

СОСУЩЕСТВОВАНИЕ СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО КОНДЕНСАТА И КВАЗИСТАЦИОНАРНЫХ СОСТОЯНИЙ ДЫРОЧНЫХ ПАР

В.И.Белявский, Ю.В.Копяев*¹⁾

Государственный педагогический университет
394043 Воронеж, Россия

*Физический институт им. П.Н.Лебедева РАН
117924 Москва, Россия

Поступила в редакцию 6 октября 2000 г.

Возникновение связанных состояний при прямом кулоновском отталкивании двух дырок, главные значения тензора обратных эффективных масс которых имеют разные знаки, рассматривается как возможный механизм высокотемпературной сверхпроводимости. Исследование характера особенностей амплитуды рассеяния показывает, что, помимо квазистационарных состояний, при определенных условиях возможны состояния с отрицательным затуханием, отражающие тенденцию к образованию конденсата дырочных пар. Сосуществование квазистационарных состояний и конденсата качественно согласуется с особенностями фазовой диаграммы высокотемпературных сверхпроводящих купратов с дырочным типом допирования.

PACS: 74.20.-z

Особенности электронной структуры высокотемпературных сверхпроводящих (ВТСП) соединений с дырочным типом допирования – квазидвумерный характер электронных состояний, нестинг контура Ферми и расположение уровня Ферми в непосредственной окрестности седловой точки электронного закона дисперсии [1] – обеспечивают возможность образования связанных состояний пар квазичастиц (электронов или дырок) с квазиимпульсом $K \neq 0$ [2]. Контур Ферми (или значительная его часть) принадлежит области k -пространства, имеющей гиперболическую метрику: в окрестности седловой точки главные значения двумерного (2D) тензора обратных эффективных масс имеют разные знаки. Как следствие – изменяется характер взаимодействия электронов, дающего вклад в корреляционную энергию: реальному отталкиванию одноименных зарядов может соответствовать эффективное притяжение [3, 4]. Заполнение состояний внутри контура Ферми приводит к тому, что каждому квазиимпульсу пары соответствует определенная область 2D зоны Бриллюэна, которой принадлежат квазиимпульсы $k_{\pm} = K/2 \pm k$ двух квазичастиц, образующих пару (здесь k – квазиимпульс относительного движения). В этом заключается причина ослабления корреляций в электронной подсистеме металла, и поэтому энергия взаимодействия двух квазичастиц приближенно может быть записана как $\Xi_K a^2 \cdot \tilde{U}(k)$ [2], где Ξ_K – площадь области значений квазиимпульсов k_{\pm} , a – межатомное расстояние, $\tilde{U}(k) = 4\pi e^2 (k^2 + k_0^2)^{-1}$ – фурье-образ энергии экранированного кулоновского взаимодействия, параметр экранирования может быть записан как $k_0^2 = 4\pi e^2 g_F$; здесь g_F – плотность состояний на уровне Ферми. На рис.1а показан характерный для ВТСП соединений дырочный контур Ферми с нестингом в направлении [100], импульс Ферми для этого направления обозначен k_F . Область Ξ_K для вектора $K < 2k_F$, также направленного вдоль [100], на рис.1а заштрихована. В

¹⁾ e-mail: kopayev@sci.lebedev.ru

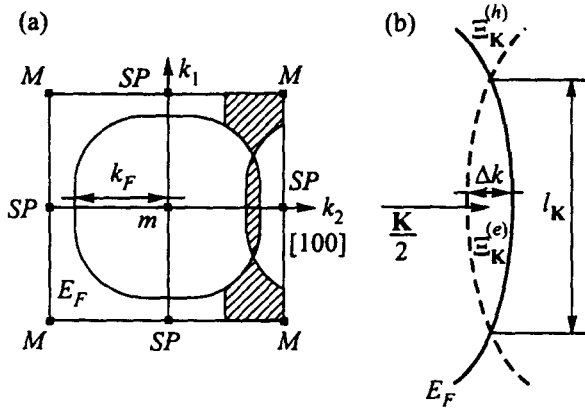


Рис.1. Контур Ферми (E_F), типичный для ВТСП купратов с дырочным допированием. 2D зона Бриллюэна центрирована на точку (π, π) , в которой расположен минимум дырочной зоны (m); максимум зоны обозначен M , седловые точки – SP . Область Ξ_K , соответствующая вектору $K < 2k_F$ вдоль направления нестинга $[100]$, заштрихована (а) и показана отдельно (b), где выделены ее составляющие $\Xi_K^{(e)}$ и $\Xi_K^{(h)}$, соответствующие возбуждениям электронного и дырочного типов, соответственно

этом случае область Ξ_K состоит из двух частей: внутренней ($\Xi_K^{(e)}$), соответствующей парам электронов, и внешней ($\Xi_K^{(h)}$), отвечающей дырочным парам, как это показано на рис.1b (если $K > 2k_F$, то вся область Ξ_K соответствует возбуждениям дырочного типа). Из-за специфических особенностей электронного спектра ВТСП купратов в окрестности седловой точки (flat-band extended saddle point, [1]) область с гиперболической метрикой составляет значительную часть 2D зоны Бриллюэна. Повышение уровня дырочного допирования приближает контур Ферми к седловым точкам, тогда как при электронном типе допирования (концентрация дырок ниже половинного заполнения) увеличение концентрации электронов, напротив, приводит к тому, что контур Ферми удаляется от седловых точек. Это обстоятельство (и связанная с ним асимметрия в определении $\Xi_K^{(e)}$ и $\Xi_K^{(h)}$) может быть одной из причин электрон-дырочной асимметрии, наблюдаемой в ВТСП купратах [1].

Для качественного исследования корреляционных эффектов, которые могут быть причиной возникновения связанных состояний пар квазичастиц, можно воспользоваться приближением эффективной массы, записав эквивалентный гамильтониан относительного движения пары в виде [2]

$$\hat{H}_K = \frac{\hbar^2}{2m}(\nu k_1^2 - k_2^2) + \Xi_K a^2 \cdot \tilde{U}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2). \quad (1)$$

Здесь энергия пары отсчитывается от значения $2\varepsilon(K/2)$, m – параметр размерности массы, безразмерный коэффициент $\nu \ll 1$, характеризующий степень анизотропии закона дисперсии вблизи точки $K/2$ и в среднем учитывающий отклонения изоэнергетических линий в пределах области Ξ_K от направления идеального нестинга, может быть оценен как $\nu \approx (\Delta k/l_K)^2$, где l_K и Δk – длина и ширина области $\Xi_K^{(e)}$ (рис.1). Таким образом, эффективная масса дырки вдоль направления вектора K (ось k_2) отрицательна, тогда как в перпендикулярном K направлении (ось k_1) она положительна и, благодаря нестингу, велика.

Все собственные функции гамильтониана (1) принадлежат сплошному спектру, поэтому естественно искать их в виде суммы падающей волны с квазиимпульсом \mathbf{q} и рассеянной волны $\tilde{\chi}_{K\mathbf{q}}(\mathbf{k})$, которая является решением интегрального уравнения [5]

$$\frac{\hbar^2}{2m}(\omega - k^2)\tilde{\chi}_{K\mathbf{q}}(\mathbf{k}) = \Xi_K a^2 \cdot \tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) + \int_{(\Xi_K)} \Xi_K a^2 \cdot \tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\tilde{\chi}_{K\mathbf{q}}(\mathbf{k}') \frac{d^2 k'}{(2\pi)^2}. \quad (2)$$

Здесь $\omega = q^2$, $k^2 = \nu k_1^2 - k_2^2$. Вестокковому состоянию отвечает линейная комбинация подобных волновых функций с кристаллографически эквивалентными векторами \mathbf{K} , преобразующиеся по одному из неприводимых представлений группы симметрии кристалла [2]. Отметим, что (2) в точности совпадает с уравнением для t -матрицы, рассмотренным в [6] в связи с проблемой неустойчивости нормального состояния по отношению к образованию связанных состояний электронных пар. Поскольку интегрирование в (2) производится по области $\Xi_{\mathbf{K}}$, которая мала по сравнению с зоной Бриллюэна, интегральный член можно оценить, положив $\tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \approx \tilde{U}(0)$. В этом случае решение уравнения (2) принимает вид [2]

$$\tilde{\chi}_{\mathbf{K}q}(\mathbf{k}) = \frac{-w_{\mathbf{K}}}{1 + w_{\mathbf{K}} B_{\mathbf{K}}(\omega)} \frac{1}{k^2 - \omega - i0 \cdot \text{sgn}\omega}, \quad (3)$$

где $w_{\mathbf{K}} = (4\pi/k_0 a^*) \cdot \Xi_{\mathbf{K}} a^2$, $a^* = \hbar^2/m\epsilon^2$, а знаковая функция обеспечивает необходимое условие, чтобы (3) соответствовала расходящейся волне. Функция $B_{\mathbf{K}}(\omega)$ определяется как

$$B_{\mathbf{K}}(\omega) = \int_{(\Xi_{\mathbf{K}})} \frac{1}{k^2 - \omega - i0 \cdot \text{sgn}\omega} \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \equiv B_{\mathbf{K}1}(\omega) + iB_{\mathbf{K}2}(\omega). \quad (4)$$

При вещественных значениях ω функции $B_{\mathbf{K}1}(\omega)$ и $B_{\mathbf{K}2}(\omega)$ записываются как

$$B_{\mathbf{K}1}(\omega) = p.v. \int_{(\Xi_{\mathbf{K}})} \frac{1}{k^2 - \omega} \frac{d^2 k}{(2\pi)^2}, \quad B_{\mathbf{K}2}(\omega) = \pi \int_{(\Xi_{\mathbf{K}})} \delta(k^2 - \omega) \frac{d^2 k}{(2\pi)^2}. \quad (5)$$

Если предположить, что $\omega = \omega_{\mathbf{K}}^{(0)} - i\Gamma_{\mathbf{K}}$ есть решение уравнения $1 + w_{\mathbf{K}} B_{\mathbf{K}}(\omega) = 0$, и что $\Gamma_{\mathbf{K}} \ll \omega_{\mathbf{K}}^{(0)}$, то при $\Gamma_{\mathbf{K}} > 0$ величину $\omega_{\mathbf{K}}^{(0)}$ можно рассматривать [7] как энергию квазистационарного состояния (КСС), которая является решением уравнения

$$1 + w_{\mathbf{K}} B_{\mathbf{K}1}(\omega) = 0. \quad (6)$$

Затухание КСС имеет вид $\Gamma_{\mathbf{K}} = w_{\mathbf{K}} B_{\mathbf{K}2}(\omega_{\mathbf{K}}^{(0)})/B'_{\mathbf{K}1}(\omega_{\mathbf{K}}^{(0)})$, где $B'_{\mathbf{K}1} \equiv dB_{\mathbf{K}1}/d\omega$.

Полагая приближенно, что $\Xi_{\mathbf{K}}$ есть прямоугольная полоса длиной $l_{\mathbf{K}}$ вдоль оси k_1 и шириной Δk вдоль k_2 , для $B_{\mathbf{K}2}(\omega)$ находим

$$B_{\mathbf{K}2}(\omega) = \frac{1}{2\pi\sqrt{\nu}} \ln \left| \frac{\sqrt{\omega_*} + \sqrt{\omega_* + \omega}}{\sqrt{\omega_*} - \sqrt{\omega_* + \omega}} \right|, \quad -\omega_{-1} \leq \omega \leq \omega_1, \quad (7)$$

где $\omega_* = \max\{-\omega; 0\}$, $\omega^* = \min\{\omega_1 - \omega; \omega_{-1}\}$, $\omega_{-1} = (\Delta k/2)^2$, $\omega_1 = \nu l_{\mathbf{K}}^2/4$; с учетом соотношения $\nu \approx (\Delta k/l_{\mathbf{K}})^2$ имеем $\omega_{-1} = \omega_1$. $B_{\mathbf{K}2}(\omega) = 0$ при $\omega \leq -\omega_{-1}$ и $\omega \geq \omega_1$. График функции (7) представлен на рис.2.

Функция $B_{\mathbf{K}1}(\omega)$ в том же приближении определяется интегралом

$$B_{\mathbf{K}1}(\omega) = \frac{-\text{sgn}\omega}{2\pi\sqrt{\nu}} \int_0^{\omega_1^{1/2}} \ln \left| \frac{\omega_1^{1/2} + (k + \omega \text{sgn}\omega)^{1/2}}{\omega_1^{1/2} - (k + \omega \text{sgn}\omega)^{1/2}} \right| \frac{dk}{(k^2 + \omega \text{sgn}\omega)^{1/2}}, \quad (8)$$

для которого неизвестно выражение через табулированные специальные функции. График функции (8) схематически представлен на рис.2. В точках $\omega = \pm\omega_1$ функция

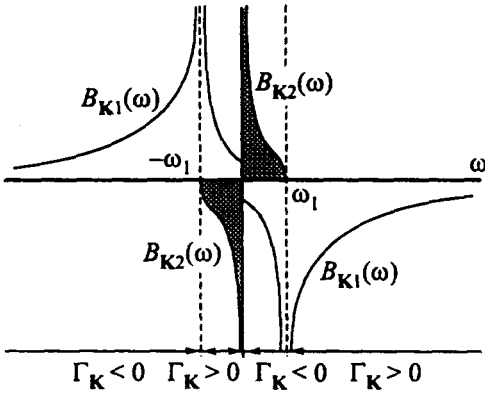


Рис.2. Графики функций $B_{K1}(\omega)$ и $B_{K2}(\omega)$ (заштриховано)

$B_{K1}(\omega)$ имеет логарифмические особенности, а при $\omega = 0$ – разрыв первого рода. При $\nu \ll 1$ имеем $B_{K1}(+0) \approx -1/4\sqrt{\nu}$ и $B_{K1}(-0) \approx 1/\pi^2\sqrt{\nu}$. Асимптотическое при $|\omega| \rightarrow \infty$ поведение (8) имеет вид $B_{K1}(\omega) \sim -\Xi_K/4\pi^2\omega$. Поскольку $B_{K1}(\omega) = 0$ при $\Delta k = 0$, квазиимпульс пары K определенно не может быть равен $2k_F$.

Следует отметить, что в куперовском канале спаривания ($K = 0$) энергия относительного движения пары при малых Δk вообще нечувствительна к знакам эффективных масс: линейное по $k - k_F$ приближение оказывается вполне достаточным, так что энергия пары определяется не эффективными массами, а скоростью квазичастицы ν_F на контуре Ферми. Функция $B_{K1}(\omega)$ для куперовского канала имеет вид

$$B_{K1}(\omega) = \frac{1}{8\pi} \ln \left| \frac{\omega_c - \omega}{\omega_c + \omega} \right|, \quad (9)$$

где $\omega_c = 2k_F \cdot \Delta k$, роль области Ξ_0 в этом случае играет полоса шириной Δk , прилегающая ко всему замкнутому контуру Ферми независимо от его формы (для простоты в (9) рассмотрен контур Ферми в виде окружности). В теории БКШ [8] ω_c фактически играет роль параметра обрезания, поскольку ширина полосы Δk , в которой состояниям с противоположными квазиимпульсами отвечает эффективное притяжение, определяется из условия, что разность энергий $\epsilon(k_F + \Delta k) - \epsilon(k_F)$ по порядку величины равна характерной фононной энергии. При отличном от нуля квазиимпульсе пары куперовский канал подавляется за счет резкого уменьшения площади соответствующей области Ξ_K : эффект Купера оказывается невозможным при $\hbar K \geq \Delta_0/\nu_F$, где Δ_0 – величина сверхпроводящей щели при $K = 0$ [9]. Обменное поле, существующее в слабом ферромагнетике, раздвигает поверхности Ферми для электронов с противоположно ориентированными спинами, что приводит к возможности спаривания при $K \neq 0$ [10, 11]. Такое спаривание оказывается энергетически выгодным, если поверхности Ферми раздвигаются на величину порядка сверхпроводящей щели в соответствующем неферромагнитном сверхпроводнике; величина квазиимпульса возникающих пар составляет примерно $\Delta_0/\nu_F \ll \hbar k_F$.

В случае спаривания при $K \approx 2k_F$ затухание Γ_K положительно при $-\omega_{-1} \leq \omega < 0$ и при $\omega \geq \omega_1$. Поэтому, если решение уравнения (6) попадает в один из этих интервалов энергии (в первый – если преобладающим взаимодействием между дырками является притяжение, когда $\omega_K < 0$; во второй – при отталкивании, когда $\omega_K > 0$), то оно соответствует КСС. При $\omega \geq \omega_1$ КСС обладает достаточно большим време-

нем жизни и поэтому может рассматриваться как особое элементарное возбуждение электронной подсистемы кристалла. Энергиям $\omega < -\omega_{-1}$ и $0 < \omega < \omega_1$ соответствуют $\Gamma_K < 0$, что может явиться свидетельством неустойчивости электронной подсистемы по отношению к образованию конденсата пар; при этом положение полюса амплитуды рассеяния непосредственно связано с параметром энергетической щели [9]. Уравнение (6) имеет, вообще говоря, два решения, как при $w_K < 0$, так и при $w_K > 0$, как это видно из рис.2. В первом случае, как и при куперовском спаривании, неустойчивое решение ($\Gamma_K < 0$) имеет место при любой интенсивности взаимодействия, и этому решению соответствует большее по абсолютной величине значение энергии. Решение в виде КСС возникает лишь при относительно слабом взаимодействии, когда $|w_K^{-1}| > B_{K1}(-0)$; это решение характеризуется достаточно большим затуханием. Поэтому в случае притяжения между квазичастицами конденсация пар должна происходить, минуя стадию образования КСС. Напротив, в случае отталкивания устойчивое решение в виде КСС с малым затуханием [2] имеет место при любых $w_K > 0$, и лишь начиная с некоторого значения интенсивности взаимодействия (и по мере ее уменьшения, когда $w_K^{-1} > |B_{K1}(+0)|$) возникает неустойчивое решение. При этом соответствующая энергия оказывается меньшей по сравнению с энергией долгоживущего КСС, что допускает возможность одновременного существования конденсата и КСС пар квазичастиц. Необходимо отметить, что интервал энергий $(-\omega_{-1}, \omega_1)$ принадлежит сплошному спектру, поэтому решение с $\Gamma_K < 0$ при $0 < \omega < \omega_1$ должно приводить к перестройке состояний сплошного спектра и, соответственно, к понижению энергии электронной системы благодаря именно уменьшению кинетической энергии [12], а не за счет знака энергии взаимодействия, как в теории БКШ.

Возможность сосуществования КСС и конденсата пар квазичастиц качественно согласуется с известной фазовой диаграммой ВТСП купратов (рис.3) при условии, что как конденсат, так и КСС определяются одним и тем же взаимодействием отталкивания. Действительно, $w_K^{-1}(p)$ есть возрастающая функция концентрации

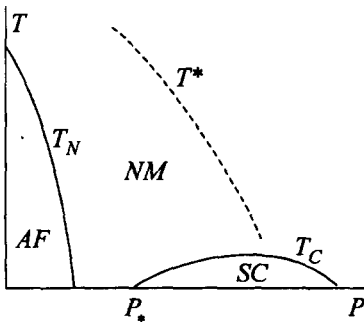


Рис.3. Типичная фазовая диаграмма ВТСП купратов с дырочным допированием (схематически). AF – область антиферромагнитного упорядочения (T_N – температура Неля); SC – область сверхпроводящей фазы (T_C – температура перехода из нормального в сверхпроводящее состояние); NM – область, соответствующая нормальному металлу (T^* – температура возникновения псевдощели); p – концентрация дырок (уровень допирования)

дырок, так как $w_K^{-1} \sim k_0 \sim g_F^{1/2}$, а 2D плотность состояний в окрестности седловой точки имеет логарифмическую особенность. Поэтому $g_F \sim \ln(\omega_0/|\omega_{SP} - \omega_F|)$, где ω_F – энергия Ферми, ω_{SP} – энергия дырки в седловой точке, ω_0 – параметр обрезания. По мере роста уровня допирования разность $\omega_{SP} - \omega_F$ уменьшается, что и приводит к росту w_K^{-1} с увеличением концентрации.

Пусть вплоть до некоторой концентрации p_* , определяемой из условия $1 + w_K(p_*) \times B_{K1}(+0) = 0$, имеется лишь решение в виде КСС. Возникновение каждого

КСС выводит из игры пару дырок, приводя к понижению плотности состояний, что может быть интерпретировано как появление псевдощели в спектре одночастичных возбуждений [2]. Энергия КСС может рассматриваться как характерный масштаб ширины псевдощели. При $p > p_*$ и $T = 0$ имеет место сосуществование КСС и конденсата дырочных пар (рис.3). Из рис.2 видно, что с ростом концентрации дырок оба решения уравнения (5), устойчивое и неустойчивое, сближаются, становясь, в конце концов, логарифмически близкими. Фактически это означает совпадение характерных масштабов, определяющих псевдощель и сверхпроводящую щель. Таким образом, в *underdoped* режиме имеет место сосуществование конденсата и КСС пар квазичастиц, тогда как при переходе в сверхпроводящее состояние в *overdoped* режиме возникновение пары сопровождается немедленным выпадением ее в конденсат.

Экспериментальные данные [13–15] свидетельствуют о том, что между сверхпроводящей щелью и псевдощелью в *underdoped* ВТСП купратах имеется несомненная связь: они имеют одну и ту же симметрию, один и тот же масштаб энергий и для различных купратов обнаруживают универсальную зависимость от уровня допирования. Эти особенности ВТСП купратов с дырочным допированием интерпретируются [13] так, что энергетический масштаб сверхпроводящей щели и псевдощели есть как раз тот самый масштаб, который лежит в основе спаривающего взаимодействия. Таким взаимодействием может быть *прямое кулоновское отталкивание дырок с гиперболическим законом дисперсии* [2].

Один из авторов (К.Ю.В.) выражает благодарность за поддержку Федеративной программе “Интеграция” (проекты # А0133 и А0155).

-
1. Z.-X.Shen, W.E.Spicer, D.M.King et al., Science **267**, 343 (1995).
 2. В.И.Белявский, В.В.Капаев, Ю.В.Капаев, ЖЭТФ **118**, 941 (2000).
 3. Е.Ф.Гросс, В.И.Перель, Р.И.Шехмаметьев, Письма в ЖЭТФ **13**, 320 (1971).
 4. В.И.Белявский, Ю.В.Капаев, С.В.Шевцов, А.Н.Заварзин, ЖЭТФ **109**, 2179 (1996).
 5. Дж.Шриффер, Теория сверхпроводимости, М.: “Наука”, 1970.
 6. А.И.Базь, Я.Б.Зельдович, А.М.Переломов, Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике, М.: “Наука”, 1971.
 7. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц, Квантовая механика. Нерелятивистская теория, М.: “Наука”, 1989.
 8. J.Bardeen, L.Cooper, and J.Schrieffer, Phys. Rev. **108**, 1175 (1957); перев. в сб. “Теория сверхпроводимости” под ред. Н.Н.Боголюбова, М.: ИЛ, 1960.
 9. А.Абрикосов, Л.П.Горьков, И.Е.Дзялошинский, Методы квантовой теории поля в статистической физике, М.: ГИФМЛ, 1962.
 10. А.И.Ларкин, Ю.Н.Овчинников, ЖЭТФ **47**, 1136 (1964).
 11. P.Fulde and R.A.Ferrell, Phys. Rev. **A135**, 550 (1964).
 12. M.R.Norman, M.Randeria, B.Janko, and J.C.Campuzano, Phys. Rev. **B61**, 14742 (2000).
 13. G.V.M.Williams, J.L.Tallon, E.M.Haines et al., Phys. Rev. Lett. **78**, 721 (1997).
 14. M.R.Norman, H.Ding, M.Randeria et al., Nature **392**, 157 (1998).
 15. M.Opel, R.Nemetschek, C.Hoffmann et al., Phys. Rev. **B61**, 9752 (2000).