

## ЛОКАЛЬНО НЕУСТОЙЧИВЫЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ КОНФИГУРАЦИИ И ЭЛЕКТРОННЫЙ МЕХАНИЗМ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ

А.А.Горбацевич, Ю.В.Конаев

Предложен механизм сверхпроводимости, основанный на немонотонной зависимости отталкивательного кулоновского потенциала взаимодействия от энергии, приводящей к эффективному притяжению. Необходимые условия для реализации механизма в ВТСП обеспечиваются близостью к точке электронной неустойчивости, существование которой характеризуется наличием локально неустойчивых промежуточных зарядовых состояний ионов.

1. Многочисленные экспериментальные данные (температурная немонотонность, изменения решеточных параметров, упругих и колебательных характеристик) указывают на присущую ВТСП тенденцию к структурной неустойчивости вблизи и выше  $T_c$ . Естественно предположить, что сверхпроводимость в этих соединениях и структурная неустойчивость взаимосвязаны. Однако попытки описать такую взаимосвязь в рамках представлений о мягкой фононной моде, приводящей к перенормировке взаимодействия, по-видимому, не в состоянии не только связать воедино большую совокупность экспериментальных данных, но даже объяснить высокие значения  $T_c \approx 100$  К. В настоящей работе представлена точка зрения, согласно которой как структурная неустойчивость, так и высокие значения  $T_c$  есть следствие близости системы к точке электронной неустойчивости типа переноса заряда или суперионного перехода. Электронная неустойчивость связана с взаимодействием двух близко расположенных зон. Близость к неустойчивости характеризуется наличием максимума на конечной энергии в амплитуде межэлектронного взаимодействия в нуль-звуковом канале. Как показано ниже, существование такого максимума может привести к реализации чисто кулоновского механизма сверхпроводимости. Выше точки электронной неустойчивости имеется температурный интервал, в котором формируются локально неустойчивые конфигурации в виде областей ближнего порядка — атомов с "неправильной" валентностью. Проявление подобных неустойчивых конфигураций — аномально высокая подвижность ионов кислорода ("кислородная вспышка" <sup>1</sup>) и меди <sup>2</sup>.

2. Основные черты предложенного выше сценария можно описать в рамках стандартной полупроводниковой модели с межзонным кулоновским взаимодействием (модель экситонного диэлектрика <sup>3</sup>) (рис. 1). Применительно к медно-кислородным слоям неустойчивость экситонного типа была недавно рассмотрена в работе <sup>4</sup>. Спектр подобного (рис. 1) вида получается в приближении ближайших соседей <sup>3, 5</sup> для плоскости Cu—O и описывается в узельном представлении гамильтонианом

$$\hat{H}_0 = \sum_{ij} (\epsilon_0 P_{i\alpha}^+ P_{i\alpha} + \epsilon_d d_j^+ d_j + t_{ij}^\alpha P_{i\alpha}^+ d_j + \text{з.с.}), \quad (1)$$

где  $P^+(d^+)$  — оператор рождения электрона на O(Cu),  $\alpha = x, y$  — индекс  $p$ -орбитали кислорода. При  $\epsilon_0 < \epsilon_d$  верхняя зона в основном  $d$ -типа, а нижняя —  $p$ -типа,  $E_g = \epsilon_d - \epsilon_0$  (на рис. 1 опущена бездисперсная ветвь спектра (1)). Если ограничиться взаимодействием на одном и соседних центрах:

$$\hat{H}_{int} = \sum_{ij} u n_{jd\sigma} n_{jd-\sigma} + v_{pd} n_{ip} n_{jd} \quad (2)$$

то основные процессы рассеяния в зонной схеме:

$$v_0 c_{a\sigma}^+ c_{a\sigma}^+ c_{a\sigma} c_{a\sigma}; \quad v_1 c_{1\sigma}^+ c_{2\sigma}^+ c_{2\sigma} c_{1\sigma}; \quad \tilde{v}_2 c_{1\sigma}^+ c_{2\sigma}^+ c_{1\sigma} c_{2\sigma}; \\ v_2 c_{1\sigma}^+ c_{1\sigma}^+ c_{2\sigma} c_{2\sigma} \quad (3)$$

(здесь  $c_a$  -- электронный оператор в зоне  $a = 1, 2$  (рис. 1)) характеризуются следующими амплитудами

$$v_0 = v_1 \approx u + v_{pd}; \quad v_2 = \check{v}_2 \approx u - v_{pd}. \quad (4)$$

Модель рис. 1 отличается от стандартной <sup>3</sup> наличием легирования (заполненные состояния заштрихованы). Формально половинное заполнение зоны проводимости отвечает составам  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  и  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$ , которые, как известно, -- антиферромагнитные диэлектрики. С ростом легирования антиферромагнитный порядок подавляется, открывается поверхность Ферми и мы приходим к ситуации, изображенной на рис. 1. При этом существенным ста-

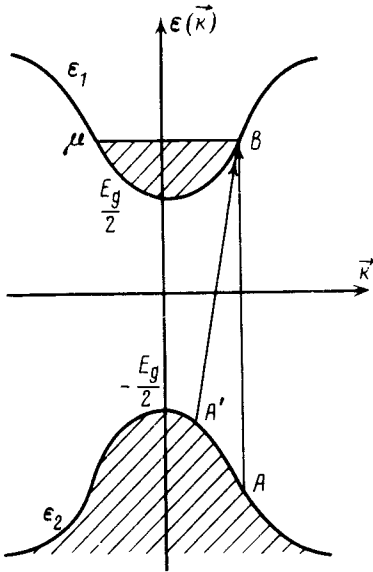


Рис. 1

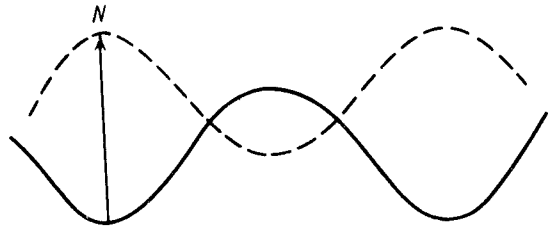


Рис. 2

новится межзонное взаимодействие (возможность наличия ближнего антиферромагнитного порядка и псевдощели в спектре <sup>6</sup> качественно не меняет рассматриваемой картины). Если в модели <sup>3</sup> порог неустойчивости отвечает выполнению условия  $E_{ex} = E_g$ , где  $E_{ex}$  -- энергия связи экситона, то в модели рис. 1 этот порог сдвигается в сторону больших значений энергии взаимодействия (аналог сдвига Бурштейна):

$$E_{ex} = E_g + 2\mu_c. \quad (5)$$

При этом возможно развитие неустойчивости в неоднородную фазу, поскольку для перехода  $AB$  (рис. 1) с нулевым суммарным импульсом электрона и дырки ( $q = 0$ ) энергия возбуждения выше, чем для перехода  $A'B$  с  $q \neq 0$ . Оптимум по  $q$  ( $q = q_{\text{опт}}$ ) определяется с учетом эффективного объема фазового пространства, который уменьшается при переходе от состояния  $A$  к потолку валентной зоны. В отличие от <sup>3</sup> необходимо также учитывать экранировку эффективного потенциала взаимодействия из-за наличия свободных носителей заряда.

В условиях неустойчивости необходимо перейти от рассмотрения чистых состояний в зонах 1 и 2 и их суперпозиции:

$$\psi = U\varphi_1 + V\varphi_2. \quad (6)$$

В приближении среднего поля перестроенная ниже критической температуры фаза характеризуется параметром порядка  $\Delta \sim \langle UV \rangle$ . В модели (1) появление  $\Delta \neq 0$  означает перенос заряда либо с центра на центр (например,  $\text{O}^{2-}\text{Cu}^{2+} \rightarrow \text{O}^-\text{Cu}^+$ ):

$$\hat{H}_{int} \rightarrow \hat{H}_{\Delta s} = \sum_{ij} \Delta (n_{pi} - n_{dj}), \quad (7)$$

либо со связи на связь (заряд центрирован между атомами) :

$$H_{int}^{\wedge} \rightarrow H_{\Delta B}^{\wedge} = \sum_{ij} \Delta p_i^+ d_j^+ , \quad (8)$$

здесь учтен  $p$ -характер орбиталей кислорода. В пределе сильного взаимодействия  $u \gg t$  приближение среднего поля для затравочных электронных операторов (2), (4) неприменимо. Более адекватен подход, основанный на введении вспомогательных бозонов (см. например, <sup>7</sup>), учитывающий сильное отталкивание носителей заряда на центре. Однако можно показать, что и в этом подходе сохраняется физическая картина (6) – (8) межзонной неустойчивости. Роль амплитуды переноса заряда при этом играет плотность конденсата бозонного поля  $\langle b^+ \rangle$  <sup>7</sup>. Реальной ситуации в ВТСП, как уже неоднократно отмечалось, по-видимому, отвечает промежуточная величина взаимодействия  $u \sim t$ .

Если взаимодействие сильное, то точку неустойчивости предвдваряет широкий температурный интервал развитых флуктуаций. Как надежно установлено <sup>8</sup>, в этом интервале межэлектронные корреляции формируют ближний порядок ( $\langle UV \rangle = 0$ ,  $\langle (UV)^2 \rangle \neq 0$ ), который в рамках рассматриваемой модели (1) означает существование локальных долгоживущих флуктуаций заряда (локальное изменение валентности). Характерный размер области ближнего порядка для сильного взаимодействия определяется межатомным расстоянием <sup>8</sup>. Изменение зарядового состояния иона означает радикальное изменение характера его взаимодействия с окружением. Например, при перемене валентности на двойку радиусы ионов O и Si меняются в два и полтора раза соответственно <sup>9</sup>. Такая перестройка локального состояния может приводить к потере локальной стабильности. В конфигурационном пространстве это соответствует различным видам потенциального рельефа для состояний с различной валентностью (рис. 2). При  $\langle (UV)^2 \rangle \neq 0$  ион долю времени проводит в неустойчивом состоянии (точка N на рис. 2), что и обеспечивает аномально высокую подвижность. Хорошо известно, что подобные явления происходят в неравновесных условиях (радиационно-ускоренная диффузия), когда локальное зарядовое состояние меняется под действием лазерного облучения <sup>10</sup>.

3. Модель сверхпроводимости. В основу предлагаемого механизма сверхпроводимости положено представление о двухкомпонентном сверхпроводящем параметре порядка, зависящем от энергии. Одна компонента ( $\Delta_1$ ) описывает сверхпроводящий конденсат, образованный носителями заряда в состояниях в окрестности уровня Ферми. Вторая компонента ( $\Delta_2$ ) относится к состояниям в зоне 2, участвующим в межзонном взаимодействии, ответственном за рассмотренную выше электронную неустойчивость. Если характерный размер  $L$  области ближнего порядка, определяющего структурную нестабильность, меньше корреляционной длины сверхпроводящего параметра порядка  $\xi_0$  (доля времени, которую проводит ион в неправильном зарядовом состоянии, мала:  $\langle (UV)^2 \rangle \rightarrow 0$ ), то в уравнении самосогласования для сверхпроводящего параметра порядка перенормировку взаимодействия в меру факторов когерентности <sup>11</sup> можно не учитывать. Ограничиваясь указанными двумя группами состояний, пренебрегая частотной дисперсией взаимодействия (она будет описана в отдельной работе), получим, что  $T_c$  определяется решением следующей системы уравнений:

$$\Delta_1(\mathbf{k}) = - \Gamma_0 \Delta_1(\mathbf{k}') - \Gamma_2 \Delta_2(\mathbf{k}') ; \quad \Delta_2(\mathbf{k}) = - \Gamma_0 \Delta_2(\mathbf{k}') - \Gamma_2 \Delta_1(\mathbf{k}') , \quad (9)$$

здесь  $\Gamma_a \Delta_b(\mathbf{k}') = \sum_{\mathbf{k}'} \Gamma_a(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \frac{\Delta_b(\mathbf{k}')}{\mu - E_b(\mathbf{k}')} \text{th} \frac{\mu - E_b(\mathbf{k}')}{2T_c}$  ;  $\Gamma_a(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$  – полная амплитуда кулоновского рассеяния, соответствующая затравочному потенциалу  $v_a$  (3). Нетрудно показать, что, если компоненты  $\Delta_1$  и  $\Delta_2$  разного знака, система уравнений (9) может иметь нетривиальное решение для  $T_c$ , несмотря на то, что каждое из взаимодействий  $\Gamma_a(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$  отвечает отталкиванию. Рассмотрим следующую модельную задачу. Заменим в интег-

ральных операторах (9) все величины их усредненными по энергии и углам значениями:

$$\Delta_a(\mathbf{k}) \rightarrow \Delta_a = \text{const}, \quad \hat{\Gamma}_a \Delta_1(\mathbf{k}') \rightarrow \Gamma_a \ln \frac{\tilde{\omega}}{T_c} \Delta_1, \quad \tilde{\omega} \sim \mu, \quad (10)$$

$$\hat{\Gamma}_a \Delta_2(\mathbf{k}') \rightarrow \frac{\Gamma_a}{E}, \quad \frac{1}{\tilde{E}} \approx \int \frac{d\mathbf{k}'}{|E_2(\mathbf{k}')| + E_{g/2} + \mu}.$$

Точке электронной неустойчивости (5) отвечают значения параметра  $v_1/\tilde{E} \approx 1$ .

Из (9) и (10) получим, что решение для  $T_c$  ( $T_c = \tilde{\omega} e^{-1/g_{eff}}$ ) существует только для положительных значений эффективной константы взаимодействия  $g_{eff}$ :

$$g_{eff} = \frac{\Gamma_2^2 - \tilde{\Gamma}_0^2}{\tilde{E} + \Gamma_0} > 0, \quad \tilde{\Gamma}_0^2 = \Gamma_0(\Gamma_0 + \tilde{E}), \quad (11)$$

как следует из (11), сверхпроводимость на отталкивательном затравочном взаимодействии в нашей модели реализуется при  $\Gamma_2 > \tilde{\Gamma}_0$ . В точке электронной неустойчивости вершина  $\Gamma_2$  имеет особенность на передаваемом импульсе  $\mathbf{q} = \mathbf{q}_{\text{опт}}$ . В уравнениях (9) производится интегрирование по передаваемому импульсу ( $\mathbf{q} = \mathbf{k} + \mathbf{k}'$ ), что устраняет особенность. Однако в окрестности точки неустойчивости амплитуда  $\Gamma_2$  остается велика и условие (11) выполняется. Таким образом в нашей модели наиболее благоприятен для реализации сверхпроводимости температурный интервал именно в окрестности и выше точки электронной неустойчивости (ниже точки неустойчивости изменение электронного спектра дополнительно подавляет особенность в  $\Gamma_2$ ).

Необходимо отметить, что структура задачи (9) – (11), обеспечивающая существование сверхпроводящего решения при затравочном отталкивании, формально аналогична структуре фоновой модели сверхпроводимости с кулоновским отталкиванием<sup>12</sup>. В последнем случае, как известно, амплитуды взаимодействий, отвечающих различным энергетическим масштабам также имеют различную величину, а знак параметра порядка в областях выше и ниже дебаевской энергии противоположен<sup>12</sup>. Формальный переход к фоновой модели в (9) соответствует следующему переобозначению

$$\hat{\Gamma}_1 \Delta_1 \rightarrow (-v_{ph} + u_c) \ln \frac{\theta_D}{T_c} \Delta_1; \quad \hat{\Gamma}_2 \Delta_2 = \hat{\Gamma}_1 \Delta_2 \rightarrow u_c \ln \frac{\mu}{\theta_D} \Delta_2; \quad \hat{\Gamma}_2 \Delta_1 \rightarrow u_c \ln \frac{\theta_D}{T_c} \Delta_1, \quad (12)$$

где  $-v_{ph}$  – притягивательный потенциал, обусловленный электрон-фононным взаимодействием,  $u_c$  – кулоновский отталкивательный потенциал. При этом для эффективной константы взаимодействия получаем стандартное выражение  $g_{eff}^{ph} = -v_{ph} + \frac{u_c}{1 + u_c \ln \mu / \theta_D}$ , в

котором уже фигурирует ослабленный кулоновский псевдопотенциал. Однако физический механизм, приводящий к эффективному притяжению, в рассматриваемой модели и в модели с электрон-фононным взаимодействием существенно различен. Если в фоновой модели (12) относительное повышение амплитуды взаимодействия с ростом энергии ( $u_c > u_c - v_{ph}$ ) связано с наличием притяжения ( $-v_{ph}$ ) и понижением амплитуды на малых энергиях, то в модели (9) – (11) это связано с повышением взаимодействия на больших энергиях в окрестности точки неустойчивости ( $\Gamma_2 > \Gamma_0$ ). Эффективность подавления отталкивания в фоновой модели определяется параметром  $\mu/\theta_D$ . В нашей модели аналогичную роль играет интенсивность пика  $\Gamma_2$ , определяющая мягкость системы.

Предложенный в настоящей работе механизм допускает также формальную аналогию с механизмом, обеспечивающим эффективное притяжение для высших ( $l \geq 1$ ) гармоник сверхпроводящего параметра порядка (см., например,<sup>13</sup>). Изменение хартри-фоковского потен-

циала  $\Gamma$  как функции энергии в уравнении амосогласования для  $\Delta$  играет такую же роль, как изменение гармоник с  $l \geq 1$  - потенциала взаимодействия как функции угла.

#### Литература

1. Сухаревский Б.Я. и др. Изв. АН СССР, сер. физ., 1989, **53**, 1345.
2. Прохоров А.М. и др. Письма в ЖЭТФ, 1990, **51**, 132.
3. Козлов А.М., Максимов Л.А. ЖЭТФ, 1965, **48**, 1184.
4. Littlewood P.V. et al. Phys. Rev. B, 1989, **39**, 12371.
5. Mattheiss L.F., Hamann D.R. Sol. St. Comm., 1988, **63**, 395.
6. Kampf A., Schrieffer F.R. Preprint, Los Alamos, 1989.
7. Castellani C., Kotliar G. Phys. Rev. B, 1989, **39**, 2876.
8. Мория Т. Спиновые флуктуации в магнетиках с коллективизированными электронами. М. Мир, 1988.
9. Pickett W.E. Rev. Mod. Phys., 1989, **61**, 433.
10. Ланно М., Бургуэн Ж. Точечные дефекты в полупроводниках. М.: Мир, 1984.
11. Горбачевич А.А. Письма в ЖЭТФ, 1990, **1**, 39.
12. Боголюбов Н.Н. и др. Новый метод в теории сверхпроводимости. Изд-во АН СССР 1958.
13. Veal-Monod M.T. et al. Phys. Rev. B, 1986, **34**, 7716.

Физический институт им. П.Н.Лебедева  
Академии наук СССР

Поступила в редакцию  
14 февраля 1990 г.