

ДВУХПОТОКОВЫЙ БРЭГГ-КУЛОНОВСКИЙ МЕХАНИЗМ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ

В.В.Кочаровский, Вл.В.Кочаровский

Предложен механизм высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП), основанный на брэгговском отражении пар электронов от решетки проводящих атомных слоев. Показано, что экранированное ими кулоновское отталкивание ведет к ВТСП путем образования двух, взаимно индуцирующих друг друга, встречных потоков спаренных электронов.

1. Введение. Мы предлагаем новый механизм ВТСП в кристаллах, состоящих из чередующихся хорошо и плохо проводящих атомных слоев с периодом d . Именно такая структура, по-видимому, порождает ВТСП керамик, приводя к брэгговскому отражению пар электронов проводимости и включая в действие рассматриваемый ниже механизм ВТСП за счет экранированного кулоновского отталкивания с большой характерной энергией $\hbar \omega_c \sim 1$ эВ.

2. Модель. Покажем сущность механизма на упрощенной плоскостной модели, включающей лишь принципиально необходимые элементы. Учтем, что потенциал кулоновского отталкивания двух электронов $v(r_1, r_2)$ промодулирован вдоль оси z частично экранирующими его проводящими слоями и зависит не только от относительного $r_1 - r_2$, но и от абсолютного расположения электронов (рис. 1). В результате возникает отсутствовавшее в

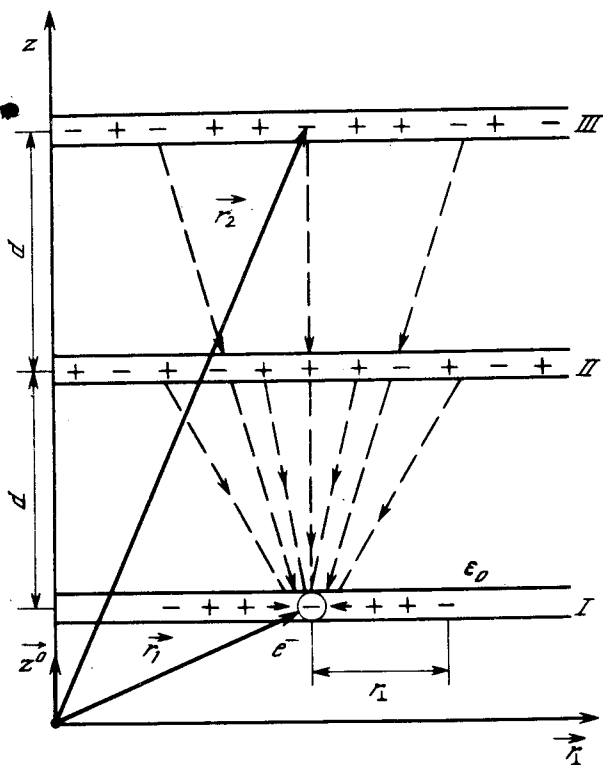


Рис. 1. Схема экранировки кулоновского поля заряда e^- проводящими слоями

теории БКШ брэгговское отражение пары электронов с импульсами $\hbar k, -\hbar k + \hbar q z^0$ в пару электронов с импульсами $\hbar k', -\hbar k' - \hbar q z^0$ внутри первой зоны Бриллюэна $k_z \in (-q, q)$. Оно сопровождается передачей решетке импульса $2\hbar q = 2\pi\hbar/d$, но не энергии (аналогично эффекту Мессбауэра). В основу механизма ВТСП мы кладем именно такой двухэлектронный процесс переброса. Он характеризуется матричным элементом $-2\nu_1 = \langle 1'2' | v(r_1, r_2) | 21 \rangle$.

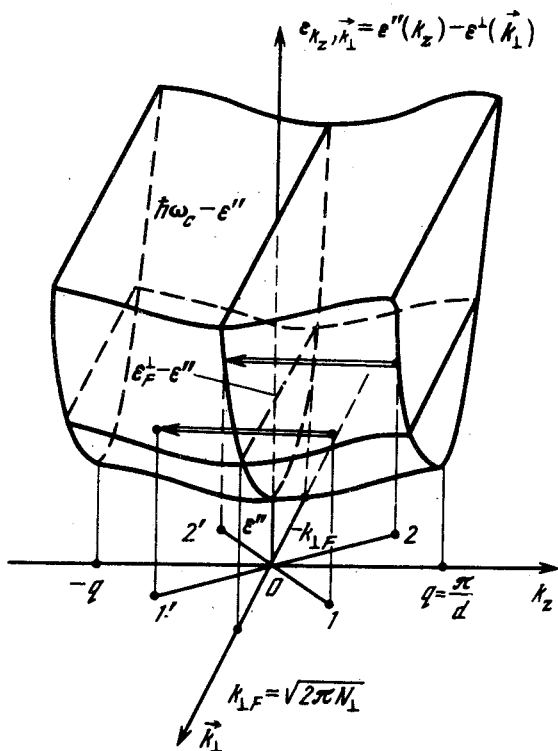
Его оценка дает¹⁾ $|\nu_1| V = 2\pi\alpha e^2 r_{\perp} r_{\parallel} / \epsilon_0$. Здесь r_{\parallel} и r_{\perp} — радиусы кулоновского экранирования вдоль и поперек оси z ; $r_{\perp} \sim k_{\perp F}^{-1} = (2\pi N_{\perp})^{-1/2}$, $N_{\perp} = Nd$ — поверхностная концентрация электронов в проводящем слое; ϵ_0 — "фооновая" диэлектрическая проницаемость; α — параметр эффективности брэгговского отражения пары электронов (r_1, r_2) за счет экранировки неоднородным проводящим слоем, зависящий от строения решетки проводящих слоев, $\alpha \lesssim 1$; V — объем кристалла.

Считая $\nu_1 = \text{const}$ и повторяя аргументацию, аналогичную используемой при выводе гамильтониана спаривания в теории БКШ, приходим к

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\sigma}^+ a_{\mathbf{k}\sigma} - 2\nu_1 (b_{+}^{\dagger} b_{+} + b_{+} b_{-}^{\dagger}); \quad b_{+} = \sum_{\mathbf{k}_{\perp}} \sum_{0 < k_z < q} a_{-k_z + q, -\mathbf{k}_{\perp}, \downarrow} a_{k_z, \mathbf{k}_{\perp}, \uparrow},$$

$$b_{-} = \sum_{\mathbf{k}_{\perp}} \sum_{-q < k_z < 0} a_{k_z, -\mathbf{k}_{\perp}, \downarrow} a_{-k_z - q, \mathbf{k}_{\perp}, \uparrow} \quad (1)$$

В этом модельном гамильтониане $a_{k_z, \mathbf{k}_{\perp}, \uparrow}$ — оператор уничтожения электрона с импульсом $\hbar\mathbf{k} = \hbar(k_z \mathbf{z}^0 + \mathbf{k}_{\perp})$, спином $\sigma = \uparrow$ и энергией $\bar{\epsilon}_{k_z, \mathbf{k}_{\perp}} = \epsilon^{\downarrow}(\mathbf{k}_{\perp}) + \epsilon^{\uparrow}(k_z) - \mu$, отсчитываемой от химического потенциала μ (рис. 2). Суммирование в b_{\pm} ведется по области D_{\pm} , где $|\bar{\epsilon}_{k_z, \mathbf{k}_{\perp}}|, |\bar{\epsilon}_{-k_z \pm q, \mathbf{k}_{\perp}}| < \hbar\omega_c$. Для простоты $\epsilon^{\downarrow} = (\hbar k_{\perp})^2 / 2m$.



$$A = \begin{pmatrix} \bar{\epsilon}_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{\epsilon}_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{\epsilon}_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \bar{\epsilon}_2 \end{pmatrix}$$

$$B = 2\nu_1 \begin{pmatrix} 0 & -\langle b_{-} \rangle & 0 & 0 \\ \langle b_{-} \rangle & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \langle b_{+} \rangle \\ 0 & 0 & -\langle b_{+} \rangle & 0 \end{pmatrix}$$

Рис. 2. Схема брэгговского отражения спаренных электронов $1, 2 \rightarrow 1', 2'$ и матрицы связи электронов в двухпотоковом гамильтониане спаривания (2)

¹⁾ За рамками модели остается расчет ν, ν_1 и учет рассеяния без переброса, матричный элемент которого ν_0 обычно не мал по сравнению с ν_1 .

3. Решение модели (1) в приближении самосогласованного поля:

$$\mathcal{H} \rightarrow \tilde{\mathcal{H}} = \sum_{\mathbf{k}_\perp} \sum_{0 < k_z < q} \sum_{i,j=1}^4 \{ A_{ij} c_i^+ c_j + \frac{1}{2} (B_{ij} c_i^+ c_j^+ + B_{ji}^* c_i c_j) \} ;$$

$$c_1 = a_{k_z, \mathbf{k}_\perp, \uparrow}, \quad c_2 = a_{-k_z + q, -\mathbf{k}_\perp, \downarrow}, \quad c_3 = a_{-k_z, -\mathbf{k}_\perp, \downarrow}, \quad c_4 = a_{k_z - q, \mathbf{k}_\perp, \uparrow} . \quad (2)$$

Диагонализуя 4×4 -матрицу методом канонического преобразования, получаем два параметра порядка для взаимно индуцирующих друг друга, встречных потоков спаренных электронов $\langle b_+ \rangle = \gamma \langle b_- \rangle$, $\langle b_- \rangle = \gamma \langle b_+ \rangle$ и уравнение самосогласования при произвольной температуре T :

$$\gamma^2 = 1; \quad \gamma \equiv \frac{\lambda}{2q} \int_{D_+} \int_0^{q/2} \frac{\text{th}(\Lambda_2/2\kappa T) - \text{th}(\Lambda_1/2\kappa T)}{\sqrt{(\bar{\epsilon}_1 + \bar{\epsilon}_2)^2/4 + \tilde{\Delta}^2}} dk_z d\epsilon^\perp,$$

$$\lambda = \frac{\nu_1 V m q}{2\pi^2 \hbar^2}, \quad \bar{\epsilon}_1 = \bar{\epsilon}_{k_z, \mathbf{k}_\perp}, \quad \bar{\epsilon}_2 = \bar{\epsilon}_{q - k_z, \mathbf{k}_\perp} \quad (3)$$

Оно определяет T_c и щели в спектре квазичастиц $E_{1,2} = |\Lambda_{1,2}|$, $\Lambda_{1,2} = [\bar{\epsilon}_2 - \bar{\epsilon}_1 \mp \sqrt{(\bar{\epsilon}_2 + \bar{\epsilon}_1)^2 + 4\tilde{\Delta}^2}]/2$, причем $\tilde{\Delta} = |2\nu_1 \langle b_+ \rangle| = |2\nu_1 \langle b_- \rangle|$ (рис. 3). Результат (3) означает, что в модели (1) ВТСП возникает при любом знаке взаимодействия ν_1 , в том числе за счет кулоновского отталкивания, а не только фононного БКШ-притяжения. В отличие от модели БКШ импульсы электронов в паре направлены в одну и ту же, а не в противоположные стороны оси z .

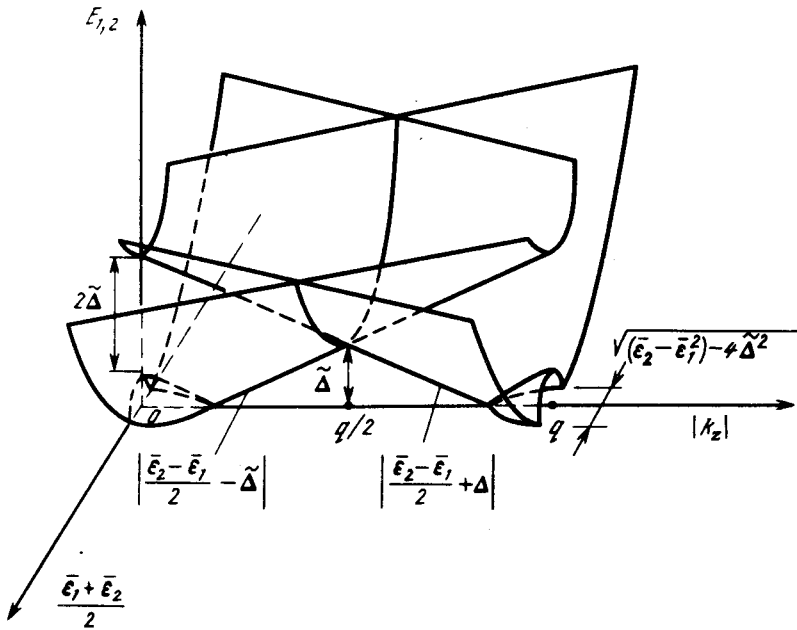


рис. 3. Спектр квазичастиц ВТСП с учетом дисперсии $\epsilon^\parallel(k_z)$. Области бесщелевых возбуждений отсутствуют при $2\tilde{\Delta} > |\bar{\epsilon}_2 - \bar{\epsilon}_1| \equiv |e^\parallel(q - k_z) - e^\parallel(k_z)|$

Приведем оценку T_c и $\tilde{\Delta}(T=0)$ для узкой вдоль оси k_z зоны Бриллюэна: $\epsilon^{\parallel}(k_z) \approx \text{const}$ (для ВТСП керамик ее ширина $\lesssim 0,2$ эВ). Из уравнения (3) в случае слабой связи $|\lambda| \ll 1$ при $2\kappa T_c \ll \mu - \epsilon^{\parallel} \approx \epsilon_F^{\perp} < \hbar\omega_c$ имеем

$$\kappa T_c \approx 1,14 \sqrt{\hbar\omega_c \epsilon_F^{\perp}} \exp\left(-\frac{1}{|\lambda|}\right), \quad 2\tilde{\Delta}(T=0) \approx 3,5 \kappa T_c; \quad \epsilon_F^{\perp} = \frac{\hbar^2 k_{\perp F}^2}{2m} = \frac{\pi \hbar^2 N_{\perp}}{m}. \quad (4)$$

Здесь $\hbar\omega_c = \min\{e^2/r_{\perp} \epsilon_0, \Delta\epsilon^{\perp} - \epsilon_F^{\perp}\} \sim 1$ эВ и определяется либо энергией кулоновского отталкивания $\sim e^2/r_{\perp} \epsilon_0$, либо шириной энергетической зоны $\Delta\epsilon^{\perp} > \epsilon_F^{\perp}$, если выше нее находится запрещенная зона $\Delta\epsilon_g > e^2/r_{\perp} \epsilon_0$.

4. ВТСП слоистых керамик ($T_c \sim 100$ К) объясняется предлагаемым двухпоточковым брэгг-кулоновским механизмом и соответствует реальным параметрам $N_{\perp} \sim 5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$, $r_{\perp} \sim 2\text{ \AA}$, $r_{\parallel} \sim d/2$, $m \sim 10m_e$, $\epsilon_0 \sim 5$, $\alpha \sim 0,6$, $|\lambda| \sim 1/4$. Для повышения T_c необходимо, прежде всего, увеличивать константу связи $|\lambda| \propto \alpha r_{\perp} r_{\parallel} / \epsilon_0 d$. Поэтому для получения ВТСП при комнатной температуре надо создавать слоистые материалы, в которых проводящий слой отличен от CuO-слоя иттриевой керамики и обладает более оптимальным соотношением параметров брэгговского отражения и продольной и поперечной экранировки. Сказанное согласуется с ростом T_c при увеличении числа слоев CuO в ячейке для висмутовых и таллиевых керамик, а также слабой зависимостью T_c от сорта атомов изолирующих слоев и от давления. Последнее характерно и для других слоистых, интеркалированных сверхпроводников¹: халькогенидных, графитовых, органических, ниобиевых, — где также может действовать двухпоточковый брэгг-кулоновский механизм.

Для ВТСП концентрация электронов (дырок) N_{\perp} должна быть не слишком большой, а некоторой оптимальной. В случае CuO-слоев в керамиках она удачно определяется дробной валентностью меди и дефицитом кислорода. При малом изменении концентрации кислорода значение N_{\perp} уходит от оптимального, константа связи уменьшается и ВТСП пропадает. Это наблюдается в $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ при $\delta \gtrsim 0,5$. Спаренные электроны находятся в основном в близких проводящих слоях. Это объясняет малость ($\sim d \sim 12 \text{ \AA}$) и анизотропию длин когерентности ($\xi_{\parallel} \sim 10 \text{ \AA}$, $\xi_{\perp} \sim 30 \text{ \AA}$), а также большую напряженность критических магнитных полей

$H_{c2} \sim 10^6$ Гс. Наблюдаемая положительная кривизна зависимости $H_{c2}(T)$, отсутствующая в традиционной теории БКШ, также может быть связана со слоистостью структуры².

Расчет скачка электронной теплоемкости при $T = T_c$ в тех же, что и (4) приближениях дает $\Delta C_e = 1,43 (2\pi^2/3) N(0) \kappa^2 T_c \sim 4 \cdot 10^5 \text{ эрг/К см}^3$, где плотность состояний на уровне Ферми $N(0) = m q / \pi^2 \hbar^2 \sim 2 \cdot 10^{34} \text{ эрг}^{-1} \text{ см}^{-3}$. Относительный скачок $\Delta C_e / C_{en} = 1,43$ совпадает с известным в модели БКШ. Указанные величины согласуются с экспериментальными, например, для $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$.

Анализ показывает, что кулоновское отталкивание внутри каждого из двух встречных потоков пар электронов (дополнительный член $-2\nu_0 (b_+^+ b_+ + b_-^+ b_-)$ в (1)) ослабляет, но не подавляет ВТСП, если матричный элемент для брэгговского отражения пар больше, чем для попутного рассеяния: $|\nu_1| > -\nu_0$. Грубо говоря, требуется преобладание первой гармоники (по переменной $z_1 + z_2$) потенциала $v(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ над нулевой. Выполнение этого условия зависит от структуры решетки; оптимальное соотношение длин экранировки и толщин слоев порядка 1. Вопрос о вычислении ν , ν_1 , ν_0 в керамиках и о реализуемости требования $|\nu_1| > -\nu_0$, хотя бы для некоторых импульсов $k_z - k'_z$, остается открытым. Слабое фононное БКШ-притяжение лишь немного влияет на ВТСП, что согласуется с отсутствием (малостью) изотопического эффекта в керамиках.

Измеряемый разброс величины ВТСП-щели $2\Delta(0)/\kappa T_c$ от 0,6 до 17 может быть связан с ее анизотропией (обусловленной анизотропией взаимодействия³), дисперсией $\epsilon^{\parallel}(k_z)$ и наличием двух типов квазичастиц $E_{1,2}$ (рис. 3).

5. Предлагаемый механизм ВТСП существенно отличается от обсуждавшихся ранее. Чаще всего причины ВТСП ищутся внутри двумерных проводящих слоев. Взаимодействие электронов соседних слоев решетки учитывается лишь в нескольких работах, например, ⁴⁻⁶. Однако там и в большинстве других работ; как и в теории БКШ, за основу берется сверхпроводимость за счет какого-либо притяжения (через фононы, экситоны и т. п.) и ВТСП объясняется тем или иным механизмом ее усиления ¹.

Математическая модель (1) близка к двухзонной модели ⁷ и более корректной модели сверхпроводимости с учетом структурного фазового перехода ¹. Однако у нас механизм ВТСП имеет существенно другую физическую природу, обусловленную процессом кулоновского рассеяния пар электронов проводимости с перебросом внутри одной энергетической зоны.

Двухпоточковый брэгг-кулоновский механизм позволяет объяснить ВТСП керамик и указывает путь создания слоистых атомных структур с большей критической температурой. Одновременно он дает положительное конструктивное решение давней проблемы возможности кулоновской ВТСП.

Литература

1. Проблема ВТСП. Под ред. В.Л. Гинзбурга и Д.А. Киржница. М.: Наука, 1977.
2. *Shapiro B. Ya., Yefimova L. V.* J. Phys., 1987, **20**, 5331.
3. *Maekawa S. et al.* Jap. J. Appl. Phys., 1987, **26**, (Part 2), L468.
4. *Inoue M. et al.* J. Phys. Soc. Jap., 1987, **56**, 3622; Sol. St. Comm., 1987, **63**, 201.
5. *Nakajima S.* J. Phys. Soc. Jap., 1987, **56**, 871.
6. *Tesanovic Z.* Phys. Rev. B, 1987, **36**, 2364.
7. *Suhl H. et al.* Phys. Rev. Lett., 1959, **31**, 552.