

## ВЛИЯНИЕ АНДЕРСОНОВСКИХ ПРИМЕСЕЙ С СИЛЬНЫМ ЛОКАЛЬНЫМ ЭЛЕКТРОН-ФОНОННЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ НА КРИТИЧЕСКУЮ ТЕМПЕРАТУРУ СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО ПЕРЕХОДА

А.Г.Мальшуков

Квазистационарные примесные электронные состояния, взаимодействующие с локальными колебаниями решетки, рассматриваются в рамках модели Андерсона. Для расчета  $T_c$  используется теория ферми-жидкости. Показано, что при достаточно большой константе взаимодействия примесных состояний с колебаниями даже малая концентрация примесей может привести к значительному возрастанию  $T_c$ . При этом изотоп-эффект не отвечает теории БКШ. Обсуждаются следствия модели в приложении к высокотемпературным сверхпроводникам.

Гамильтониан отдельной примеси имеет вид:

$$H = \sum \epsilon_k n_{k\sigma} + \sum \epsilon n_\sigma + \sum (VC_{k\sigma}^+ a_\sigma + \text{з.с.}) + U n_\uparrow n_\downarrow + \alpha \sum n_\sigma q + \frac{Mg^2}{2} + M\omega_0^2 \frac{q^2}{2} \quad (1)$$

Первые четыре члена в  $H$  представляют собой стандартный гамильтониан Андерсона<sup>1</sup>. Пятый — описывает взаимодействие электронов с локальными колебаниями. Для простоты учитывается лишь одна колебательная степень свободы. Примесный уровень считается невырожденным.

Пусть  $\Gamma \gg \omega_0$ , где  $\Gamma = \pi |V|^2 N(0)$ ,  $\Gamma$  — ширина квазистационарного примесного уровня ( $N(0)$  — плотность состояний на поверхности Ферми). Как показано в<sup>2</sup>, в адиабатическом приближении при  $\xi \equiv \alpha^2/M\omega_0^2 \Gamma = \xi_c$  осциллятор испытывает неустойчивость. Исчезает квадратичный член в потенциальной энергии, а с дальнейшим ростом  $\xi$  формируется двухъямный адиабатический терм. В зависимости от значения  $\epsilon$  потенциальная яма может быть как симметричной, так и асимметричной. Величина  $\xi_c$  определяется зарядовой восприимчивостью на нулевой частоте. Как легко показать  $-4\xi_c \chi_{ch}(\epsilon_0) = 1$ , а  $\epsilon_0$  — точка, где  $\chi_{ch} = -\frac{1}{4} d \langle n \rangle / d \epsilon$  достигает максимума ( $\langle n \rangle = \langle n_\uparrow \rangle + \langle n_\downarrow \rangle$ ). Точное решение<sup>1</sup> модели Андерсона позволяет найти  $\chi_{ch}$  при больших значениях  $U$ , которые всегда характерны для состояний с атомным масштабом локализации. По мере формирования двухъямного термина адиабатическое приближение теряет силу, что связано с кондо-эффектом, обусловленным туннелированием системы между двумя состояниями и низкочастотным откликом электронной подсистемы на это движение. Ситуация аналогична рассмотренной в<sup>3</sup>, хотя исходный гамильтониан там и отличается от (1). В симметричном случае электронная подсистема испытывает квантовые осцилляции между двумя вырожденными состояниями, отличающимися числом электронов на локальном уровне. При  $U \gg \Gamma$  поведение системы определяется конкуренцией флуктуаций заряда и спина, взаимно подавляющих друг друга. При этом одночастичная плотность состояний характеризуется присутствием узкого ( $\sim T_K$ ) резонанса вблизи  $E_F$ . Если  $T \lesssim T_K \ll \omega_0$  ( $T_K$  — температура Кондо) можно пренебречь запаздыванием в отклике колебательной подсистемы, роль которой сводится к появлению двухэлектронного притягательного взаимодействия  $U_{ph} = 2\xi\Gamma$ . При  $U_{ph} > U$  система описывается гамильтонианом (1) с  $U = U_{эфф} < 0$ . Формируется так называемый центр с отрицательным  $U$  (в модели Хаббарда см.<sup>4</sup>).

Влияние примесей с сильным локальным электрон-фононным взаимодействием на  $T_c$  рассматривалось в<sup>5</sup> при  $\xi < \xi_c$ , а также в<sup>6,7</sup> — в модели Андерсона с  $U_{эфф} < 0$ . Остается открытым вопрос о корректном учете как кулоновского отталкивания в<sup>5</sup>, так и силь-

ного притяжения электронов в <sup>6,7</sup>. В <sup>8</sup> с помощью численного моделирования при  $U = 0$  вычислялась производная  $dT_c/dc|_{c=0}$  ( $c$  — концентрация примесей). Ниже будут рассмотрены два случая: а)  $\xi < \xi_c$ , а локализованный спин на примеси отсутствует; б)  $\xi - \xi_c \geq \xi_c$ , при  $2\xi\Gamma - U > 0$  и  $T \ll T_K \ll \omega_0$ . Оба случая отвечают области  $T \ll T_K$  (в первом  $-T_K \sim \sim \Gamma$ ). Это позволяет использовать теорию ферми-жидкости для вычисления вершины электрон-электронного взаимодействия, входящей в уравнение для щели. С помощью тождеств Уорда можно выразить вершину через зарядовую  $\chi_{ch}$  и спиновую  $\chi_{sp}$  восприимчивости примеси. Проводилось обычное усреднение по положениям примесей <sup>9</sup>.

В случае а)  $T_c \approx \omega_D \exp(-1/f)$ , где

$$f = \frac{\lambda - N(\chi_{sp} - \chi_{ch})/a + 4N\xi^* \chi_{ch}^2}{1 + N(\chi_{sp} + \chi_{ch} + 4\xi^* \chi_{ch}^2)} \quad (2)$$

В (2)  $\lambda$  — константа электрон-фононного взаимодействия (без примесей)  $N = c/N(0)\Gamma$ ,  $\xi^* = \xi/(1 - 4\chi_{ch}\xi)$ . Частотная область отталкивания  $\chi_{sp} - \chi_{ch}$  порядка  $\Gamma \gg \omega_0$ . С этим связано появление параметра  $a$  — обычной логарифмической перенормировки. При  $\xi = 0$  выражение (2) совпадает с <sup>10</sup> и описывает подавление сверхпроводимости андерсоновскими примесями. Численный анализ (2) с использованием выражений для  $\chi_{ch}$ ,  $\chi_{sp}$  из <sup>1</sup> показывает, что существенное повышение  $T_c$  возможно лишь в области  $\Delta \equiv (1 - 4\chi_{ch}\xi) \ll \ll 1$ . Например, при  $\epsilon^*/2\Gamma = 0,3$  ( $\epsilon^*$  — перенормированное значение  $\epsilon^1$ ),  $\lambda = 0, 2$ ,  $\Gamma/\omega_D = 20$ ,  $N = 3$ ,  $\xi = 5$  получим  $f \approx 0,3$ , но уже при  $\xi = 4$   $f$  значительно меньше. В области малых  $\Delta$  осуществляется переход к двухъямной потенциальной энергии осциллятора и, естественно, важны ангармонические члены. В приведенной выше оценке  $\Delta \approx 0,1$ , что как раз на границе применимости гармонического приближения.

В случае б) можно воспользоваться отмеченной в <sup>11</sup> симметрией восприимчивостей при изменении знака  $U$  в симметричной модели Андерсона. А именно, величина  $\chi_{sp} - \chi_{ch}$  антисимметрична, а  $\chi_{sp} + \chi_{ch}$  симметрична при  $U \rightarrow -U$ . Следовательно,  $\chi_{sp}$  и  $\chi_{ch}$  меняются местами. Это является следствием отмеченной в <sup>1</sup> электрон-дырочной симметрии. При  $\lambda = 0$   $T_c \approx T_K \exp(-1/f)$ , где  $f$  получается из (2) заменой  $\xi \rightarrow 0, a \rightarrow 1, \chi_{sp} \rightleftharpoons \chi_{ch}$ . При  $T \ll T_K$  и  $|U_{эфф}| \gg \Gamma$   $\chi_{sp} \rightarrow \pi\Gamma/2T_K$ , а  $\chi_{ch} \rightarrow 0$ . В данном случае  $\chi_{sp}$  определяет флуктуацию заряда системы, а  $\chi_{ch}$  — спина. В основном состоянии поведение системы обусловлено квантовыми осцилляциями между состояниями с двумя электронами на примеси и пустым примесным уровнем. Так же как при  $U > 0$  подавлены флуктуации заряда, в данном случае подавлены спиновые флуктуации. Так как  $\chi_{sp} \gg 1$ , уже при сравнительно малых  $N$   $f$  выходит на насыщение  $f = 1$ . Следует однако помнить, что теория справедлива в области  $T_c \ll T_K$ . Величина  $T_K$ , согласно <sup>3</sup>, меняется в широких пределах. Если пренебречь запаздыванием в притягательной части  $U_{эфф}$ , можно было бы записать <sup>1</sup>

$$T_K = \frac{(2|U_{эфф}|\Gamma)^{1/2}}{\pi} \exp(-\pi|U_{эфф}|/8\Gamma) \quad (3)$$

Однако остается открытым вопрос, определяет ли параметр  $T_K/\omega_0 \ll 1$  область применимости выражения (3) при  $\omega_0 \ll \Gamma$ . В подходе, развитом в <sup>3</sup>,  $\omega_0$  является, по существу, ультрафиолетовым параметром обрезания и явно входит в  $T_K$  при  $T_K \ll \omega_0$ . Имея в виду высокотемпературные сверхпроводящие окислы, следует принять во внимание высокую частоту локальных колебаний атомов кислорода достигающую 0,08 эВ. Так что во всяком случае довольно большие значения  $T_K$  вполне вероятны. Изотоп-эффект определяется зависимостью  $T_K$  от частоты  $\omega_0$  (при  $\lambda = 0$ ) и обнаруживает, таким образом, нетривиальное поведение. Если справедливо выражение (3), он отсутствует.

Заметим, что из-за присущей сверхпроводящим окислам неупорядоченности уровень  $\epsilon$  может быть распределен в довольно широком интервале энергий. Это означает и широкое распределение "магнитных" полей, создающих асимметрию  $\Delta E$  энергий двух возможных при-

местных состояний. Очевидно, что наличие широкого распределения энергий ДУС должно приводить к линейному ходу их вклада в сопротивление. Вероятным центром (по крайней мере для иттриевых керамик), где возможно формирование резонансного состояния, является атом кислорода в вершине октаэдра. Для него как раз характерна аномально большая величина среднего квадрата смещений<sup>12</sup>. Кроме того, как следует из зонных расчетов<sup>13</sup>,  $\pi$ -уровень кислорода дает большой вклад в узкую зону вблизи  $E_F$ . Важно, что вершинный кислород является мостиком для электронов в разных плоскостях  $\text{CuO}_2$ . Тогда ясно, что при наличии широкого распределения ДУС по энергиям, прозрачность для резонансного туннелирования электронов между плоскостями  $\sim T$ , а сопротивление вдоль оси  $c \sim T^{-1}$ . Это качественно согласуется с наблюдающейся анизотропией температурного хода сопротивления. Разумеется, эти рассуждения не учитывают характерного для Кондо систем универсального вклада в сопротивление и справедливы лишь при  $T > T_K$ . В этой связи становится важным распространение теории в область  $T_c \gtrsim T_K$ .

Автор признателен В.М.Аграновичу и В.Е.Кравцову за дискуссию.

#### Литература

1. Tsvetlick A.M., Wiegmann P.B. Adv. in Phys., 1983, 32, 453.
2. Кравцов В.Е., Мальшуков А.Г. ЖЭТФ, 1978, 75, 691; 1979, 77, 180.
3. Yu C.C., Anderson P.W. Phys. Rev. B., 1984, 29, 6165.
4. Anderson P.W. Phys. Rev. Lett., 1975, 34, 953.
5. Agranovich V.M., Kravtsov V.E., Mal'shukov A.G. Sol. St. Comm., 1980, 33, 137.
6. Ting C.S., Talwar D.N., Ngai K.L. Phys. Rev. Lett., 1980, 45, 1213.
7. Shimane E. Sol. St. Comm., 1979, 32, 731.
8. Schüttler H.B., Jarrell M., Scalapino D.J. J. Low. Temp. Phys., 1987, 69, 159.
9. Абрикосов А.А., Горьков Л.П., Дзялошинский И.Е. Методы квантовой теории поля в статистической физике. М.: Физматгиз, 1962.
10. Sakurai A. Phys. Rev. B, 1978, 17, 1195.
11. Yosida K., Yamada K. Prog. Theor. Phys., 1975, 53, 1286.
12. Caponi J.J., Chailout C., Hewat A.W. et al. Europhys. Lett., 1987, 3, 1301.
13. Massidda S., Yu J., Freeman A.J., Koelling D.O. Phys. Lett. A, 1987, 122, 198.