Письма в ЖЭТФ, том 65, вып.1, стр.71 - 76 © 1997г. 10 января

О ВЛИЯНИИ ВАНХОВСКИХ ОСОБЕННОСТЕЙ НА КРИТИЧЕСКОЕ ПОЛЕ СВЕРХПРОВОДНИКА ВТОРОГО РОДА

Р.О.Зайцев

Российский научный центр "Курчатовский институт"
123182 Москва, Россия

Поступила в редакцию 3 октября 1996 г.
После переработки 28 ноября 1996 г.

Изучаются свойства двумерной модели Хаббарда с сильным отталкиванием при условии проходжения поверхности Ферми через точки осбенностей Ван-Хова. Вычислено верхнее критическое поле в условиях отсутствия эффектов релаксации.

PACS: 74.20.-z, 74.25.Ha, 74.60.Ec

Эксперимент показывает, что температура сверхпроводящего перехода T_c существенным образом зависит от положения уровня Ферми, проходящего внутри зоны Бриллюэна. В рамках обобщенной модели Хаббарда–Эмери–Хирша исчезновение и появление куперовской неустойчивости для определенных значений энергии Ферми объясняется возможностью изменения знака амплитуды электрон- электронного рассеяния сразу на всей поверхности Ферми. В работах автора [1, 2] не ставилась задача нахожения температуры перехода. Фактически рассмотрение велось при $T = 0$, что сводилось к обнаружению куперовской неустойчивости для критической концентрации электронов или дырок, соответствующей условию изменения знака амплитуды рассеяния.

В настоящей работе изучается случай промежуточных концентраций, для которых амплитуда рассеяния имеет отрицательный знак. Для нахождения максимально возможного критического поля используется предположение о том, что именно в этой области поверхность Ферми пересекает особые точки ван-ховских сингулярностей. Машинные расчеты [3] для модели Хаббарда с сильным отталкиванием подтверждают такую возможность.

Рассмотрим двумерную электронную систему со следующим спектром:

$$\xi_{\mathbf{p}} = -2|t|(\cos\alpha + \cos\beta) - \mu. \tag{1}$$

Здесь $2|t|$ – удвоенный эффективный интеграл перескока, который ниже считается равным единице; α, β – безразмерные квазиимпульсы; μ– химический потенциал.

Предположим сначала, что поле отсутствует и $T = 0$. Тогда при заданном значении амплитуды рассеяния – g уравнение для определения величины энергетической щели Δ_0 имеет следующий вид:

$$2 = \sum_{\mathbf{p}} \frac{g}{\sqrt{\Delta_0^2 + \xi_{\mathbf{p}}^2}}. \tag{2}$$

При нулевом значении химического потенциала μ это соотношение может быть преобразовано к следующему виду [4]:

$$\pi = g \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{d\epsilon dy cos(\epsilon y) J_0^2(y)}{\sqrt{\Delta_0^2 + \epsilon^2}} = g \int_0^\infty dy K_0(\Delta_0 y) J_0^2(y). \tag{3}$$

Здесь $J_0(y)$ и $K_0(y)$ - функции Бесселя и Макдональда.

Окончательный результат определяет неявную зависимость безразмерной энергетической щели $\tilde{\Delta}_0 = \Delta_0/2|t|$ от безразмерной константы $\Lambda = g/2\pi^2|t|$.

$$\Lambda^{-1} = 2q_\delta K^2(q_\delta), \tag{4}$$

где $q_\delta = 2/(\sqrt{4+\Delta_0^2} + \Delta_0)$, $K(q)$– полный эллиптический интеграл I рода.

В асимптотической области $\Lambda \ll 1$ имеем:

$$\Delta_0 = 32|t|\exp(-\sqrt{2/\Lambda}), \tag{5}$$

Для нахождения термодинамического критического поля используем общее соотношение, относящееся к вариации Ω–потенциала:

$$\frac{\partial\Omega}{\partial g} = -\frac{\Delta^2}{g^2}. \tag{6}$$

Здесь Ω есть поправка к Ω-потенциалу, отнесенному к одной ячейке.

Переходя к вариации по величине $1/\Lambda$ с помощью соотношения $\partial g/g^2 = \partial\Lambda/2\pi^2|t|\Lambda^2$, а затем интегрируя (6) в переменных Δ_0 с помощью уравнения (5), находим выражение для поправки к энергии основного состояния, обобщающее соотношение БКШ, на случай логарифмически расходящейся плотности состояний.

$$E_n - E_s = \Delta_0^2 \ln(32|t|\sqrt{e}/\Delta_0)/4\pi^2|t|. \tag{7}$$

Приравнивая это выражение к энергии магнитного поля на одну ячейку $H^2 v_0/8\pi$, находим величину термодинамического критического поля H_{cm}:

$$H_{cm} = \Delta_0\sqrt{2\ln(32|t|\sqrt{e}/\Delta_0)}/a\sqrt{\pi|t|d}, \tag{8}$$

где d и a – размеры элементарной ячейки вдоль и поперек тетрагональной оси изучаемого кристалла.

Таким образом, мы обнаруживаем логарифмическое возрастание термодинамического критического поля по сравнению с теорией БКШ, пропорциональное $(2/\Lambda)^{1/4}$.

Еще большее увеличение можно обнаружить для так называемого верхнего критического поля, соответствующего возникновению сверхпроводящего зародыша. Для вычисления верхнего критического поля H_{c2}, достаточно рассмотреть интегральное уравнение, линеаризованное по волновой функции куперовской пары $\Psi(\mathbf{r})$:

$$\Psi(\mathbf{r}) = g\sum_{\mathbf{r}'} K(\mathbf{r},\mathbf{r}')\Psi(\mathbf{r}'), \tag{9}$$

Как и в уравнении (2), величина g есть обратная по знаку амплитуда рассеяния электронов, вычисленная на поверхности Ферми.

В однородном пространстве ядро $K(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ определяется через свои компоненты Фурье $K(\mathbf{s})$.

$$K(\mathbf{s}) = T\sum_{\omega,\mathbf{p}} G_\omega(\mathbf{p}_+)G_{-\omega}(-\mathbf{p}_-), \tag{10}$$

$$\text{где} \quad G_\omega(\mathbf{p}) = (i\omega - \xi_\mathbf{p})^{-1}, \mathbf{p}_\pm = \mathbf{p} \pm \mathbf{s}/2. \tag{11}$$

Дифференциальная часть уравнений Гинзбурга–Ландау определяется вторым членом разложения ядра $K(\mathbf{s})$ по степеням $\mathbf{s}$.

При понижении температуры происходит уменьшение размера куперовской пары, так что уравнения Гинзбурга–Ландау становятся неприменимыми [5]. При наличии внешнего поля H вместо них необходимо решать интегральное уравнение(9) с ядром (10), в котором произведена замена $s_x \to s_x + eH\hat{y}$. Если в качестве пробной функции использовать собственную функцию уравнения Гинзбурга–Ландау, $\Psi(\mathbf{r}) = \exp(-|e|Hy^2)$, то можно доказать [6], что она является также собственной функцией интегрального оператора (10). После подстановки этой функции и интегрирования по угловым переменным можно получить следующее условие разрешимости:

$$1 = g\sum_{\mathbf{r}} K(0,\mathbf{r})\exp[-|e|H(x^2+y^2)/2c\hbar]. \tag{12}$$

В конечном счете после преобразования Фурье получаем следующее уравнение:

$$2\pi|e|H = g\int\limits_{-\infty}^{+\infty} K(\mathbf{s})\exp[-c\hbar(s_x^2+s_y^2)/2|e|H]ds_x ds_y. \tag{13}$$

где

$$K(\mathbf{s}) = \sum_{\mathbf{p}} \frac{\operatorname{th}\frac{\xi_{\mathbf{p}_+}}{2T} + \operatorname{th}\frac{\xi_{-\mathbf{p}_-}}{2T}}{2[\xi_{\mathbf{p}_+} + \xi_{-\mathbf{p}_-}]}. \tag{14}$$

Полученное ядро интегрального уравнения удобно использовать при $T = 0$. Для трехмерного и изотропного случая явная форма ядра была получена Горьковым [5]. В двумерном случае вместо p_x и p_y естественно ввести две новых переменных: $2u = \xi_{\mathbf{p}_+} + \xi_{\mathbf{p}_-}, 2v = \xi_{\mathbf{p}_+} - \xi_{\mathbf{p}_-}$. Соответствующий якобиан преобразования удается вычислить для двумерного изотропного случая, а также вблизи особых точек Ван-Хова: $A = (0,\pi)$ или $B = (\pi, 0)$, где спектр возбуждений имеет гиперболический характер. $\xi_{\mathbf{p}} \approx p_x^2/2 - \bar{p}_y^2/2$ или $\xi_{\mathbf{p}} \approx -\bar{p}_x^2/2 + p_y^2/2$. $(\bar{p}_{x,y} = \pi + p_{x,y})$. Предполагая также, что величина каждой из компонент суммарного импульса $\mathbf{s}$ мала по сравнению с обратным размером элементарной ячейки, получаем якобиан в следующей форме:

$$Jk_{\mathbf{s}}^{(+)} = \frac{D(u,v)}{D(p_x,\bar{p}_y)}, \qquad Jk_{\mathbf{s}}^{(-)} = \frac{D(u,v)}{D(\bar{p}_x,p_y)},$$

$$Jk_{\mathbf{s}}^{(\pm)} = \sqrt{R^2 \mp 2Ru + v^2}, \quad R = a^2(s_x^2 - s_y^2)/4. \tag{15}$$

Верхний знак относится к точке A, а нижний знак – к точке B Ван-Хова.

Рассмотрим сначала случай $T = 0$. При этом

$$K(\mathbf{s}) = \sum_{\lambda=\pm}\int\int \frac{dudv\Theta(u^2-v^2)}{2\pi^2|u|Jk_{\mathbf{s}}^{(\lambda)}} = \int\limits_0^1 \frac{du}{2\pi^2 u}\ln\left[\frac{(1+2u)}{|1-2u|}\right] + \int\limits_1^{\bar{u}/|R|} \frac{du\ln(4u^2-1)}{2\pi^2 u}. \tag{16}$$

Величина $\bar{u}$, определяющая верхний предел обрезания по энергетической переменной u, с логарифмической точностью совпадает с соответстсвующей энергетической величиной $\bar{\epsilon}$, которая возникает при вычислении энергетической щели Δ_0. Сравнение с соответствующим результатом (5) позволяет считать, что в безразмерных единицах $\bar{u} = 8$, однако это утверждение требует проверки с помощью машинных вычислений.

Выражение (16) необходимо подставить в левую сторону уравнения (12), а затем проинтегрировать по переменным $s_x = \rho\cos\varphi$, $s_y = \rho\sin\varphi$, $4R = a^2\rho^2\cos 2\varphi$. Вычисление интегралов производится независимо по φ и ρ. Окончательные результаты выражаются через логарифимческую функцию от $[\bar{u}c\hbar]/[|e|Ha^2]$, а также через постоянную Эйлера $C = \ln\gamma = 0,5772....$ В результате получаем соотношение, аналогичное уравнению (4):

$$2\Lambda^{-1} = \ln^2\left[4c\hbar\gamma\bar{u}/a^2|e|H\right]. \tag{17}$$

Безразмерная величина $\bar{u}$ должна была бы входить в определение величины Δ_0, поэтому сравнение с асимптотикой уравнения (4) позволяет выразить верхнее критическое поле через величину Δ_0:

$$H_{c2}(0) = c\hbar\gamma\Delta_0/a^2|te|. \tag{18}$$

Этот ответ необходимо сравнить с результатом для сферической модели [5]:

$$H_{c2}(0) = c\gamma e^2\Delta_0^2/8|e|\hbar v_F^2 = \gamma c\hbar\Delta_0^2 d^{2/3}/32|e|t^2a^{8/3}\left(3\pi^2 n\right)^{2/3}, \tag{19}$$

где v_F – скорость Ферми, n – число электронов, приходящихся на одну ячейку.

По порядку величины критическое поле для сферической поверхности Ферми (19) совпадает с критическим полем для двумерной цилиндрической поверхности. Однако критическое поле для гиперболической модели (18) превышает критическое поле (19) в t/Δ_0 раз. Превышает оно и термодинамическое поле (8). По порядку величины $H_{c2}(0)/H_{cm}(0) \simeq (c\hbar/e^2)\sqrt{e^2d/ta^2}\Lambda^{1/4}$, так что если параметр БКШ Λ не мал по сравнению с четвертой степенью от постоянной тонкой структуры, то изучаемую систему следует считать сверхпроводником II рода.

Для нахождения температурной зависмости верхнего критического поля вблизи температуры сверхпроводящего перехода представим ядро интегрального уравнеия в виде суммы по дискретным частотам $\omega = T\pi(2n+1)$, а затем разложим его по степеням суммарного импульса s:

$$K(\mathrm{s}) = T\sum_{\omega} W_\omega(\mathrm{s}), \tag{20}$$

При заданных $|\omega|$ функция $W_\omega(0)$ выражается через полный эллиптический интеграл $K(k)$ с параметром $k_\omega = 2/\sqrt{4+\omega^2}$:

$$W_\omega(0) = \sum_{\mathrm{p}} G_\omega(\mathrm{p})G_{-\omega}(-\mathrm{p}) = \frac{k_\omega K(k_\omega)}{\pi|\omega|}. \tag{21}$$

Просуммированное по частотам выражение (21) может быть представлено в виде разложения по большим логарифмам от обратной температуры:

$$K(0,T) \cong \frac{1}{2\pi^2}\ln^2\left(\frac{32|t|\gamma}{\pi T}\right) \tag{22}$$

Разлагая выражение(22) по степеням близости к температуре сверхпроводящего перехода T_c, находим линейный закон обращения в нуль второго критического поля.

$$H_{c2} = \pi^2 T_c L(T_c - T)/7\zeta(3)|e|a^2t^2, \tag{23}$$

где L – большой температурный логарифм, взятый при $T = T_c$: $L = \ln(32\gamma|t|/\pi T_c) = \sqrt{2/\Lambda}$. Отсюда можно заключить, что вблизи точки перехода критическое поле H_{c2} в $\sqrt{L}$ раз превышает термодинамическое критическое поле. Для нахождения температурного наклона критического поля в области низких температур $T \ll T_c$ необходимо учесть влияние ван-ховских особых точек, которое оказывается существенным в области частот $|\omega| \ll |s|$.

При нулевом значении химического потенциала можно выделить вклад от ван-ховских точек с помощью перехода к переменным u и v и интегрирования с помощью якобиана (15), а затем при $T \ll |t(s_x^2 - s_y^2)a^2|$ использовать асимптотический вид ядра $K(s)$ при $T=0$ (см. (16)):

$$K(s) = \frac{1}{2\pi^2}\ln^2\frac{\bar{u}}{r(s)}, \quad r(s) = |s_x^2 - s_y^2|a^2/4 \tag{24}$$

В целях дальнейшего упрощения вычислений используем следующее интерполяционное описание: для малых $r(s) \ll T$ используем низкотемпературное разложение (22), а для больших $r(s) \gg T$ – приближение (24). Точнее говоря, при интегрировании по переменной $r(s)$ выбирается такая граничная величина r^*, выше которой ядро $K(s)$ определяется согласно (24), в то время как для меньших значений аргумента ядро зависит только от температуры в соответствии с (22). Величину r^* находим из естественного условия совпадения (22) и (24), так что при $r < r^* = \bar{u}\pi T/16\gamma$

$$K(r) = \frac{1}{2\pi^2}\ln^2\frac{\bar{u}}{r^*(T)}, \qquad \text{при } r > r^*, \qquad K(s) = \frac{1}{2\pi^2}\ln^2\frac{\bar{u}}{r(s)}. \tag{25}$$

Вместо переменных $s_{x,y}$ выбираем переменную r, а также $z = a^2(s_x^2 + s_y^2)$. В результате интегральное уравнение (13) приобретает следующую форму:

$$1 = 8g\alpha \int\limits_{r>0} dr K(r) \int\limits_{4r}^{\infty} \frac{dz \exp(-\alpha z)}{\pi\sqrt{z^2 - 16r^2}}.$$

В результате интегрирования по переменной z получим

$$\pi = 8g\alpha \int\limits_0^{r=r^*} K(r=r^*)K_0(4r\alpha)dr + 8g\alpha \int\limits_{r=r^*}^{\infty} K(r>r^*)K_0(4r\alpha)dr.$$

Во втором интеграле удобно перейти к интегрированию в бесконечных пределах, так что в оставшихся интегралах можно будет использовать разложение функции Макдональда при малых x: $K_0(x) \approx \ln(2/\gamma x)$.

Интегрирование в бесконечных пределах приводит к главному слагаемому (17), которое не зависит от температуры. Оставшиеся интегралы по области меньшей r^* пропорциональны первой степени температуры и содержат зависимости от различных логарифмических переменных.

$$2\Lambda^{-1} = \ln^2(8\bar{u}\alpha\gamma) - \frac{2}{\pi}\int\limits_0^{\tau}\left[\ln^2\left(\frac{4\alpha\bar{u}}{x}\right) - \ln^2\left(\frac{4\alpha\bar{u}}{\tau}\right)\right]\ln\left(\frac{2}{\gamma x}\right)dx.$$

Здесь $\alpha = 1/2|e|Ha^2$, $\tau = [\pi T\bar{u}\alpha/4\gamma]$, а величина $\bar{u} = 8$.

В результате интегрирования находим дважды логарифмическую поправку, пропорциональную температуре:

$$2\Lambda^{-1} = \ln^2(8\bar{u}\alpha\gamma) - \frac{4T}{\gamma|e|Ha^2}ln\left(\frac{8e^2}{\bar{u}\pi T\alpha}\right)\ln\left(\frac{16\gamma e}{\pi T}\right), \tag{26}$$

где $\bar{u} = 8$, а удвоенный интеграл перескока $2|t|$, на который обезразмеривается температура, может быть исключен из правой стороны с помощью определения величины энергетической щели (5). Третье уравнение, позволяющее исключить из рассмотрения безразмерную константу БКШ, есть уравнение (17), определяющее максимально возможное критическое поле H_0:

$$2\Lambda^{-1} = \ln^2(4\bar{u}\gamma c\hbar/|e|H_0a^2) = \ln^2(32|t|/\Delta_0) \tag{27}$$

В результате как левая, так и правая стороны уравнения (26) выражаются только через измеряемые величины H_0, Δ_0, H и a^2:

$$2\Lambda^{-1} = \ln^2\left(\frac{4\bar{u}\gamma c\hbar}{|e|H_0a^2}\right) = \ln^2\left(\frac{4\bar{u}\gamma c\hbar}{|e|Ha^2}\right) - \frac{2T}{\gamma^2\Delta_0}\ln\left(\frac{4e^2\Delta_0}{\pi T}\right)\ln\left(\frac{4\gamma\bar{u}\Delta_0 e}{\pi T H_0|e|a^2}\right). \tag{28}$$

Логарифмическое нарастание температурной производной частично компенсируется большим логарифмом L, который, согласно (27), выражается через максимальное критическое поле H_0 : $L = ln(32\gamma c\hbar/a^2|e|H_0)$:

$$-\left.\frac{\partial H}{\partial T}\right|_0 \approx \frac{H_0}{\gamma^2\Delta_0}\ln\left(\frac{4\gamma e\Delta_0}{\pi T}\right)\left[1 + L^{-1}\ln\left(\frac{\Delta_0 e}{\pi T}\right)\right]. \tag{29}$$

Аналогичным образом можно записать температурную производную от (25) при $T \to T_c$

$$-\left.\frac{\partial H}{\partial T}\right|_{T_c} = \left(\frac{32LH_0\gamma}{7\zeta(3)T_c}\right)e^{-L}. \tag{30}$$

Таким образом, при $T \leq T_c$ большой температурный логарифм полностью компенсируется малым отношением температуры сверхпроводящего перехода к величине интеграла перескока, которое, согласно (30), в логарифмических переменных дает экспоненциальную малость.

При понижении температуры абсолютная величина температурной производной возрастает, что, согласно (29), при низкой температуре переходит в логарифмическое температурное возрастание. Таким образом, вся кривая $H_{c2}(T)$ имеет отрицательную кривизну. Дважды логарифмический рост можно наблюдать только в области предельно низких температур, когда $T/T_c \ll |e|H_0a^2/c\hbar \cong 2\cdot 10^{-5}\mathrm{kOe}^{-1}H_0$.

Малая величина наклона (30) при $T \leq T_c$ соответствует обычному чистому сверхпроводнику [5] с энергией Ферми порядка интеграла перескока $|t|$ и эффективной массой порядка $\hbar^2/a^2|t|$.

Работа была выполнена в рамках Госпрограммы ВТСП "Экстенд II" 94011.

---

1. Р.О.Зайцев, Phys. Lett. **A134**, 199 (1988).
2. Р.О.Зайцев, Письма в ЖЭТФ **55**, 141 (1992).
3. E.Dagotto, A.Moreo , D.J.Scalapino et al., Phys. Rev. Lett. **67**, 1918 (1991).
4. А.П.Прудников, Ю.А.Брычков, О.И.Маричев, *Интегралы и ряды. Специальные функции*, М.: Наука, 1983.
5. Л.П.Горьков, ЖЭТФ **37**, 833 (1959).
6. E.Helfand and N.R.Werthamer, Phys. Rev. Lett. **147**, 686 (1964).
7. A.P.Mackenzie, S.R.Jullian, G.G.Lonzarich et al., Phys. Rev. Lett. **71**, 1238 (1993).
8. M.Osofsci, R.J.Soulen, S.A.Wolf et al., Phys.Rev.Lett. **71**, 2315 (1993).