

О "КИСЛОРОДНОЙ" КАРТИНЕ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ

Г.М.Элиашберг

В рамках картины "дырки на кислороде" проведен расчет сопротивления, температуры перехода T_c и поведения "щели" вблизи T_c .

Эксперимент со все большей определенностью указывает на то, что носителями тока в высокотемпературных оксидах являются дырки в валентной зоне, связанной с p -состояниями кислорода¹ (см., также,²). Если это так, то возникает физическая картина, в которой проблемы магнетизма и сверхпроводимости оказываются в значительной мере разделенными. По существу, в этом случае мы имеем дело с сильно легированным полупроводником. Он содержит магнитную подсистему, которая формируется гибридизацией состояний $Cu3d^9(x^2 - y^2)$ и $O2p(x, y)$ и является локализованной вследствие эффекта Мотта. Свободные от гибридизации p -состояния кислорода образуют валентную зону, концентрация дырок в которой определяется стехиометрией. Если энергия Ферми дырок велика по сравнению с энергией их обменного взаимодействия со спинами меди, то влияние этого взаимодействия на спектр и транспортные свойства дырок будет относительно слабым, и, если необходимо, его можно учесть по теории возмущений. Проблемы, связанной с эффектом Кондо, здесь нет, так как существует значительный ($\sim 0,1$ эВ) обмен внутри магнитной системы. Остается, разумеется, отдельный вопрос о состоянии этой системы. Очень привлекательной является гипотеза Андерсона³, в соответствии с которой это состояние является спиновым синглетом при достаточно большой концентрации носителей.

В этой ситуации, по-видимому, единственным взаимодействием, которое может быть ответственным за наблюдаемые высокие T_c , является взаимодействие дырок с фононами. Благоприятным моментом является наличие богатых фононных спектров в таких системах, как La_2CuO_4 и $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$. Поскольку дырки генетически связаны с кислородом, то они должны эффективно взаимодействовать с высокочастотными кислородными модами. Как будет показано ниже, это позволяет иметь требуемую величину T_c уже при константе взаимодействия $\lambda \sim 1$. На основе той же модели рассчитана и зависимость удельного сопротивления от температуры $\rho(T)$, которая оказывается линейной в широком интервале T . Сравнение с экспериментом дает дополнительное ограничение $(m^*/m)\lambda \sim 1$. Таким образом, эффективная масса дырок m^* должна быть близка к массе электрона m . К сожалению, пока отсутствуют другие сколь-нибудь надежные источники информации о величине m^* . Проводившиеся до сих пор зонные расчеты, начиная с ⁴, не учитывают кулоновских корреляций и, поэтому, не содержат данных о спектре кислородных дырок. Парамагнитная восприимчивость в рамках рассматриваемой картины должна быть приписана магнитной подсистеме. Наконец, скачок теплоемкости в точке перехода, данные по которому при обычной интерпретации приводят к аномально большой величине m^* , является, как будет видно из дальнейшего, скачком фононной теплоемкости в случае высокотемпературных сверхпроводников.

Расчет основан на модельных предположениях, которые являются максимально простыми там, где отсутствует надежная информация. 1. Исключается из рассмотрения перенос между слоями CuO_2 , каждому слою соответствует одна валентная зона (двумерная), концентрация дырок в которой равна x на квадратную ячейку. Для $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ $x = 0,5$. 2. Фононный спектр (см., например, ⁵⁻⁷) имитируется тремя эйнштейновскими осцилляторами, частоты которых ω_i находятся в отношении 1 : 3 : 5. При выборе взаимодействия используем известное соотношение:

$$\lambda = 2 \int_0^{\infty} d\omega \frac{\alpha^2(\omega) F(\omega)}{\omega},$$

и предположим, что константы α_i не зависят от частоты, и, поэтому, λ_i обратно пропорциональны частотам ω_i .

Выпишем теперь уравнение для T_c , приведя его к форме с симметричным ядром:

$$\chi_n = \frac{1}{[(2n+1)(1+\lambda(n))]^{1/2}} \sum_{n' \geq 0} \frac{1}{[(2n'+1)(1+\lambda(n'))]^{1/2}} D_+(n, n') \chi_{n'}. \quad (1)$$

где

$$\lambda(n) = \frac{1}{2n+1} \sum_{n' \geq 0} D_-(n, n'),$$

$$D_{\pm}(n, n') = \sum_{i=1}^3 \lambda_i u_i^2 \left[\frac{1}{u_i^2 + 4(n-n')^2} + (-)^i \frac{1}{u_i^2 + 4(n+n'+1)^2} \right],$$

$$u_i = \hbar\omega_i / \pi T_c.$$

Эта формула удобна для применения вариационного принципа. С достаточной для наших целей точностью находим: $T_c = 0,35\hbar\omega_1$ при $\lambda_1 = 1$, $T_c = 0,5\hbar\omega_1$ при $\lambda_1 = 1,3$. Нижняя частота ω_1 соответствует, в основном, акустическим модам, и оптимальная оценка для нее $\hbar\omega_1 \approx 170 - 200$ К в случае $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$; (Следует иметь в виду, что максимальный импульс передачи в плоскости равен $2p_F$). Таким образом, требуемый интервал T_c обеспечивается окрестностью значения $\lambda = 1$. Отметим, что введение в (1) кулоновского псевдопотенциала

дает тот же эффект, что и некоторое перераспределение весового вклада в пользу низких частот.

Вычислим теперь сопротивление для этой же модели. Поскольку при $T > T_c$ существенны большие передачи импульса, то $\rho(T)$ можно выразить через затухание дырочных возбуждений:

$$\rho = \frac{m^*}{ne^2 \tau}; \quad \frac{1}{\tau} = 2\pi\lambda_1 \omega_1 f(t_1), \quad t_i = T/\hbar\omega_i,$$

$$f(t_1) = \left[\int_0^1 \frac{dx}{\sum_{i=1}^3 \varphi(t_i, x)} \right]^{-1}; \quad \varphi(t, x) = \left[\text{sh} \frac{1}{t} \left(1 - x^2 \text{th}^2 \frac{1}{2t} \right) \right]^{-1}. \quad (2)$$

Функция $f(t_1)$ изображена на рис. 1. Пунктиром показан результат, который получается, если вклады высоких частот ω_2 и ω_3 уменьшить в 2/3 раз. На линейном интервале кривая 1 имеет вид $f(t_1) = -0,3 + 1,6 t_1$. Истинно классический предел достигается при $t_1 > 5$ и соответствует наклону 1,53. Если воспользоваться результатами работы ⁸, которые являются одними из лучших, то для $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ получим: $(m^*/m)\lambda_1 \approx 0,7$. Это приводит к предположению, что m^* должно быть даже меньше m . Ограничение несколько смягчается, если в использованной модели занижен вклад высоких частот фононного спектра. Тем не менее, можно сказать, что значение $(m^*/m) = 5$ определенно ставило бы под сомнение всю картину. Следует отметить, что речь идет именно о массе, входящей в проводимость и не содержащей перенормировки Мигдала типа $1 + \lambda$.

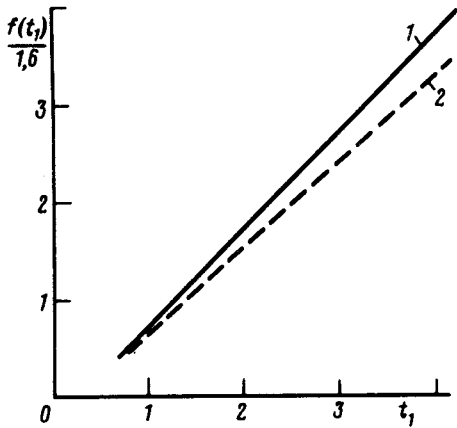


Рис.1

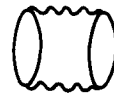


Рис.2

В связи со сказанным особое значение приобретает вопрос о скачке теплоемкости в точке перехода. Дело в том, что если воспользоваться даже наименьшим из опубликованных значений $\Delta C_p = 2J/\text{моль К}$ ⁹, то при обычной интерпретации получается значение m^* , выходящее за указанные выше пределы. Данные более поздних измерений еще в 2 – 3 раза больше. Ситуация качественно меняется, если принять во внимание вклад в ΔC_p , который связан с изменением фононной свободной энергии при сверхпроводящем переходе. При обычных величинах $T_c \lesssim 10 \text{ К}$ сама фононная теплоемкость сравнима или даже меньше электронной, тогда как, например, в случае $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ $C_p > 100 J/\text{моль.К}$ при $T = T_c$, что более чем на два порядка превышает обычный масштаб электронной теплоемкости. Интересующий нас вклад определяется диаграммой для свободной энергии, изображенной на рис. 2. (Общее выражение для термодинамического потенциала электрон-фононной системы приведе-

но в 10). Каждая из петель на этом рисунке содержит квадрат "щели". В уравнениях для собственноэнергетических частей Σ_1 и Σ_2 10 , этому вкладу соответствует поправка к ядру взаимодействия $\sim \Sigma_2^2$. Существенно, что этот вклад отрицателен:

$$\delta F = -\frac{1}{4} \sum_{i=1}^3 \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} T \Sigma_{\omega} [D_i^{(0)} D_k^{(0)} \Pi_{ik}^2]_{q, \omega}, \quad (3)$$

и, поэтому уменьшает коэффициент при ψ^4 в выражении для свободной энергии Гинзбурга и Ландау. Не останавливаясь здесь на деталях вычислений, приведем результат, характеризующий масштаб эффекта:

$$F = -a \psi^2 + \frac{b}{2} \left(1 - 6 \frac{T_c}{E_F} \ln \frac{E_F}{T_c} \right) \psi^4. \quad (4)$$

Коэффициент, определенный при $\lambda_1 = 1,3$ и для независимых плоскостей, должен быть увеличен еще, по крайней мере, вдвое, так как петли на диаграмме рис. 2 могут относиться к разным плоскостям CuO_2 . При $E_F = 0,6$ эВ и $T_c = 100$ К происходит пятикратное уменьшение коэффициента при ψ^4 . Не относясь слишком серьезно к этим числам, мы, тем не менее, приходим к выводу, что этот коэффициент становится независимым параметром в условиях высокотемпературной сверхпроводимости. Он может, в принципе, оказаться отрицательным, и тогда сверхпроводящий переход становится переходом первого рода. В связи с этим отметим, что для грязных образцов, когда длина пробега определяется рассеянием на дефектах, в (4) войдет $\ln(E_F \tau / \hbar)$, и скачок теплоемкости будет падать по мере загрязнения.

Независимо от этого весьма сильно изменяется структура уравнений ниже T_c : сверхпроводящий параметр порядка должен учитываться и в ядре взаимодействия.

Я благодарен В.Б.Тимофееву за дискуссии по оптике фононов и А.А.Голубову за обсуждение проблемы численного анализа уравнений.

Литература

1. Nücker N., Fink J., Fuggle J.C. Phys. Rev. B, 1988, 37, 5158.
2. Weber W. Preprint, 1988.
3. Anderson P.W. Science, 1987, 235, 1196.
4. Mattheiss L.F. Phys. Rev. Lett., 1987, 58, 1028.
5. Кулаковский В.Д., Мисочко О.В., Тимофеев В.Б. и др. Письма в ЖЭТФ, 1987, 46, 460.
6. Cardona M., Liu R., Thomsen C. et al. Sol. St. Comm., 1988, 65, 71.
7. Brüesch P., Bücher W. Zs. Phys. B, 1988, 70, 1.
8. Kapitulnik A. Preprint, 1988.
9. Kitazawa K. et al. Jap. J. Appl. Phys., 1987, 26, 6778.
10. Элиашберг Г.М. ЖЭТФ, 1962, 43, 1105.