементы: Пер. с англ.-М.: Мир,1993.-256 с.
17. *Паринов И.А.* Микроструктура и свойства высокотемпературных сверхпроводников. Ростов н/Д: Изд-во Рост. ун-та, 2004.-Т1,2 -416 с.
18. *Гуревич А.Г.* Физика твердого тела: Учеб. пособие для вузов/ФТИ им.А.Ф. Иоффе РАН.- Спб.: Невский Диалект; БХВ-Петербург,2004.- 320 с.
19. *Alexandrov A.S., Mott N.F.*//Rep. Prog. Phys., 1994. v.57.p.1197.
20. *H. Ogasawara, M. Matsukawa, K. Noto, H Kimura.* Proc. Intern. Cryogenic Material Conf., Hawaii, Oct., 1994, p. 315.
21. *Гинзбург В.Л.* Сверхпроводимость: позавчера, вчера, сегодня, завтра // журнал «Успехи физических наук», 2001, №10, том 171, стр.1059-1068.
22. *Дьячкова Т.В., Кадырова Н.И., Зубков В.Г., Зайнулин Ю.Г., Верховский С.В.* "Синтез бесконечнослоевых фаз $\text{Sr}_{1-x}\text{Ln}_x\text{CuO}_2$ (Ln - Nd, Pr) из двойных оксидов при высоких давлениях и температурах" – Неорган. материалы, т. 34, № 11, с. 1382-1385, (1998).
23. *Дьячкова Т.В., Тютюнник А.П., Зубков В.Г., Митберг Э.Б., Кадырова Н.И., Бобровский В.И., Зайнулин Ю.Г.* "Высокотемпературные рентгеновские исследования и механизм кислородного разупорядочения в фазах высокого давления $\text{Sr}_{1-x}\text{Nd}_x\text{CuO}_2$ (x=0.10; 0.13) " - ЖНХ, т. 45, № 8, с.1269-1275, (2000).
24. *Кадырова Н.И., Дьячкова Т.В., Тютюнник А.П., Зайнулин Ю.Г., Бобровский В.И.* "Синтез $(\text{Sr}_{1-x}\text{Ca}_x)_{1-y}\text{CuO}_2$ (0<x<0.86, 0<y<0.1) при высоких давлениях и температурах" - Неорган. матер., т.38, №1, с. 67-71, (2002).
25. *Санникова М. А., Дьячкова Т.В., Тютюнник А.П., Зубков В.Г., Кадырова Н.И., Зайнулин Ю.Г.* "Синтез и структура $\text{Sr}_{1-x}\text{Li}_x\text{CuO}_2$ -фаз, полученных в условиях высоких давлений и температур" – ЖСХ, т.44, № 2, с.265-268(2003).
26. *Хорошавин Л.Б., Щербатский В.Б., Якушина Е.В.* От систем химических элементов до нанотехнологии материалов и изделий. // Объединенный научный журнал.- 2005. №32. с.67-76. Сайт: [http:// refractories1.narod.ru](http://refractories1.narod.ru).
27. *Хорошавин Л.Б., Щербатский В.Б.* Электронная технология огнеупоров на основе Периодического закона.//Новые огнеупоры.-2005, №10, с75-83, Сайт: [http:// refractories1.narod.ru](http://refractories1.narod.ru).
28. *Гусев А.И.* Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии.

М.:Физматлит.-2005,-416 с.

29 .Суздалев И.П. Нанотехнология: физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов.//-М.:КомКнига,-2006.-529 с.

30. Кобаяси Н. Введение в нанотехнологию . М.: Бином. Лаборатория знаний, 2005. – 134 с.

A handwritten signature in black ink, appearing to be 'Суздалев'.A handwritten signature in black ink, appearing to be 'Кобаяси'.A handwritten signature in black ink, appearing to be 'Суздалев'.A handwritten signature in black ink, appearing to be 'Суздалев'.

Опубликовано: Объединенный научный журнал, 2007, № 17.