

ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫЕ СВЕРХПРОВОДНИКИ КАК ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ

В.В.Капаев, Ю.В.Капаев¹⁾

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

Поступила в редакцию 29 июня 1998 г.

Для описания электронных состояний купратных высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) использован метод огибающей волновой функции, в котором 2D электронные состояния слоев CuO_2 элементарной ячейки играют роль квантовых ям, а 2D состояния резервуара – роль квантовых барьеров. Из-за различной анизотропии 2D эффективных масс ям и барьеров часть состояний на поверхности (линии) Ферми принадлежит слоям CuO_2 , а часть – слоям резервуара. Это поведение электронных состояний объясняет такие особенности ВТСП, как существование на поверхности Ферми областей с сильно различающимися временами релаксации, слабое подавление немагнитным рассеянием d -типа сверхпроводящего спаривания, совпадение угловой зависимости сверхпроводящего параметра порядка с угловой зависимостью плотности электронных состояний (преимущественное рассеяние вперед). Изменение знаков компонент эффективных масс вдоль поверхности Ферми может приводить к образованию пар дырок (бихол) или электронов (бизэлектрон) за счет кулоновского взаимодействия при отрицательной приведенной массе пар.

PACS: 71.50.+t, 73.20.Dx, 78.55.Cr

Для описания электронных состояний полупроводниковых гетероструктур, например, квантовых ям и систем из них, широко используется метод огибающей волновой функции. В этом методе волновая функция гетероструктуры в каждом слое разлагается по электронным функциям соответствующего слоя, а для зависящих от нормальной к слоям координаты коэффициентов разложения (огибающей) решается уравнение Шредингера, в котором оператор кинетической энергии содержит эффективную массу соответствующего слоя, а роль потенциальной энергии играет разница в законах дисперсии продольного (вдоль слоев) движения электронов в материалах соседних слоев. Этот метод дает хорошее количественное согласие с экспериментом даже в случае очень тонких (несколько атомных слоев) квантовых ям и барьеров.

Несомненно, этот метод является основным для описания искусственных гетероструктур на основе высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) [1]. Однако и сами по себе ВТСП можно рассматривать как гетероструктуры [1]. Дело в том, что согласно общепринятой точке зрения на купратные ВТСП, проводимость и сверхпроводимость в них определяются свойствами отдельных слоев CuO_2 (LaSrCuO), двойных слоев CuO_2 , разделенных слоем атомов Y (YBaCuO), тройных слоев CuO_2 , разделенных слоями атомов Ca (BiSrCaCuO). Таким образом, эти слои играют роль квантовых ям. Соответствующие же слои LaO , BaO , BiO играют роль резервуаров (барьеров), при легировании которых, например атомами стронция в LaSrCuO , атомами кислорода в YBaCuO или BiSrCaCuO , носители (дырки) поступают в слои CuO_2 . Аналогичная ситуация имеет место в полупроводниковых гетероструктурах при легировании барьеров.

¹⁾ e-mail: kopaev@sci.lebedev.ru

Использование метода огибающей достаточно обоснованно для ВТСП с тремя и более слоями CuO_2 (пять и более атомных слоев) в элементарной ячейке, хотя качественно (а может быть и количественно) основные результаты настоящей работы будут справедливы и для одного и двух слоев CuO_2 . Учет вместо метода огибающей перескоков носителей между слоями CuO_2 и слоями резервуара в рамках зонных расчетов, кроме технических трудностей из-за большой элементарной ячейки, является также небезупречным из-за того, что длина когерентности в направлении оси c , перпендикулярном слоям, оказывается меньше размера элементарной ячейки в этом направлении. Более существенным возражением против такого подхода является тот факт, что в плоскостях CuO_2 принципиальна роль межэлектронных корреляций, приводящих к антиферромагнитному упорядочению. В методе огибающей эти коррелированные состояния можно выбрать вместо блоховских зонных (что и реализовано ниже). В качестве первого приближения к методу огибающей следует отметить работу [2], в которой в методе туннельного гамильтониана учтена гибридизация законов дисперсии, полученных для изолированных слоев.

Ниже закон дисперсии для систем с двумя и тремя слоями CuO_2 в элементарной ячейке выбирается таким же, как и для систем с одним слоем CuO_2 . Это обосновано, во-первых, тем, что сам по себе интеграл перескока между слоями CuO_2 , разделенными слоем, например, атомов Y или Ca , меньше, чем интегралы перескока между ближайшими соседями в слое CuO_2 ; во-вторых, учет межэлектронных корреляций в слое CuO_2 приводит к резкому подавлению интеграла перескока между соседними слоями и восстановлению спектра перенормированных квазичастиц многослойной по CuO_2 структуры к подобному спектру блоховских носителей для изолированного слоя [3].

Отличительной особенностью кристаллической структуры купратных ВТСП является факт, что интегралы перескока между ближайшими соседями в слоях CuO_2 происходят вдоль ребер квадрата, а в слоях резервуара – вдоль диагоналей. Поэтому изоэнергетические линии вблизи соответствующих половинных заполнений представляют из себя развернутые друг относительно друга на 45 градусов квадраты. Законы дисперсии в слое CuO_2 (ε_w) и в слое резервуара (ε_b) в приближении ближайших соседей можно представить в виде

$$\varepsilon_w(k) = \frac{\Delta_w}{4} [2 - \cos(k_x a) - \cos(k_y a)],$$

$$\varepsilon_b(k) = U_0 + \frac{\Delta_b}{2} [1 - \cos(k_x a) \cos(k_y a)],$$

где $k = (k_x, k_y)$ – волновой вектор в плоскости слоев, $\Delta_{w,b}$ – ширины зон в слое CuO_2 (яма) и в слое резервуара (барьер) соответственно, U_0 – высота барьера при $k = 0$. Таким образом, имеет место существенное отличие в анизотропиях эффективных масс для слоев CuO_2 и резервуара. Поэтому при небольшой разнице U_0 в положениях соответствующих зон при $k = 0$ (что выбирается ниже в качестве подгоночного параметра, величина которого, кроме разницы атомных уровней слоев, существенно зависит от разницы межэлектронных корреляций в этих слоях) потенциальная энергия, пропорциональная разности в кинетических энергиях вдоль слоев, может изменять знак вдоль изоэнергетической линии. В результате вблизи половинного заполнения часть состояний на поверхности Ферми будет соответствовать состоя-

ниям, преимущественно локализованным в слое CuO_2 , а часть – локализованным в области резервуара (трансформация состояний). Этот качественный вывод не зависит от способа описания таких состояний. Разница в анизотропии эффективных масс разных слоев сохраняется и при учете перескоков на ближайшие соседи. Для полупроводниковых гетероструктур этот результат был получен в работе [4]. Поскольку для купратных ВТСП обсуждается возможность как когерентного, так и некогерентного движения вдоль оси c [5], то рассмотрим отдельно оба случая.

Для некогерентного случая в пренебрежении межэлектронными корреляциями (что справедливо для передопированных (overdoped) систем) для нахождения изоэнергетических линий достаточно решить задачу об уровнях пространственного квантования в отдельной яме шириной h . В силу различия анизотропии ϵ_w и ϵ_b при некоторых k роль ямы начинает играть слой резервуара. Жирные линии на рис.1 изображают линии такой трансформации: в углах зоны Бриллюэна, ограниченных этими линиями, состояния принадлежат слою резервуара, вне – слою CuO_2 . Кривые 1–7 – изоэнергетические линии. Как видно из рисунка, в области вблизи половинного заполнения ($E \approx 0.5\Delta_w$) часть изоэнергетической линии соответствует состояниям, локализованным в слое CuO_2 , часть – в резервуаре. Форма изолиний слабо зависит от величин U_0 , Δ_w и Δ_b , то есть сделанные выводы носят достаточно общий характер. Пунктиром на рис.1 представлены линии изменения знака компонент эффективной массы m_x и m_y (линии 8 и 9, соответственно): $1/m_{x,y} = \hbar^{-2} \partial^2 E / \partial k_{x,y}^2$. Таким образом, разные участки изоэнергетической линии могут иметь разные знаки компонент эффективной массы. Поэтому возможно образование пары дырок (бихолл) при дырочном легировании или пары электронов (бизлектрон) при электронном легировании за счет кулоновского взаимодействия. Для этого эффективная масса пары, состоящей из состояний с разными знаками масс, должна быть отрицательной. Наблюдаемая "обратная" водородоподобная серия в оптических спектрах BiJ_3 [6] интерпретируется как проявление таких пар, сформированных из частиц с разными энергиями. В нашем же случае пары образуются из состояний на поверхности Ферми и могут принадлежать различным слоям. Существует достаточно широкий интервал по параметрам системы, когда при понижении температуры происходит бозе-конденсация таких пар, приводящая к сверхпроводимости.

На рис.2 изображены угловые зависимости величины $1/v(k) = \hbar / |\nabla_k E|$, пропорциональной плотности состояний. Как видно из рисунка, наряду с особенностью при $\theta = 0$ и 90° слоя CuO_2 при половинном заполнении (особенности ван Хова) появляются дополнительные максимумы вблизи точек трансформации состояний. Такие особенности приводят к образованию двух максимумов на кривой зависимости интегральной плотности состояний от энергии.

Если длина когерентности вдоль оси c существенно больше периода структуры, то возникают характеризующие движение вдоль оси c минизоны как функции волнового вектора k_z . В этом случае в качестве критерия преимущественного нахождения носителей в слое CuO_2 или в резервуаре естественно выбрать отношение вероятностей в яме и барьере: $\eta = W_w/W_b$. Расчеты показывают, что качественный вид изоэнергетических линий при этом такой же, как и в некогерентном случае.

На рис.3 приведены линии $E = 0.5\Delta_w$ при $k_z = 0$ (сплошные линии соответствуют $\eta > 1$, штриховые – $\eta < 1$). Кривые 3,4 представляют изоэнергетические линии более высоких подзон размерного квантования. Отметим, что в рассмотрен-

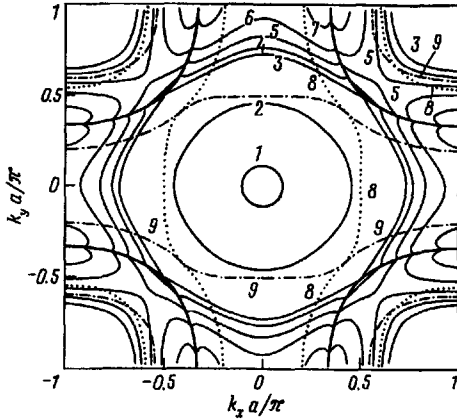


Рис.1. Изоэнергетические линии (1-7) и линии изменения знака эффективной массы ($m_x - 8$, $m_y - 9$) для некогерентного случая в пренебрежении межэлектронными корреляциями при $\hbar\omega = \hbar\delta = 5.8 \text{ \AA}$, $U_0 = 0.5\text{эВ}$, $\Delta_w = 2\text{эВ}$, $\Delta_b = 1\text{эВ}$; значение E/Δ_w для кривых 1-7 равно 0.10, 0.30, 0.50, 0.52, 0.55, 0.58 и 0.62

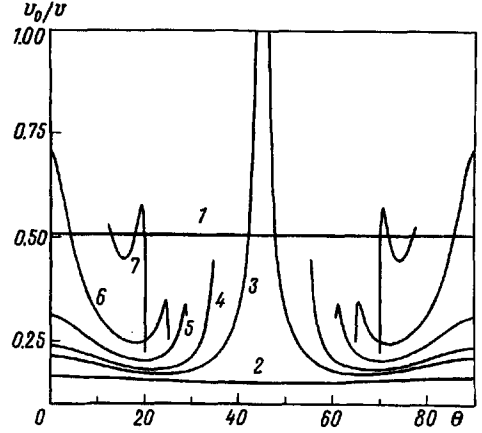


Рис.2. Угловая зависимость плотности состояний. Параметры такие же, как на рис.1, $v_0 = \sqrt{U_0/2\pi^2 m_{zw}}$

ном выше некогерентном случае имеются аналогичные линии (не изображенные на рис.1), соответствующие резонансам в непрерывном спектре. В силу этого, электронные состояния на них имеют существенно меньшее время жизни по сравнению с локализованными состояниями.

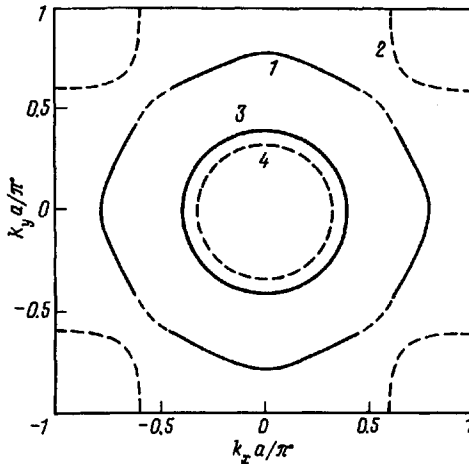


Рис.3. Изоэнергетические линии сверхрешетки для $E = 0.52\Delta_w$ при $k_z = 0$, кривые 1, 2 - первая, 3, 4 - вторая и третья подзоны размерного квантования. Параметры структуры см. подпись к рис.1

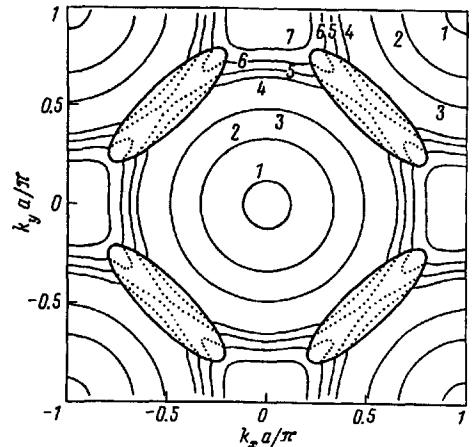


Рис.4. Изоэнергетические линии с учетом диэлектрической щели при $\delta = 0.1\text{эВ}$, $\Delta_b = 0.5\text{эВ}$, $Q = \pi/a(1.1)$, E/Δ_w для кривых 1-7 равно 0.10, 0.20, 0.30, 0.40, 0.42, 0.44 и 0.46, остальные параметры, как на рис.1

Качественно картина не меняется и при включении антиферромагнитного упорядочения в слоях CuO_2 , что имеет место при слабом допировании (underdoped). В этом случае волновые функции и закон дисперсии коррелированного состояния в слое CuO_2 можно записать в виде

$$\psi = u\psi_k + v\psi_{k+Q},$$

$$\varepsilon = \frac{1}{2} \left\{ \varepsilon_w(k) + \varepsilon_w(k+Q) \pm \sqrt{[\varepsilon_w(k) - \varepsilon_w(k+Q)]^2 + 4\delta} \right\},$$

где δ – величина диэлектрической щели, Q – вектор нестинга. На рис.4 представлено семейство изоэнергетических линий для некогерентного случая и нижней подзоны (знак минус в ε). Как и в отсутствие антиферромагнитного упорядочения, в некотором диапазоне энергии происходит трансформация состояний на изоэнергетической линии (сплошные линии соответствуют локализации в слое CuO_2 , пунктирные – в слое резервуара).

В случае оптимального легирования дальний антиферромагнитный порядок отсутствует, но остается существенным ближний порядок, и поведение носителей на поверхности Ферми качественно совпадает со случаем слабого допирования (рис.4).

Описанный выше характер дырочных состояний, когда на части поверхности Ферми носители принадлежат одному слою, а на оставшейся части – другому, позволяет понять ряд особенностей ВТСП. В частности, для объяснения особенности частотной и температурной зависимостей проводимости и эффекта Холла феноменологически вводятся два существенно различающихся времени релаксации на разных участках поверхности Ферми [7]. Если эти участки поверхности Ферми принадлежат разным слоям, естественна разница в интенсивностях рассеяния.

Эксперименты по фотоэмиссии с угловым разрешением в нормальной и сверхпроводящей фазах показывают, что угловая зависимость сверхпроводящей щели d -типа повторяет угловую зависимость плотности состояний в нормальной фазе. Это объясняется тем, что межэлектронное взаимодействие ослабляется с увеличением угла рассеяния – преобладает рассеяние вперед. Тогда значение щели в какой-то точке на поверхности Ферми будет определяться только состояниями в некотором интервале углов около данного состояния (momentum decoupling) [8]. С нашей точки зрения, этот интервал углов определяется областью поверхности Ферми, принадлежащей определенному слою, поскольку выход за этот интервал соответствует рассеянию из одного слоя в другой, и рассеяние мало в меру малости интегралов перекрытия волновых функций между состояниями CuO_2 и резервуара.

Этот же эффект объясняет экспериментальный факт на порядок более слабого по сравнению с теорией подавления d -типа спаривания рассеянием на немагнитных примесях. Если нули d -типа сверхпроводящей щели находятся на части поверхности Ферми, соответствующей слою резервуара, то рассеяние из областей, принадлежащих слоям CuO_2 и имеющих большую величину щели, в область нулей щели, что приводит к распариванию, будет существенно подавлено.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и Российской МНТП "Физика твердотельных наноструктур".

1. I. Bozovic and J.N. Eckstein, in: *Physical Properties of High Temperature Superconductor*, Ed. D.M.Ginsberg, World Scientific, Singapore 1996, vol. V.

2. R. Combescot, Phys. Rev. **B57**, 8632 (1998).
3. M. Sugihara, M. A. Pkeda, and P. Entel, Phys. Rev. **B57**, 11760 (1998).
4. В.В.Капаев, Ю.В.Копаев, Письма в ЖЭТФ **65**, 188 (1997).
5. A. A. Abrikosov, Phys. Rev. **B57**, 7488 (1998).
6. Е.Ф.Гросс, И.Н.Уральцев, Р.И.Шехмаметьев, Письма в ЖЭТФ **13**, 503 (1971).
7. A. Zheleznyak, V. Yakovenko, H. Drew, and I. Mazin, Phys. Rev. **B57**, 3089 (1998).
8. G. Varelogiannis, Phys. Rev. **B57**, R732 (1998).