

Сверхпроводимость в гомологических рядах купратов: глубокие осцилляции спаривающего кулоновского потенциала

В. И. Белявский, Ю. В. Копаев¹⁾

Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 2 мая 2006 г.

Кинематическое ограничение при сверхпроводящем спаривании с большим импульсом эффективно обрезает экранированный кулоновский потенциал по передаче импульса при рассеянии и приводит к осциллирующему в реальном пространстве спаривающему потенциалу, обеспечивающему связанное состояние пары. Кулоновскому спариванию в купратах соответствует сильное взаимодействие между составляющими пару частицами, как в одной и той же, так и в соседних купратных плоскостях, что объясняет зависимость температуры перехода от числа купратных плоскостей в элементарной ячейке.

PACS: 78.47.+p, 78.66.-w

1. Во всех исследованных семействах купратных соединений температура сверхпроводящего перехода T_c обнаруживает ярко выраженную зависимость от числа n плоскостей CuO_2 в элементарной ячейке. С ростом n функция $T_c(n)$ для данного гомологического ряда соединений вначале возрастает, достигая максимального значения при $n = 3$, после чего монотонно убывает [1], как это схематически показано на рис.1, где представлена зависимость $T_c(n)$ для гомологичес-

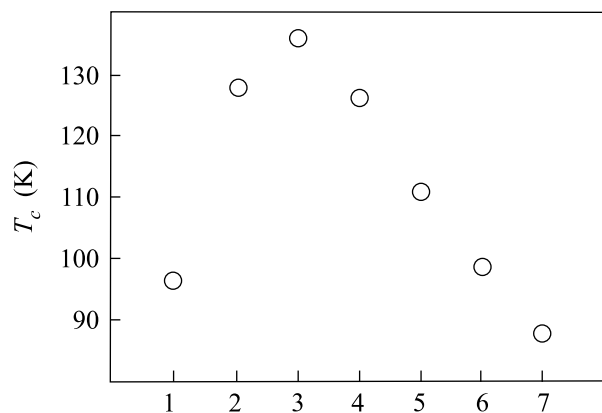


Рис.1. Температура сверхпроводящего перехода оптимально допированных соединений семейства $\text{HgBa}_2\text{Ca}_{n-1}\text{Cu}_n\text{O}_{2n+2+\delta}$ в зависимости от числа купратных слоев n в элементарной ячейке (согласно [2])

кого ряда ртути содержащих купратов [2]. Объяснение универсального характера зависимости $T_c(n)$, в которой, несомненно, находит отражение фундаментальный механизм сверхпроводящего спаривания в

купратах, является одной из принципиально важных проблем физики купратных сверхпроводников [3].

Распределение заряда, вводимого при допировании, в многослойных соединениях оказывается неоднородным: внутренние слои в элементарной ячейке имеют меньшую концентрацию дырок по сравнению с внешними слоями, что соответствует минимуму электростатической энергии [4]. Таким образом, оптимальному (в среднем) уровню допирования многослойного соединения отвечают недодопированные внутренние купратные плоскости (по сравнению с уровнем оптимального допирования для соединения с единственной плоскостью CuO_2 в элементарной ячейке) и передопированные внешние плоскости.

Слабая связь между соседними купратными слоями за счет когерентного туннелирования пар между ними может качественно (но не количественно) объяснить первоначальное возрастание функции $T_c(n)$ с дальнейшим (при $n > 3$) выходом на насыщение [5].

Для объяснения спада $T_c(n)$ при $n > 3$ в [5] учитываются неоднородность распределения носителей в системе купратных плоскостей в пределах элементарной ячейки, а также конкуренция между сверхпроводящим и диэлектрическим (в виде d -волны плотности орбитальных токов [6]) упорядоченными состояниями.

Значительный рост температуры сверхпроводящего перехода с увеличением числа купратных слоев в элементарной ячейке можно связать с тем, что эффективный радиус спаривающего взаимодействия превышает расстояние между соседними слоями. Таким свойством обладает (в отличие от лежащих в основе многих моделей сверхпроводимости предельно локализованных в реальном пространстве спаривающих потенциалов) экранированный кулоновский по-

¹⁾e-mail: kopaev@sci.lebedev.ru

тенциал, приводящий к сверхпроводящему спариванию с большим суммарным импульсом [7].

2. Экранирование кулоновского отталкивания в классическом электронном газе приводит к тому, что энергия взаимодействия двух электронов на расстоянии r принимает вид $U(r) = (e^2/r)\exp(-r/r_0)$, что соответствует преобразованию Фурье $U(k) = 4\pi e^2/(k^2 + k_0^2)$. Здесь $r_0 \equiv k_0^{-1}$ имеет смысл дебаевского радиуса экранирования.

Грубая оценка энергии взаимодействия в приближении Томаса-Ферми приводит к такому же выражению и для вырожденного электронного газа с радиусом экранирования $r_0 = (4\pi e^2 ng)^{1/2}$, где n – концентрация электронов, g – плотность состояний на уровне Ферми. Учет же скачка в распределении электронов в импульсном пространстве качественно изменяет экранированный кулоновский потенциал [8]:

$$U(k) = 4\pi e^2/[k^2 + k_0^2 f(k/2k_F)], \quad (1)$$

где k_F – импульс Ферми, а $f(k)$ – функция Линдхардта,

$$f(x) = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1-x^2}{4x} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right| \right). \quad (2)$$

Слабая сингулярность потенциала (1) при $k = 2k_F$, соответствующая точке касания сдвинутых на $2k_F$ поверхностей Ферми, приводит к затухающим фриделевским осцилляциям (с длиной волны π/k_F) экранированного кулоновского потенциала в реальном пространстве, который при больших r имеет вид

$$U(r) \simeq \frac{e^2}{2\pi} \frac{\cos 2k_F r}{r^3}. \quad (3)$$

В случае поверхности Ферми с нестингом сингулярность экранирования усиливается, следствием чего может стать возникновение волн зарядовой (структурный фазовый переход) или спиновой (антиферромагнитное состояние) плотностей.

Наличие областей реального пространства, в которых экранированный кулоновский потенциал принимает отрицательные значения, достаточно для сверхпроводящего спаривания с отличным от нуля моментом импульса относительного движения при нулевом суммарном импульсе пары [9], однако из-за слабости коновской сингулярности экранирования [8] температура сверхпроводящего перехода оказывается весьма низкой [9].

3. Возникновение области кинематического ограничения (Ξ) при сверхпроводящем спаривании с большим суммарным импульсом \mathbf{K} [7] усиливает сингулярность спаривающего потенциала $U(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$,

поскольку в определяющем параметр энергетической щели $\Delta(\mathbf{k})$ уравнении самосогласования (при $T = 0$) импульсы относительного движения \mathbf{k} и \mathbf{k}' могут принадлежать лишь конечной области Ξ импульсного пространства, что соответствует эффективному обрезанию далеких фурье-компонент потенциала $U(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ на границе этой области. Следует отметить, что в общем случае при $\mathbf{K} \neq 0$ кинетическая энергия пары $\xi(\mathbf{k})$ обращается в нуль лишь в отдельных точках внутри области кинематического ограничения, следствием чего является сглаживание логарифмической сингулярности в правой части уравнения самосогласования и отсутствие решения этого уравнения при $U \rightarrow 0$.

На рис.2 показано, как возникает область кинематического ограничения в случае изотропного двумерного закона дисперсии. При $\mathbf{K} = 0$ состояние пары

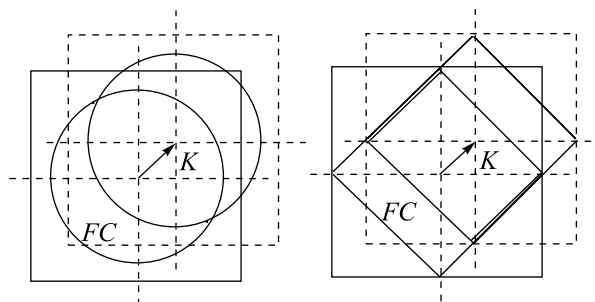


Рис.2. Иллюстрация формирования области кинематического ограничения при сверхпроводящем спаривании с импульсом $\mathbf{K} \neq 0$ в случаях изотропного двумерного закона дисперсии с контуром Ферми (FC) в виде окружности (слева) и двумерного закона дисперсии с нестингом контура Ферми (справа; участки контура Ферми, удовлетворяющие условию зеркального нестинга при импульсе пары \mathbf{K} , выделены)

формируется всеми одночастичными (электронными и дырочными) состояниями внутри зоны Бриллюэна, а кинетическая энергия пары обращается в нуль на всей поверхности Ферми (контуре Ферми в двумерной системе). По мере роста \mathbf{K} область импульсного пространства Ξ , дающая вклад в состояние пары (статистический вес пары), уменьшается, исчезая при $K = 2k_F$. При $0 < K < 2k_F$ кинетическая энергия пары обращается в нуль только в двух точках, которые разделяют области импульсного пространства с электронным и дырочным заполнением. В таком случае логарифмическая сингулярность в уравнении самосогласования отсутствует.

Зеркальный нестинг [7], когда энергии частиц $\varepsilon(\mathbf{K}/2 + \mathbf{k})$ и $\varepsilon(\mathbf{K}/2 - \mathbf{k})$, отсчитанные от уровня Ферми, совпадают на конечном участке контура Ферми

(что возможно при особой форме электронного закона дисперсии $\varepsilon(\mathbf{p})$, как это схематически показано на рис.2 для двумерного закона дисперсии), приводит к тому, что $\xi(\mathbf{k})$ обращается в нуль уже не в отдельных точках, а на линии, следствием чего и является логарифмическая сингулярность, приводящая к тому, что при зеркальном нестинге уравнение самосоглашения допускает асимптотически точное решение при $U \rightarrow 0$. Эффективная константа связи в экспоненте параметра энергетической щели оказывается пропорциональной длине участков контура Ферми, на которых выполняется условие зеркального нестинга

$$\varepsilon(\mathbf{K}/2 + \mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{K}/2 - \mathbf{k}). \quad (4)$$

Контур Ферми в форме квадрата, повернутого на угол $\pi/4$ по отношению к границам зоны Бриллюэна и соответствующего половинному заполнению энергетической зоны (рис.2), обладает очевидным свойством зеркального нестинга для любого импульса пары \mathbf{K} вдоль диагонали зоны при условии, что $K < K_\pi$, где $K_\pi = (\pi, \pi)$. По мере роста K длина участков контура Ферми (на сторонах квадрата, параллельных \mathbf{K}), для которых выполняется условие идеального зеркального нестинга, сокращается до нуля при $\mathbf{K} = \mathbf{K}_\pi$, когда выполняется условие идеального обычного нестинга $\varepsilon(\mathbf{p} + \mathbf{K}_\pi) = -\varepsilon(-\mathbf{p})$ (для пары противоположных сторон квадрата), приводящее к диэлектризации системы при половинном заполнении. В таком случае, соответствующем родительскому купратному соединению, на месте контура Ферми возникает диэлектрическая щель $2\Delta_s$, а сам контур Ферми становится границей магнитной зоны Бриллюэна двумерной структуры с дальним спиновым антиферромагнитным упорядочением.

4. Таким образом, спиновому антиферромагнитному порядку родительского купратного соединения с половинным заполнением зоны, в которой располагается уровень Ферми, соответствует расщепление этой зоны на две подзоны, так что при допировании контур Ферми принимает форму малых дырочных карманов [10] вблизи вершины нижней подзоны. Части карманов, располагающиеся в первой магнитной зоне Бриллюэна родительского соединения (главные зоны), формируют контур Ферми, которому соответствует максимальная спектральная плотность сигнала фотоэмиссии, тогда как другие их части (теневые зоны [11], располагающиеся во второй магнитной зоне) характеризуются существенно меньшей спектральной интенсивностью, уменьшающейся с ростом допирования вместе с шириной диэлектрической заперщенной зоны Δ_s . Каждый карман идеально удов-

летворяет условию зеркального нестинга с суммарным импульсом пары \mathbf{K}_π , при этом импульс одной из частиц пары принадлежит главной зоне, а импульс другой частицы пары – теневой зоне.

Паре карманов, располагающихся на диагонали двумерной кристаллографической зоны Бриллюэна, соответствует идеальный обычный нестинг с тем же импульсом \mathbf{K}_π . И в этом случае импульсы частицы и дырки, составляющих электронно-дырочную пару, принадлежат разным зонам дырочных карманов: один из компонентов пары относится к главной зоне, другой – к теневой. Одновременное выполнение условий зеркального и обычного нестинга может приводить к конкуренции или сосуществованию сверхпроводящего и диэлектрического (отличного от спинового антиферромагнитного) упорядоченных состояний.

Канал сверхпроводящего спаривания с большим импульсом эффективен при зеркальном нестинге контура Ферми, что в случае дырочных карманов имеет место при кристаллически эквивалентных импульсах $\mathbf{K} = (\pm\pi, \pm\pi)$, каждому из которых соответствует своя область кинематического ограничения Ξ .

Чтобы учесть то, что одна из частиц пары принадлежит главной зоне дырочного кармана, а другая – теневой, представим спаривающее взаимодействие в виде

$$U_{\mu\mu'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \tilde{v}_\mu(\mathbf{k})U(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\tilde{u}_{\mu'}(\mathbf{k}'), \quad (5)$$

где индекс $\mu = 1, 2, \dots, n$ нумерует купратные плоскости в элементарной ячейке, $U(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ – фурье-преобразование экранированного кулоновского взаимодействия, а $\tilde{v}_\mu(\mathbf{k})$ и $\tilde{u}_{\mu'}(\mathbf{k}')$ – амплитуды преобразования Боголюбова, диагонализующие гамильтониан, описывающий электрон-дырочное спаривание при возникновении спинового антиферромагнитного порядка [12]. Отметим, что при переходе из теневой зоны в главную и наоборот, $\tilde{v}_\mu(\mathbf{k} + \mathbf{K}) \rightarrow \tilde{u}_\mu(\mathbf{k})$ [12]. Расширение карманов с ростом допирования сопровождается уменьшением диэлектрической щели Δ_s и резким уменьшением (из-за отклонения от половинного заполнения) спектральной интенсивности теневой зоны, пропорциональной $u_\mu^2(\mathbf{k})$, что приводит к эффективному ограничению спаривающего взаимодействия в импульсном пространстве.

5. Это дает основание для замены ядра $U(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ оператора спаривающего взаимодействия приближенным вырожденным ядром

$$U(\kappa) = U_0 r_0^d (1 - \kappa^2 r_0^2 / 2), \quad (6)$$

представляющим первые члены разложения истинного ядра в ряд Тейлора. Здесь $d = 2(3)$ для двумерной

(трехмерной) электронной системы, U_0 и r_0 имеют смысл характерной кулоновской энергии и радиуса экранирования, соответственно. Потенциал (6) проявляется при малых передачах импульса $\kappa \equiv |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|$, то есть кулоновское отталкивание эффективно обрывается при импульсах, меньших некоторого значения k_c , характеризующего размер области кинематического ограничения.

При $d = 3$ преобразование Фурье функции (6) имеет конечное положительное значение при $r = 0$, а при больших r осциллирует,

$$U(\rho) \sim -\frac{U_0 s_0^3}{2\pi^2 \rho^2} \left(1 - \frac{s_0^2}{2}\right) \cos \rho, \quad (7)$$

где $\rho \equiv k_c r$, $s_0 \equiv k_c r_0$, причем амплитуда осцилляций как функция s_0 имеет максимум при $s_0 = \sqrt{6/5}$ и с ростом r убывает более медленно по сравнению с фриделевскими осцилляциями (3).

В двумерной системе ($d = 2$) экранированный кулоновский потенциал, обеспечивающий сверхпроводящее спаривание с импульсом \mathbf{K} , может быть (в рамках изотропной модели) оценен как

$$U(\rho) = \frac{U_0 s_0^2}{2\pi \rho} \left[J_1(\rho) \left(1 - \frac{s_0^2}{2} + \frac{2s_0^2}{\rho^2}\right) - \frac{s_0^2}{\rho} J_0(\rho) \right], \quad (8)$$

где $J_p(x)$ – функция Бесселя. При $\rho = 0$ потенциал (8) имеет конечное значение, а при больших ρ проявляет медленно затухающие с r осцилляции:

$$U(\rho) \sim \frac{U_0 s_0^2}{(\pi \rho)^{3/2}} \left(1 - \frac{s_0^2}{2}\right) \sin \rho. \quad (9)$$

Как функция s_0 максимум амплитуды далеких осцилляций потенциала (8) достигается при $s_0 = 1$.

Потенциал (8) схематически представлен на рис.3 при оптимальном для спаривания значении параметра $s_0 = 1$. Отметим, что трехмерному потенциалу $U(\rho)$ с асимптотическим (при $\rho \gg 1$) поведением (7) соответствуют существенно более мелкие (при тех же значениях параметра s_0) осцилляции по сравнению с двумерным потенциалом (9).

Поскольку импульс обрезания k_c , определяющий спаривающее взаимодействие (6), увеличивается с ростом допирования, зависимость амплитуды ядра от s_0 (первоначальное возрастание до максимального значения с последующим убыванием) может рассматриваться как один из факторов, определяющих характерную зависимость температуры сверхпроводящего перехода от уровня допирования $T_c(x)$, наблюдаемую в купратах.

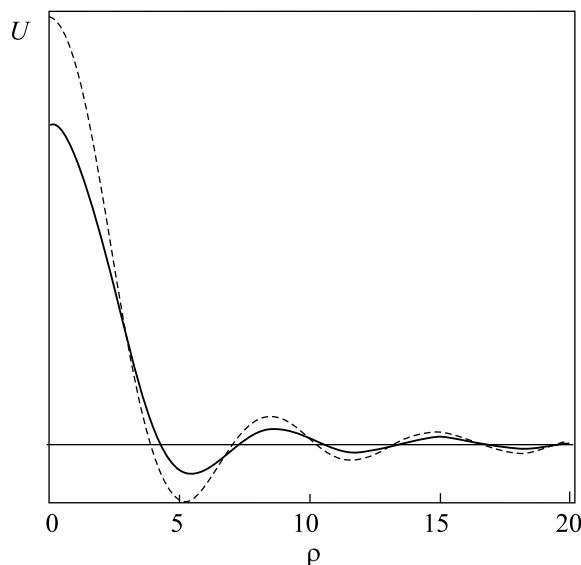


Рис.3. Координатная зависимость двумерного спаривающего потенциала (8) при $s_0 = 1$. Штриховой линией показан ступенчатый (в импульсном пространстве) потенциал (11) также при $s_0 = 1$. Масштаб по оси U произвольный

Расширение дырочных карманов (увеличение длины контура Ферми) с ростом уровня допирования, с одной стороны, увеличивая концентрацию носителей тока, способствует возрастанию T_c , а с другой, – приводит к уменьшению спектральной интенсивности теневой зоны контура Ферми, что влечет за собой понижение T_c . Эти две противоположные тенденции представляют другой фактор из определяющих универсальный характер зависимости $T_c(x)$.

6. Исключение всех фурье-компонент экранированного кулоновского потенциала, не принадлежащих Ξ , приводит к тому, что в реальном пространстве спаривающий потенциал обнаруживает затухающие с ростом r глубокие осцилляции с периодом π/k_c : так кулоновское взаимодействие проявляется в канале сверхпроводящего спаривания с большим импульсом. В связи с этим можно отметить изменение кулоновского отталкивания в электрон-фононной модели сверхпроводимости из-за *динамического* ограничения области эффективного притяжения в окрестности поверхности Ферми [13]:

$$U_0 \rightarrow U_0 / [1 + gU_0 \ln(E_F/\varepsilon_D)], \quad (10)$$

где E_F – энергия Ферми, ε_D – характерная дебаевская энергия.

Следует отметить, что замена $U(k)$ положительной константой U_0 в пределах области кинематического ограничения приводит лишь к тривиальному

($\Delta = 0$) решению уравнения самосогласования, несмотря на то, что соответствующий потенциал

$$U(\rho) = \frac{U_0 s_0^2}{2\pi\rho} J_1(\rho) \quad (11)$$

в реальном пространстве является осциллирующим. Поэтому осциллирующее поведение (рис.3) потенциала $U(\rho)$ есть необходимое, но еще недостаточное условие существования нетривиального решения (таким условием является наличие хотя бы одного отрицательного собственного значения ядра $U(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ оператора спаривающего взаимодействия [7]; ядро $U = U_0$ внутри Ξ и $U = 0$ вне Ξ , очевидно, имеет единственное положительное собственное значение). Вырожденное ядро (6), аппроксимирующее экранированное кулоновское отталкивание при малых передачах импульса, существенных при достаточно большом импульсе пары, приводит к четырем собственным функциям (двум четным по отношению к преобразованию $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$ и двум нечетным) уже при сколь угодно малом r_0 , при этом одной из четных функций соответствует отрицательное собственное значение.

Возникновение отрицательного собственного значения при переходе от ступенчатого ядра к ядру (6) допускает аналогию с известной задачей квантовой механики об одномерной потенциальной яме с барьерами неодинаковой высоты [14]: изменение параметров ядра, снижающее степень асимметрии потенциала (11), приводит к возникновению дискретного уровня, отщепляющегося от сплошного спектра.

7. Из-за малости интегралов перескока между купратными слоями (пронумерованным индексом $\mu = 1, 2, \dots, n$), поверхность Ферми является открытой вдоль оси k_z , и сечения этой поверхности плоскостями k_x, k_y , соответствующими разным слоям, представляют набор контуров Ферми, определенных в сечениях зоны Бриллюэна с разными μ . Размер зоны Бриллюэна вдоль оси k_z есть $2\pi/c$, где c – размер элементарной ячейки в поперечном к слоям направлении, поэтому характерное расстояние между соседними сечениями зоны Бриллюэна можно оценить как $k_n = 2\pi/nc$.

Характерный размер области кинематического ограничения $k_c \ll \pi/a$, где a – размер элементарной ячейки купратной плоскости, определяет период π/k_c осцилляций спаривающего потенциала в этой плоскости. Естественно предположить, что величина k_0 , характеризующая радиус действия кулоновского потенциала в поперечном к слоям направлении, превышает k_c .

Это допускает возможность сверхпроводящего спаривания с импульсом \mathbf{K} не только при импульсах

частиц $\mathbf{k}_\pm, \mathbf{k}'_\pm$ (до и после рассеяния, обусловленного спаривающим взаимодействием), соответствующих одной и той же купратной плоскости (рис.4а), но и в случае, когда эти импульсы соответствуют разным

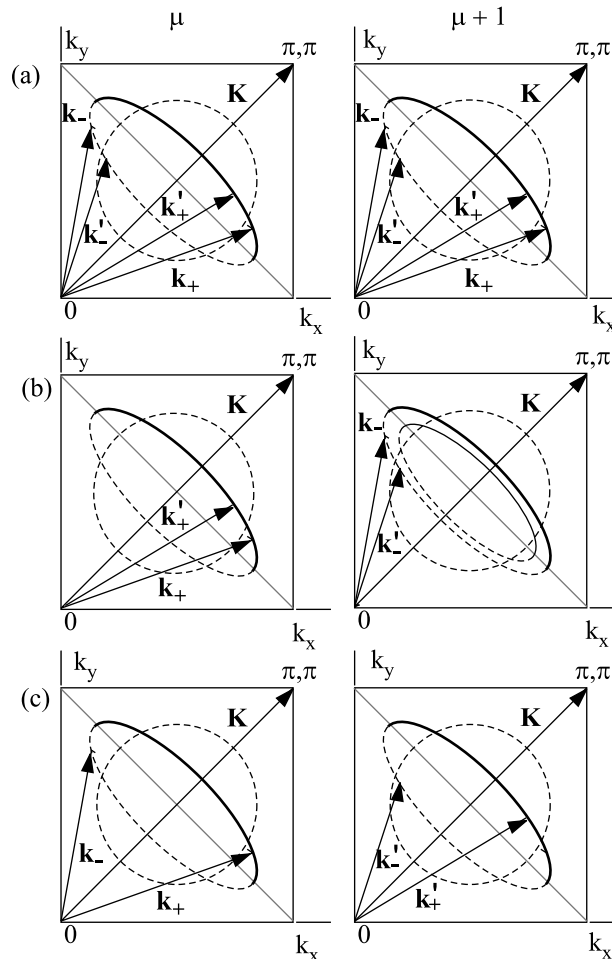


Рис.4. Схема сверхпроводящего спаривания с большим импульсом $\mathbf{K}_\pi = (\pi, \pi)$: (а) импульсы частиц пары до рассеяния, \mathbf{k}_+ и \mathbf{k}_- , и после рассеяния, \mathbf{k}'_+ и \mathbf{k}'_- , принадлежат одной и той же купратной плоскости; (б) одна из частиц пары с импульсами до и после рассеяния, \mathbf{k}_+ и \mathbf{k}'_+ , находится в слое μ , другая частица с импульсами \mathbf{k}_- и \mathbf{k}'_- – в соседнем слое $\mu + 1$; (с) обе частицы пары с импульсами \mathbf{k}_+ и \mathbf{k}_- до рассеяния находятся в слое μ , переходя после рассеяния (с импульсами \mathbf{k}'_+ и \mathbf{k}'_-) в слой $\mu + 1$. Штриховой линией показана окружность нулей параметра порядка. На рис.(б) справа показано изменение положения контура Ферми (тонкая сплошная линия – главная зона, пунктирная – теньевая зона) из-за отклонения допирования слоя $\mu + 1$ от оптимального

(ближайшим соседним) плоскостям (рис.4б). Еще одна возможность увеличения T_c , рассмотренная в [5], связана с туннелированием пар между соседни-

ми купратными плоскостями: импульсы \mathbf{k}_{\pm} частиц до рассеяния принадлежат одной плоскости, а после рассеяния (\mathbf{k}'_{\pm}) – другой (рис.4с).

Рассматриваемое нами повышение эффективности канала спаривания с импульсом \mathbf{K} приводит к естественному механизму наблюдаемой в гомологических семействах купратных соединений универсальной зависимости температуры сверхпроводящего перехода T_c от числа n купратных плоскостей в элементарной ячейке.

8. Обозначим зависящий от импульса относительного движения пары параметр энергетической щели, определенный в μ -сечении зоны Бриллюэна как $\Delta_{\mu}(\mathbf{k})$. Уравнение самосогласования в случае соединения с n купратными слоями может быть записано в виде системы квазилинейных интегральных уравнений

$$\Delta_{\mu}(\mathbf{k}) = -\frac{1}{2} \sum_{\mu'=1}^n \sum_{\mathbf{k}'} A_{\mu\mu'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; T) \Delta_{\mu'}(\mathbf{k}'), \quad (12)$$

где суммирование в правой части производится по всем сечениям зоны Бриллюэна с учетом кинематического ограничения $\mathbf{k} \in \Xi_{\mu}$ в каждом из них. Ядро этой системы уравнений, зависящее от $\Delta_{\mu'}(\mathbf{k}')$ и температуры T , имеет вид

$$A_{\mu\mu'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; T) = \frac{U_{\mu\mu'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')}{E_{\mu\mu'}(\mathbf{k}')} \tanh \frac{E_{\mu\mu'}(\mathbf{k}')}{2T}. \quad (13)$$

Контуры Ферми в областях кинематического ограничения Ξ_{μ} в разных сечениях зоны Бриллюэна, вообще говоря, не одинаковы из-за разного уровня допирования купратных слоев в элементарной ячейке. По этой причине не одинаковы и величины

$$E_{\mu\mu'}(\mathbf{k}) = \sqrt{\xi_{\mu\mu'}^2(\mathbf{k}) + \Delta_{\mu'}^2(\mathbf{k})}, \quad (14)$$

где $2\xi_{\mu\mu'}(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{K}/2 + \mathbf{k}) + \varepsilon(\mathbf{K}/2 - \mathbf{k})$ – кинетическая энергия пары частиц, которые находятся в купратных плоскостях с индексами μ и μ' , соответственно.

В каждом из сечений зоны Бриллюэна нетривиальное решение системы уравнений самосогласования (12) при спаривающем отталкивании является знакопеременной функцией квазинепрерывного аргумента \mathbf{k} в пределах области кинематического ограничения: параметр энергетической щели меняет знак на линии (окружности) нулей, пересекающей контур Ферми (рис.4). Для оценок систему уравнений (12) удобно упростить, приближенно представив $\Delta_{\mu}(\mathbf{k})$ как кусочно-постоянные функции в областях знакопостоянства функций $\Delta_{\mu}(\mathbf{k})$. Таким образом, $\Delta_{\mu}(\mathbf{k})$ представляется двумя своими средними значениями

[15]: $\Delta_{\mu}(\mathbf{k}) = \Delta_{\mu}(1)$, если \mathbf{k} принадлежит части области кинематического ограничения внутри окружности нулей, и $\Delta_{\mu}(\mathbf{k}) = \Delta_{\mu}(2)$, если \mathbf{k} находится вне этой окружности.

В этом приближении ядро спаривающего взаимодействия $U(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ можно заменить вырожденным кусочно-постоянным ядром, характеризуемым тремя константами [15] $U(11)$, $U(22)$ и $U(12)$, первые две из которых описывают рассеяние внутри и вне линии нулей, соответственно, а третья описывает рассеяние между областями импульсного пространства, разделенными линией нулей. Такое ядро удовлетворяет неравенству Сула [16] $[U(12)]^2 > U(11)U(22)$, что обеспечивает сверхпроводящее спаривание при отталкивательном взаимодействии.

Соответственно, спаривающее взаимодействие (5) переходит в набор констант $U_{\mu\mu'}(\alpha\alpha')$, где $\alpha, \alpha' = 1, 2$. Принятое приближение позволяет преобразовать систему интегральных уравнений (12) в систему трансцендентных уравнений:

$$\Delta_{\mu}(\alpha) = -\frac{1}{2} \sum_{\mu'=1}^n \sum_{\alpha'=1}^2 U_{\mu\mu'}(\alpha, \alpha') f_{\mu\mu'}(\alpha'; T) \Delta_{\mu'}(\alpha'), \quad (15)$$

где

$$f_{\mu\mu'}(\alpha'; T) = \sum_{\mathbf{k} \in \Xi_{\mu}^{\alpha'}} \frac{\tanh [E_{\mu\mu'}(\alpha; \mathbf{k})/2T]}{E_{\mu\mu'}(\alpha; \mathbf{k})}, \quad (16)$$

Ξ_{μ}^{α} – часть области кинематического ограничения внутри ($\alpha = 1$) или вне ($\alpha = 2$) линии нулей,

$$E_{\mu\mu'}(\alpha; \mathbf{k}) = \sqrt{\xi_{\mu\mu'}^2(\mathbf{k}) + \Delta_{\mu'}^2(\alpha)}. \quad (17)$$

Температура сверхпроводящего перехода (в приближении среднего поля) определяется условием $T \rightarrow T_c - 0$ при $\Delta_{\mu}(\alpha) \rightarrow 0$.

9. Качественное исследование системы уравнений (15) можно выполнить, используя простейшее, согласующееся с неравенством Сула, приближение [15] для констант $U_{\mu\mu'}(\alpha, \alpha')$:

$$U_{\mu\mu'}(\alpha, \alpha) = 0, \quad U_{\mu\mu}(12) = 2w_0, \quad U_{\mu\mu\pm 1}(12) = 2w_1. \quad (18)$$

Таким образом, спаривание в купратной плоскости (рис.4а) характеризуется константой связи w_0 , спариванию в ближайших соседних плоскостях (рис.4б,с) соответствует константа связи w_1 . Отметим, что туннельному механизму межслоевого спаривания (рис.4с; такое приближение принято

и в [5]) соответствует $w_1 \ll w_0$, тогда как в случае, когда импульсы частиц до и после рассеяния принадлежат соседним сечениям зоны Бриллюэна (рис.4б), естественно считать, что обе константы связи имеют один и тот же порядок величины.

При $T \rightarrow T_c - 0$ величины (16) можно представить в виде

$$f_{\mu\mu'}(\alpha; T_c) = g \int_0^{\varepsilon_0} \tanh\left(\frac{\xi}{2T_c}\right) \frac{d\xi}{\xi} = g \ln\left(\frac{2\gamma\varepsilon_0}{\pi T_c}\right), \quad (19)$$

где g – плотность состояний (в расчете на один спин), ε_0 – характерный энергетический масштаб области кинематического ограничения Ξ_μ^α , $\ln \gamma = 0.577$ – постоянная Эйлера. Логарифмическая зависимость величин (16) от ε_0 позволяет не делать различия между энергетическими масштабами областей Ξ_μ^α .

Для соединения с одной купратной плоскостью в элементарной ячейке система уравнений (15) приводит к типичному для теории среднего поля соотношению между температурой перехода и константой связи:

$$T_c(1) = (2\gamma\varepsilon_0/\pi) \cdot \exp(-1/gw_0). \quad (20)$$

Две компоненты параметра энергетической щели в принятом приближении равны по абсолютной величине и противоположны по знаку: $\Delta_1(1) = -\Delta_1(2)$.

Система уравнений (15), описывающая соединение с двумя купратными плоскостями в элементарной ячейке, имеет два решения для величины $f \equiv g \ln(2\gamma\varepsilon_0/\pi T_c)$: $f_\pm = (w_0 \pm w_1)^{-1}$. Решению с верхним знаком соответствует более высокая по сравнению с $T_c(1)$ температура перехода,

$$T_c(2) = (2\gamma\varepsilon_0/\pi) \cdot \exp[-1/g(w_0 + w_1)], \quad (21)$$

определяемая эффективной константой связи $w_2^* = w_0 + w_1$, и одинаковое распределение знака параметров энергетической щели в обеих плоскостях.

Из (21) следует, что туннельная связь между купратными плоскостями (рис.4с), когда $w_1 \ll w_0$, не может обеспечить заметное повышение температуры перехода. Поэтому можно ограничиться рассмотрением механизмов спаривания, показанных на рис.4а,б, и для качественного исследования зависимости $T_c(n)$ положить $w_1 = w_0$, что при $n = 2$ приводит к удвоению константы связи $w_2^* = 2w_0$.

Такое приближение могло бы привести к утроению константы связи в трехслойном соединении, если бы не ограничение, связанное с учетом взаимодействия только в ближайших соседних слоях и приводящее к замедлению роста эффективной константы

связи w_n^* с увеличением n : внутренний слой имеет двух ближайших соседей, тогда как внешние слои – только по одному. При $n = 3$ эта константа принимает значение $w_3^* = 2.247w_0$. С ростом n эффективная константа связи выходит на насыщение. Так, при $n = 4$ ее значение составляет $w_4^* = 2.252w_0$.

Выбор ядра спаривающего взаимодействия при дополнительном условии $U_{\mu\mu'}(\alpha\alpha) = 0$, отражающем симметрию между заполненной и вакантной частями области кинематического ограничения, не влияет на качественную оценку зависимости $T_c(n)$. Следует заметить, что важным следствием асимметрии области кинематического ограничения, имеющей место в купратах, является линейный по модулю параметра порядка сдвиг химического потенциала при переходе в сверхпроводящее состояние [17]. Такой сдвиг может иметь отношение к проблеме высокоэнергетических состояний [3], проявляющихся в экспериментах по оптической проводимости как “нарушение” оптического правила сумм [18].

10. Неоднородность допирования купратных слоев в пределах элементарной ячейки, существенная при $n \geq 3$, приводит к тому, что в механизме межслоевого взаимодействия (рис.4б) нарушается условие зеркального нестинга, поскольку из-за неодинакового дырочного заполнения в соседних купратных слоях контуры Ферми в них оказываются различными (рис.4б).

В этом смысле разность концентраций носителей тока в соседних слоях играет роль, подобную той, которую играет обменное поле в слабо ферромагнитных сверхпроводниках, приводящее к состоянию Фулде-Феррела-Ларкина-Овчинникова [19, 20] с отличным от нуля (малым) импульсом конденсата. По этой причине в соединениях с $n \geq 3$ может возникать малое отличие импульса сверхпроводящего конденсата от K_π .

Отклонение от зеркального нестинга, сглаживающее логарифмическую сингулярность в уравнении самосогласования, приводит к эффективному понижению критической температуры по сравнению с ее значениями при уровнях допирования (уже отличающихся от оптимального для однослойного представителя данного гомологического ряда) в соседних слоях. Эти факторы (отклонения от идеального зеркального нестинга и от оптимального для монослоя допирования), существенные при $n \geq 3$ и усиливающиеся с ростом n из-за возрастания роли понижающих энергию конденсации электростатических эффектов, могут рассматриваться как основные причины перехода зависимости $T_c(n)$ к спаду после достижения максимума при $n = 3$ или $n = 4$ (рис.1).

11. Приближение слабой связи, лежащее в основе системы уравнений (15), разумеется, недостаточно для количественных оценок, поскольку кулоновская константа связи w_0 в реальных купратных соединениях, скорее всего, малой не является. Такие оценки могли бы быть сделаны после перенормировки константы связи, подобной той, что в электрон-фононном механизме спаривания соответствует, например, схеме Макмиллана: $w_0 \rightarrow w_0/(1 + w_0)$ [21].

В связи с этим необходимо отметить, что само по себе увеличение константы связи не может привести к заметному повышению критической температуры сверхпроводящего перехода, величина которой существенно зависит от предэкспоненциального множителя ε_0 (в электрон-фононном механизме ε_0 совпадает с характерной дебаевской энергией, составляющей несколько сотен К). При кулоновском спаривании с большим импульсом ε_0 определяется энергетическим масштабом области кинематического ограничения и при ширине зоны проводимости в купратах порядка нескольких электронвольт может составлять, несмотря на относительную малость этой области, несколько сотен миллиэлектронвольт, то есть превышать 1000 К. Таким образом, в рамках этого механизма спаривания при разумных значениях константы связи $w_0 g \leq 1$ для соединений с зеркальным нестингом контура Ферми отсутствуют видимые причины, которые бы не позволяли достигать критических температур $T_c \approx 300$ К.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты # 05-02-17077а, # 06-02-17186а).

1. В. А. Scott et al., *Physica C* **230**, 239 (1994).

2. I. G. Kuzemskaya, A. L. Kuzemsky, and A. A. Cheglov, *J. Low-Temp. Phys.* **118**, 147 (2000).
3. A. J. Leggett, *Nature Physics* **2**, 134 (2006).
4. A. Trokner et al., *Phys. Rev. B* **44**, 2466 (1991).
5. S. Chakravarty, H.-Y. Kee, and K. Völker, *Nature* **428**, 53 (2004).
6. S. Chakravarty, R. B. Laughlin, D. K. Morr, and C. Nayak, *Phys. Rev. B* **63**, 094503 (2001).
7. В. И. Белявский, Ю. В. Кобаев, *УФН* **176**, 449 (2006).
8. Дж. Займан, *Принципы теории твердого тела*, М.: Мир, 1974.
9. W. Kohn and J. M. Luttinger, *Phys. Rev. Lett.* **15**, 524 (1965).
10. P. A. Lee, N. Nagaosa, and X.-G. Wen, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 17 (2006).
11. A. Kampf and J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **42**, 7967 (1990).
12. S. Chakravarty, C. Nayak, and S. Tewari, *Phys. Rev. B* **68**, 100504 (2003).
13. Н. Н. Боголюбов, В. В. Толмачев, Д. В. Ширков, *Новый метод в теории сверхпроводимости*, М.: АН СССР, 1958.
14. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, М.: Физматлит, 2001, с. 93.
15. V. I. Belyavsky, Yu. V. Kopaev, and Yu. N. Togushova, *Phys. Lett. A* **338**, 69 (2005).
16. H. Suhl, B. T. Matthias, and L. R. Walker, *Phys. Rev. Lett.* **3**, 552 (1959).
17. V. I. Belyavsky and Yu. V. Kopaev, *Phys. Rev.* **67**, 024513 (2003).
18. D. N. Basov and T. Timusk, *Rev. Mod. Phys.* **77**, 721 (2005).
19. P. Fulde and R. A. Ferrel, *Phys. Rev.* **135**, A550 (1964).
20. А. И. Ларкин, Ю. Н. Овчинников, *ЖЭТФ* **47**, 1136 (1964).
21. W. L. McMillan, *Phys. Rev.* **167**, 331 (1968).