

©1995

О ПРИРОДЕ АНОМАЛЬНОГО ИЗОТОПИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА ДЛЯ T_c В СИСТЕМАХ LSCO:Fe

А.П.Жернов, Т.Н.Кулагина

Российский научный центр «Курчатовский институт»,
123182, Москва, Россия
(Поступила в Редакцию 27 июня 1994 г.
В окончательной редакции 14 апреля 1995 г.)

Рассматривается сверхпроводник с парамагнитными примесями, имеющий острый пик в плотности электронных состояний. Анализируются значения критической температуры T_c и фактора изотопического сдвига в зависимости от положения уровня Ферми относительно центра пика и от концентрации примесей. Обсуждаются экспериментальные результаты для систем $\text{La}_{2-y}\text{Sr}_y\text{Cu}_{1-x}\text{Me}_x\text{O}_4$ ($\text{Me}=\text{Fe}, \text{Zn}$) с оптимальным по стронцию составом.

При изучении влияния кислородного изотопического замещения на температуру сверхпроводящего перехода T_c в системах LSCO было обнаружено, что парциальный фактор изотопического сдвига

$$d_0 = -\frac{\partial \ln T_c}{\partial \ln M_0}$$

(M_0 — масса кислорода) сильно зависит от концентрации y атомов Sr. При этом фактор α_0 изменяется приблизительно в 5–10 раз в концентрационном диапазоне $0.1 \leq y \leq 0.15$. При $y = 0.12$ величина α_0 максимальна и составляет $\sim 0.8 \div 1$ [1–3].

Для объяснения этих экспериментов предложено несколько моделей. В их число, во-первых, входит модель, основанная на концепции мягкой ангармонической моды (связанной или с низкочастотными ротационными модами, которые сопутствуют структурному переходу [4], или с проявлением сильного локального ангармонизма в колебаниях апикальных атомов кислорода [5]). Во-вторых, рассмотрены модели с острым пиком в плотности электронных состояний. При этом в [6] предполагалось, что вследствие легирования стронцием меняется число носителей и одновременно смещается уровень Ферми. Относительно других работ см. обзоры [7,8].

В [3] изучался также изотопический эффект по кислороду в LSCO:M с оптимальным составом по Sr ($y = 0.15$) и с примесями Fe, Co, Ni и Zn, которые замещают атомы Cu. Концентрация примесей x не превышала нескольких процентов. Было обнаружено, что во всех случаях

значения критической температуры T_c существенным образом падают, а соответствующие величины α_0 растут при увеличении концентрации дефектов x . Эти экспериментальные данные для систем LSCO:M, а также аналогичные данные для систем YBCO:M [9] объяснены в [10] как результат появления в обеих системах эффективных парамагнитных дефектов.

Для систем LSCO:M ($y = 0.15$) с разными примесями наряду с общими чертами поведения T_c и α_0 характерны и специфические существенные отличия, а именно в случае $M = \text{Zn}, \text{Ni}$ поведение T_c и α_0 в зависимости от концентрации x описывается согласно теории Абрикосова-Горькова [11] (см. также [12,13]) в однопараметрическом приближении. Данные же в случае $M = \text{Fe}, \text{Co}$ в простую схему не укладываются. Заметим, что при легировании Fe изменения α_0 оказались очень выраженными: величина α_0 меняется от 0.1 до 1.3.

Причины, обуславливающие различия в поведении T_c и α_0 систем LSCO с примесями Fe, Co и Ni, Zn, в литературе ранее не обсуждались. В данной работе предлагается модель, которая позволяет качественно объяснить причину аномально большого изотопического эффекта для случая примесей Fe (Co) и сравнительно слабого эффекта для случая примесей Zn (Ni). Мы основываемся на фоновном механизме и идеях работ [6], [10]. Предполагается существование острого пика в плотности электронных состояний. Одновременно примеси в медь-позициях и их ближайшее окружение рассматриваются как эффективные парамагнитные дефекты. При этом считается, что трехвалентная примесь Fe в отличие от двухвалентной примеси Zn меняет число носителей и смещает положение уровня Ферми относительно центра пика.

1. Модель квазидвумерного сверхпроводника

Рассмотрение электронного спектра в сверхпроводниках с плоскостями типа CuO_2 обычно проводится в рамках приближения сильной связи. При этом учитывают электронные «перескоки» в плоскости между двумя ближайшими узлами. Кроме того, принимают во внимание переходы между плоскостями. Пусть эти элементарные процессы характеризуются параметрами t_{p1} , t'_{p1} и t_z . Тогда плотность электронных состояний представляется как

$$N(E) = \sum_{k_x} N^{2d}(E + 2t_z \cos(k_z C)),$$

$$N^{2d}(E) = \frac{2}{\pi^2 t_{p1}} \left[1 - \left(\frac{2t'_{p1}}{t_{p1}} \right)^2 \right]^{-1/2} K \left[\left(\frac{1 - \left(\frac{E}{4t_{p1}} + \frac{t'_{p1}}{t_{p1}} \right)^2}{1 - E \frac{t'_{p1}}{t_{p1}^2}} \right)^{1/2} \right]. \quad (1)$$

Здесь N^{2d} — плотность состояний двумерной системы, K — полный эллиптический интеграл в нормальной форме (см. детали в [14]).

Плотность состояний (1) обладает сингулярностью ван Хова логарифмического типа, т.е.

$$N(E) = \overset{\circ}{N} \ln \left| \frac{E_R}{E - E_R} \right|.$$

Из-за межплоскостных переходов сингулярность размывается. Обычно полагают, что уровень Ферми расположен в окрестности особой точки.

Поясним сказанное. Электронный спектр симметричен относительно точки сингулярности $E = E_R$. При малых значениях интеграла перескопов t_z сингулярность в спектре «срезается» и трансформируется в плато. Например, если $t_z = 0.01t_{p1}$, то ширина плато составляет около 100 К. Предполагают, что уровень Ферми лежит вблизи плато.

Помимо межплоскостных переходов также нужно учитывать наличие структурных дефектов и беспорядка, а также влияние конечного времени жизни носителей из-за взаимодействия последних с атомными колебаниями. Названные факторы приводят к сглаживанию логарифмической особенности в спектре (вопрос о роли сингулярностей ван Хова в одно- и двумерных сверхпроводниках в связи со свойствами купратных сверхпроводников подробно обсуждается в обзоре [15]).

В данной работе принимается, что плотность состояний $N(E)$ имеет тонкую структуру в форме симметричного пика с энергетическим масштабом $\Gamma \lesssim \omega_D$. Мы выбрали $N(E)$ в том же виде, что и в [8],

$$N(z) = \frac{\dot{N}}{2}(1 + \tilde{n}_R(z)), \quad \tilde{n}_R(z) = f \exp\left(-\eta \frac{|z - \delta|}{\omega_D}\right), \quad (2)$$

где $N_0/2$ — значение плотности вдали от центра пика (не зависящий от энергии «пьедестал»), $\delta = E_F - E_R$ — положение уровня Ферми относительно центра пика, $z = E - E_R$ — отсчитанная от уровня Ферми энергия: f — множитель единицы, характеризующий интенсивность пика.

Кроме того, для $\tilde{n}_R(z)$ использовалось представление в форме лоренцевского пика

$$\tilde{n}_R(z) = \frac{f}{\pi} \frac{\Gamma \omega_D}{(z - \delta)^2 + \Gamma^2}. \quad (2a)$$

Это было сделано с целью убедиться в том, что результаты качественно не зависят от конкретного вида тонкой структуры.

Тот факт, что ширина пика $\Gamma \lesssim \omega_D$, является принципиальным. Если $\Gamma \ll \omega_D$, то величина T_c слабо зависит от ω_D (см. например [16]). В такой ситуации влияние острого пика на изотопический эффект оказывается завуалированным.

Мы предполагаем, что форма пика (2), (2a) не меняется при варьировании атомного состава и при добавлении примесей. В то же время считается, что при допировании гетеровалентными примесями меняется число носителей, в результате чего уровень Ферми сдвигается относительно центра пика E_R .

На рис. 1 показаны графики $\tilde{n}_R(z)$ для $\eta = 4$ и $f = 1$ в случае представления (2), а также при $\Gamma/\omega_D = 0.25$, $f = 1/3$ в случае (2a). В разделе 3 с использованием приведенных электронных плотностей проанализированы особенности поведения T_c и α .

Как уже отмечалось, мы предполагаем, что имеющиеся в LSCO примеси, замещающие атомы меди, ведут себя как парамагнитные точечные дефекты. Поясним сказанное. Если относительно, например, атомов железа сомнений не возникает, то в случае примеси цинка по химическим соображениям (т.е. из-за атомной электронной структуры)

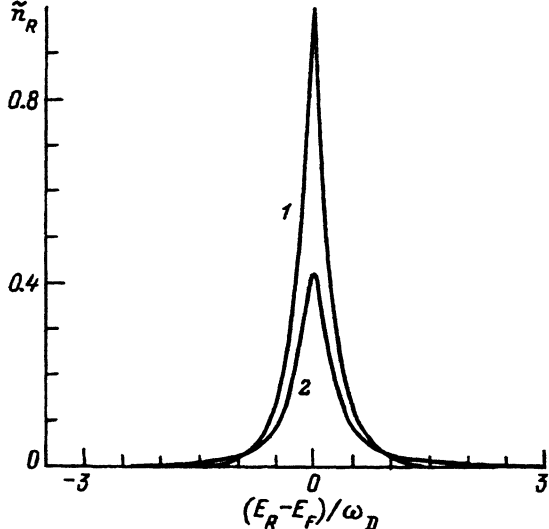


Рис. 1. Энергетические зависимости тонкой структуры плотности состояний $\tilde{n}_R(z)$ (2) и (2а). Цифры 1 и 2 соответствуют кривым ($f = 1, \eta = 4$), ($f = 1/3, \Gamma/\omega_D = 1/4$).

локальный момент, казалось бы, должен отсутствовать. Но дело в том, что в сверхпроводящем состоянии LSCO в медьсодержащих плоскостях существуют сильные локальные корреляции антиферромагнитного типа между Cu-спинами. Эта система спинов в отсутствие примесей обладает пространственно скомпенсированным магнитным моментом. Любые примеси, занимающие медь-позиции, создают локальный беспорядок в медной подсистеме. Иными словами, появление примесей в медь-позициях приводит к локальной раскомпенсации скомпенсированного в регулярной матрице момента. При этом, поскольку при $T \approx T_c$ утрачен дальний магнитный порядок (но сохраняется ближний порядок), примеси ведут себя как парамагнитные дефекты. Подобный беспорядок можно охарактеризовать эффективными локальными магнитными моментами. Они обнаружены в экспериментах, где измерялась температурная зависимость восприимчивости [17–19]. Важно, что установлены количественные значения эффективных магнитных моментов в случаях различных примесей. Отметим, что в случае примесей железа существует локальный магнитный момент, сконцентрированный в основном на самом атоме железа и лишь отчасти возмущающий соседние с ним атомы меди. В случае примесей типа цинка эффективный примесный локальный момент фактически возникает только на соседних атомах меди.

В связи со сказанным, обратим также внимание на работу [20]. В ней исследовалась система $YBa_2Cu_{3-x}Zn_xO_{4-\delta}$ и сделан вывод о бесцелевом характере сверхпроводимости.

Основываясь именно на результатах работ [17–20], мы и рассматриваем одновременно примеси типа железа и типа цинка как парамагнитные точечные дефекты. Термин «парамагнитные точечные дефекты» или просто «парамагнитные дефекты» мы используем потому, что в данной ситуации фактически приходится иметь дело с точечным комплексом дефектов.

Конкретно возможность распада куперовских пар под действием парамагнитных примесей учитывается нами посредством введения ко-

$$\tau_s^{-1} = c_s \frac{7\pi}{24} J^2 S(S+1)N(E_F).$$

Здесь c_s — концентрация точечных дефектов, J — обменный интеграл, имеющий размерность энергии (обычно он в несколько раз меньше характерной электронной энергии E_F), S — эффективный классический спин примеси.

Еще одно замечание. Примеси Fe, замещающая ионы Cu^{2+} , ведут себя как трехвалентные ионы. Этот факт установлен в экспериментах по изомерному сдвигу в эффекте Мессбауэра [21]. В результате появления таких дефектов изменяется число дырок.

Наконец, в настоящей работе мы основываемся на стандартной электрон-фононной модели сверхпроводимости. Подчеркнем, что возможность описания носителей тока в купратах с использованием представления о Ферми-жидкости подтверждена экспериментами по эффекту де Гааза-ван Альфена, по фотоэффекту и позитронному поглощению. В пользу фононной модели свидетельствует ряд экспериментов по туннельной и микроконтактной спектроскопии, а также данные по изотопическому эффекту для T_c . Согласно экспериментам и микроскопическим теоретическим расчетам в LSCO, параметр связи $\lambda \approx 1.5 \div 2$ (см. подробную аргументацию и литературные ссылки, например, в [22]; относительно нефононных моделей см., например, обзор [23]). Принимая во внимание сказанное и ограничиваясь качественной стороной явления, ниже мы проводим рассмотрение в рамках теории БКШ.

В заключение этого раздела отметим, что в системах с тяжелыми фермионами реализуется ситуация, когда в некотором температурном интервале проявляются и антиферромагнитные, и сверхпроводящие свойства. Считается, что возникновение тяжелых фермионов может быть обусловлено антиферромагнитными спиновыми флуктуациями в Ферми-жидкости (см., например, обзор [24] и [25]). Но в случае купратных сверхпроводников также одновременно сосуществуют антиферромагнетизм и сверхпроводимость. Поэтому в принципе можно предположить, что в LSCO особенность в плотности состояний носителей типа ван Хова усиливается за счет спиновых флуктуаций (см. дискуссию в [26–28]).

2. Общие состояния

Рассмотрим уравнение БКШ для T_c

$$1 = \frac{V_{ph}}{2} \int_{E_F - \omega_D}^{E_F + \omega_D} dz N(z) \frac{\text{th} \frac{z}{2T_c}}{z},$$

где V_{ph} — параметр межэлектронного притяжения.

Представим его в виде

$$1 = \frac{V_{pL}}{2} \int_0^{\omega_D} dz [N(z + \delta) + N(\delta - z)] \frac{\text{th} \frac{z}{2T_c}}{z}. \quad (3)$$

Перепишем (3) в другой форме. Примем во внимание стандартное выражение для гиперболического тангенса.

$$\operatorname{th} \frac{\pi x}{2} = \frac{4x}{\pi} \sum_{r=1}^{\infty} \frac{1}{(2k-1)^2 + x^2}.$$

Тогда вместо (3) имеем

$$1 = 2V_{ph}T_c \int_0^{\omega_D} dz [N(z+\delta) + N(\delta-z)] \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{\omega_k^2 + z^2},$$

$$\omega_k = \pi T_c (2k-1). \quad (4)$$

Отметим, что подынтегральное выражение в (4) имеет мнимые полюса $\omega_k = \pm iz$. Учтем качественно влияние парамагнитных примесей. В первую очередь, как отмечалось, появление таких примесей приводит к появлению у носителей конечного времени жизни при $E \approx E_F$. Возникающая перенормировка энергии носителей сводится к появлению мнимой добавки. При этом ω_k заменится на $\omega_k + \tau_s^{-1}(\omega_k)$. В соответствии со сказанным при $c_s \neq 0$ уравнение (4) принимает следующий вид:

$$1 = 2V_{ph}T_c \int_0^{\omega_D} dz [N(z+\delta) + N(\delta-z)] \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{(\omega_k + \tau_s^{-1}(\omega_k))^2 + z^2}. \quad (5)$$

При $c_s \neq 0$ и $\tilde{n}_R \rightarrow 0$ соотношение (5) переходит в ранее полученное в [12].

Пренебрежем зависимостью τ_s^{-1} от ω_k . Тогда путем простых преобразований вместо (5) получаем уравнение относительно T_c в виде

$$\ln \frac{T_c}{\overset{\circ}{T}_c} = \Psi\left(\frac{1}{2}\right) - \Psi\left(\frac{1+\rho}{2}\right) + \int_0^{\omega_D} dz n_R(z) \frac{\operatorname{th} \frac{z}{2T_c}}{z} + \int_0^{\omega_D} dz n_R(z) \frac{\Phi(\rho, \frac{z}{\pi T_c})}{z},$$

$$\rho = \frac{\tau_s^{-1}}{\pi T_c}. \quad (6)$$

Здесь через $\overset{\circ}{T}_c$ обозначена критическая температура при $c_s = 0$ и $\tilde{n}_R = 0$. Она определяется равенством

$$\overset{\circ}{T}_c = 1.134\omega_D \exp\left(-\frac{1}{\lambda}\right), \quad \lambda = \frac{\overset{\circ}{N} V_{ph}}{2}.$$

С целью сокращения записи положено

$$n_R(z) = \frac{1}{2} (\tilde{n}_R(\delta+z) + \tilde{n}_R(\delta-z)),$$

$$\Phi(\rho, \frac{z}{\pi T_c}) = \frac{2}{\pi} \operatorname{Im} \left\{ \Psi\left(\frac{1+\rho+iz/\pi T_c}{2}\right) - \Psi\left(\frac{1+iz/\pi T_c}{2}\right) \right\}$$

(Ψ — дигамма-функция).

Прокомментируем соотношение (6). По определению, T_c — критическая температура в отсутствие острого пика и магнитных дефектов. Отдельные слагаемые в (6) описывают влияние на T_c парамагнитных примесей, острого пика, а также некоторое их совместное воздействие. Ситуация, когда $\tau_s^{-1} = \tau_s^{-1}(\omega_k)$, обсуждается в Приложении.

Фактор изотопического сдвига α определяется как

$$\alpha = -\frac{\partial \ln T_c}{\partial \ln M} = -\frac{M}{T_c} \frac{\partial \omega_D}{\partial T_c} \frac{\partial T_c}{\partial \omega_D}.$$

В рассматриваемой ситуации

$$\alpha = \overset{\circ}{\alpha} \frac{1 + \text{th} \frac{\omega_D}{2T_c} n_R(\omega_D) + \Phi \left(\rho, \frac{\omega_D}{\pi T_c} \right) n_R(\omega_D)}{1 + \int_0^{\omega_D} \frac{dz}{2T_c} \frac{n_R(z)}{\text{ch}^2(z/2T_c)} - \rho \Psi'_\rho \left(\frac{1+\rho}{2} \right) - \int_0^{\omega_D} \frac{dz}{z} T_c \frac{\partial}{\partial T_c} \Phi \left(\rho, \frac{z}{\pi T_c} \right)}, \quad (7)$$

где

$$\overset{\circ}{\alpha} = -\frac{\partial \ln T_c}{\partial \ln M}.$$

Производную от Φ по T_c можно записать как

$$\begin{aligned} T_c \frac{\partial}{\partial T_c} \Phi \left(\rho, \frac{z}{\pi T_c} \right) &= -\rho \text{Im} \Psi'_\rho \left(\frac{1 + \rho + iz/\pi T_c}{2} \right) - \\ &- \left[\varkappa \frac{\partial}{\partial \varkappa} \text{Im} \Psi \left(\frac{1 + \rho + i\varkappa}{2} \right) \right]_{\varkappa = \frac{z}{\pi T_c}} = -\frac{\rho}{2} \text{Im} \Psi^{(1)} \left(\frac{1 + \rho + iz/\pi T_c}{2} \right) - \\ &- \left[\frac{\varkappa}{2} \left\{ \text{Re} \Psi^{(1)} \left(\frac{1 + \rho + i\varkappa}{2} \right) - \text{Re} \Psi^{(1)} \left(\frac{1 + i\varkappa}{2} \right) \right\} \right]_{\varkappa = \frac{z}{\pi T_c}}, \end{aligned}$$

где $\Psi^{(1)}$ — тригамма-функция.

Отметим, что при $\rho \rightarrow 0$ выражение для T_c (6) переходит в (3), а выражение для α (7) имеет вид

$$\alpha = \overset{\circ}{\alpha} \frac{1 + \text{th} \frac{\omega_D}{2T_c} n_R(\omega_D)}{1 + \int_0^{\omega_D} \frac{dz}{2T_c} \frac{n_R(z)}{\text{ch}^2(z/2T_c)}}.$$

Подобное соотношение для α ранее получено в [6,8].

В другом предельном случае, когда $n_R \rightarrow 0$, имеем

$$\ln \frac{T_c}{T_c} = \Psi \left(\frac{1}{2} \right) - \Psi \left(\frac{1 + \rho}{2} \right), \quad (8)$$

$$\alpha(\rho) = \overset{\circ}{\alpha} \left[1 - \rho \Psi'_\rho \left(\frac{1 + \rho}{2} \right) \right]^{-1}. \quad (9)$$

Уравнения для T_c (8) и для α (9) совпадают с найденными соответственно в [12] и [10].

С использованием (6) получим уравнение для экстремальных значений T_c относительно δ при произвольных величинах c_s . Имеем

$$\frac{\partial T_c(\rho, \delta)}{\partial \delta} = T_c \frac{F_1(\rho, \delta)}{F_2(\rho, \delta)}, \quad (10)$$

где

$$F_1(\rho, \delta) = \int_0^{\omega_D} \frac{dz}{z} \frac{\partial n_R(z)}{\partial \delta} \operatorname{th} \frac{z}{2T_c} - \rho \Psi'_\rho \left(\frac{1+\rho}{2} \right) \frac{\partial \tilde{n}_R(0)/\partial \delta}{1 + \tilde{n}_R(0)} + \\ + \int_0^{\omega_D} \frac{dz}{z} \frac{\partial}{\partial \delta} \left[\Phi \left(\rho, \frac{z}{\pi T_c} \right) n_R(z) \right], \quad (11)$$

$$F_2(\rho, \delta) = 1 - \rho \Psi'_\rho \left(\frac{1+\rho}{2} \right) + \int_0^{\omega_D} \frac{dz}{2T_c} \frac{n_R(z)}{\operatorname{ch}^2(z/2T_c)} + \\ + \int_0^{\omega_D} \frac{dz}{z} n_R(z) T_c \frac{\partial}{\partial T_c} \Phi \left(\rho, \frac{z}{\pi T_c} \right). \quad (12)$$

Для того чтобы получить аккуратные результаты для T_c и α , следует численно решить систему интегральных уравнений Элиашберга в виде

$$\begin{cases} \tilde{\Delta}_n = \pi T_c \sum_{m=-N}^N (\lambda(n-m) - \mu_*) \frac{\tilde{\Delta}_m}{|\tilde{\omega}_m|} \tilde{N}(\tilde{\omega}_m) - \pi t_s \tilde{N}(\tilde{\omega}_n) \frac{\tilde{\Delta}_n}{\tilde{\omega}_n}, \\ \tilde{\omega}_n = \omega_n + \pi T_c \sum_{m=-N}^N \lambda(n-m) \tilde{N}(\tilde{\omega}_m) \operatorname{sign}(\tilde{\omega}_m) + \pi t_s \tilde{N}(\tilde{\omega}_n) \operatorname{sign}(\tilde{\omega}_n). \end{cases} \quad (13)$$

(см. [29], а также [30–35]). Здесь, по определению, $\tilde{\Delta}_n$ и $\tilde{\omega}_n$ — параметры порядка и перенормировки электронной массы;

$$\lambda(m) = 2 \int_0^\infty d\Omega \frac{\alpha^2 F(\Omega)}{\Omega^2 + \omega_m^2}, \quad \omega_m = 2\pi T_c m,$$

где $\alpha^2 F(\Omega)$ — спектральная функция электрон-фононного взаимодействия; μ_* — кулоновский псевдопотенциал; $t_s = 1/(\pi\tau_s)$. Через $\tilde{N}(\tilde{\omega}_m)$ обозначена следующая величина:

$$\tilde{N}(\tilde{\omega}_m) = \frac{\tilde{\omega}_m}{\pi} \int_{-\infty}^\infty dE \frac{N(E)}{N(E_F)} \frac{1}{E^2 + \tilde{\omega}_m^2}.$$

Отметим, что в последнее время в литературе обсуждается возможность использования уравнений (13) [36-38]. Суть дискуссии состоит в том, что в названных уравнениях для микроскопических характеристик $\tilde{\Delta}_n$ и $\tilde{\omega}_n$ уже фактически выполнены усреднения по примесным конфигурациям. Строго говоря, подобное усреднение следовало бы провести, оперируя некоторым аналитическим выражением для макроскопической «самоусредняющейся» величины T_c . В данной работе мы фактически так и поступаем, поскольку все рассмотрение основывается на использовании уравнения для T_c в форме (6).

3. Обсуждение результатов

С использованием полученных выше соотношений мы определили зависимости T_c и α от положения уровня Ферми относительно острого пика в плотности состояний при различных концентрациях парамагнитных примесей. В расчетах предполагалось, что $\lambda = 0.4$ и $\omega_D = 240$ К. Основные результаты представлены на рис.2-5.

Рассмотрим сначала ситуацию для случая $s_s = 0$. Ей отвечают графики функций $T_c(\delta)$ и $\alpha(\delta)$, приведенные на рис. 2 (ср. с данными [6,8]). Как непосредственно видно, значения T_c максимальны при $E_F = E_R$. При этом величина T_c зависит от $N(E_F)$, но целиком ею не определяется. Важнее оказывается близость уровня E_F к E_R в интегральном смысле. Что касается фактора α , то имеет при $E_R = E_F$ минимум. Величина α , достигает максимума при $|E_F - E_R|/\omega_D \approx 1$. Приблизительно зависимость α от δ описывается формулой

$$\alpha(\delta) \approx \alpha \frac{1 + \frac{\pi}{2} n_R(\delta, \omega_D)}{1 + n_R(\delta, 0)}.$$

Таким образом, фактор изотопического сдвига чувствителен к тонкой структуре электронного спектра, т.е. к производной $\partial N/\partial E$.

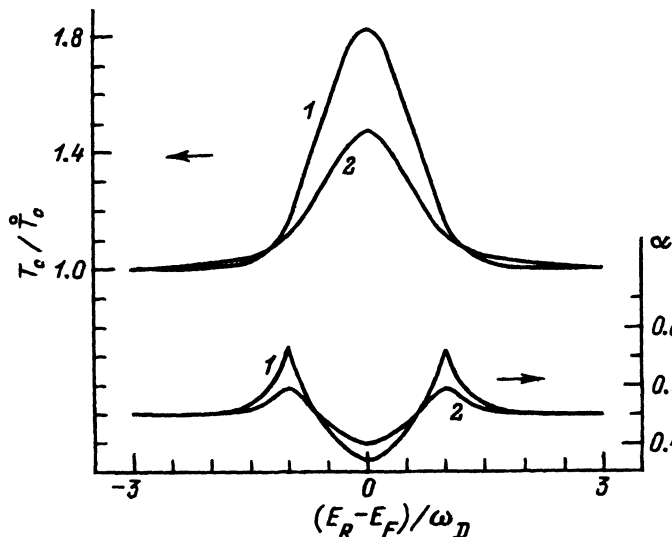


Рис. 2. Зависимость критической температуры T_c/T_{c0} и фактора изотопического сдвига α от положения уровня Ферми относительно центра пика в плотности состояний в отсутствие парамагнитных примесей.

Цифры 1 и 2 имеют тот же смысл, что и на рис. 1.

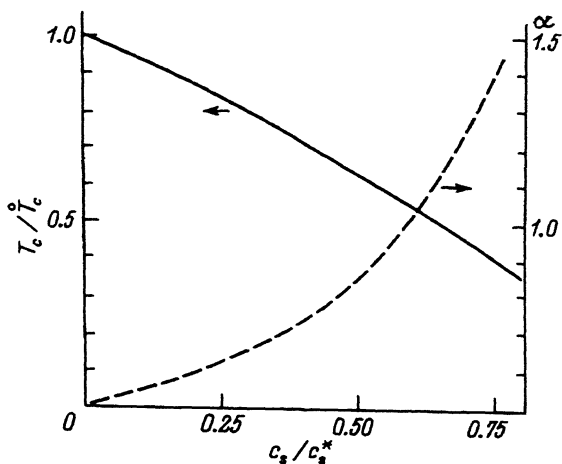


Рис. 3. Поведение T_c/T_c^0 (сплошная линия) и α (пунктирная линия) в зависимости от концентрации парамагнитных примесей (в относительных единицах) в отсутствие тонкой структуры плотности носителей.

Ситуацию в другом пределе ($c_s \neq 0$, $n_R = 0$) иллюстрируют графики $T_c = T_c(\rho)$ и $\alpha = \alpha(\rho)$, фигурирующие на рис. 3. Несколько слов относительно приведенных графиков. Как известно, существует критическое значение ρ_* , при котором T_c обращается в нуль (фактически речь идет о критической концентрации c_s),

$$\rho_* = \frac{\tau_s^{-1}}{\pi T_c} = \frac{1}{2\gamma},$$

где $\gamma = 1.781$ — постоянная Эйлера (см., например, [12]). Затем аналитически зависимость α от ρ определяется как

$$\alpha(\rho) = \begin{cases} \alpha^0(1 + \frac{\pi^2}{4}\rho), & \rho \ll 1, \\ 3\alpha^0\rho^2/(1 - 3/\rho^2), & \rho \gg 1. \end{cases} \quad (14)$$

Поскольку $\rho \sim 1/T_c$ и T_c падает с увеличением концентрации дефектов, то зависимость α от c_s оказывается более резкой, чем следует из (14). При больших концентрациях фактор α во много раз превышает свое значение в отсутствие примесей.

Обсудим общий случай, когда $c_s \neq 0$ и $n_R \neq 0$. На рис. 4, 5 представлены графики $T_c = T_c(c_s, \delta)$ и $\alpha = \alpha(c_s, \delta)$. При этом уже фигурирующие на рис. 4 кривые позволяют понять основные черты поведения T_c и α . Что касается рис. 5, то он иллюстрирует изменение картины в зависимости от интенсивности острого пика $n_R(z)$.

Проанализируем графики на рис. 4, 5. Непосредственно видно, что при $|\delta| \lesssim \omega_D$ ситуация не описывается в однопараметрическом приближении. В первую очередь здесь обратим внимание на резкую асимметрию значений T_c и α в случаях, когда сверхпроводник легируется примесями, которые могут смещать положение уровня Ферми (в принятой

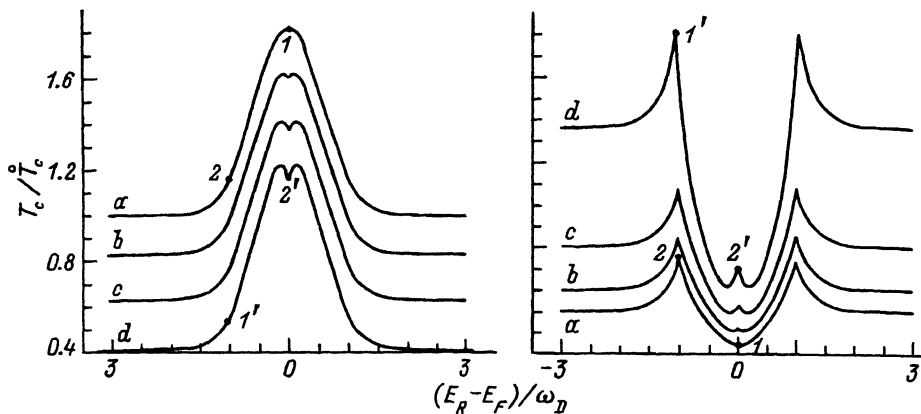


Рис. 4. Поведение T_c/T_c^0 и α в зависимости от значений параметров δ и c_s/c_s^* . Случай $f = 1$, $\eta = 4$.
 c_s/c_s^* : $a - 0$, $b - 0.245$, $c - 0.490$, $d - 0.735$.

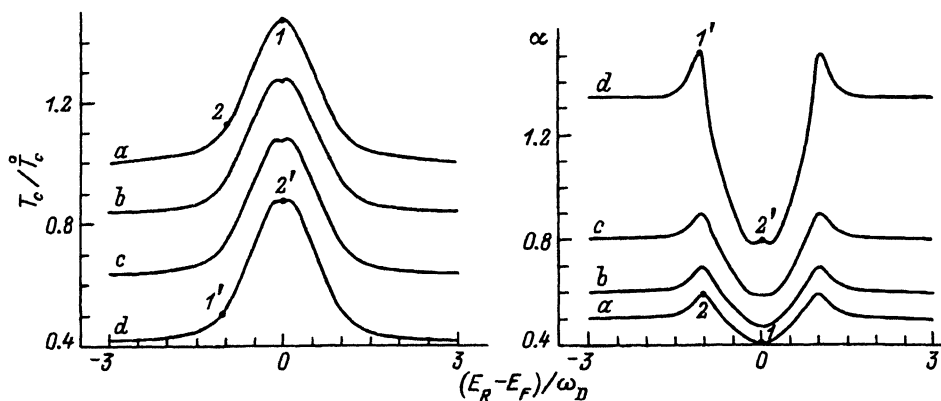


Рис. 5. Зависимость T_c и α от δ и c_s/c_s^* . Случай $f = 1/3$, $\Gamma/\omega_D = 1/4$.
 Обозначения — $a - d$ имеют тот же смысл, что и на рис. 4.

модели эти примеси одновременно «работают» и в качестве парамагнитных дефектов). При этом, если в результате легирования уровень Ферми движется по энергетической шкале от центра пика к его периферии, величина T_c резко падает, а величина α столь же резко возрастает. Наоборот, когда $\delta \rightarrow 0$, то изменения T_c и α сравнительно невелики (ср. T_c и α на рис. 4 в точках 1, 2 и 1', 2').

Отметим, что при $|\delta| \gtrsim \omega_D/2$ роль последнего слагаемого в выражении для T_c (6) второстепенна. Соответствующее значение изотопического сдвига α приближенно задается формулой

$$\alpha(\rho, \delta) \approx \hat{\alpha} \frac{1 + \frac{\pi}{2} n_R(\delta, \omega_D)}{1 + n_R(\delta, 0) - \rho \Psi'_\rho \left(\frac{1+\rho}{2} \right)}.$$

Отсюда также следует, что наличие острого пика в $N(E)$ может привести к существенному усилению эффекта, обусловленного парамагнитными примесями.

Несколько слов относительно специфического поведения T_c (и α) при $\delta \rightarrow 0$. В ситуации, когда особенность $N(E)$ описывается лоренцевским пиком, согласно (11)–(13), экстремальная точка для T_c приближенно характеризуется соотношениями

$$\frac{\partial T_c}{\partial \delta} \approx -\delta z,$$

$$Z = \ln \frac{\beta \omega_D}{2T_c} - \frac{1}{2} \left(\ln(1 + \beta^2) + \frac{1}{1 + \beta^2} \right) - \left(1 - \frac{\beta^4}{(1 + \beta^2)^2} \right) - \rho \Psi'_\rho \left(\frac{1 + \rho}{2} \right) \frac{\beta}{1 + \beta},$$

где $\beta = \Gamma/\omega_D$. Таким образом, если пик не слишком острый, т.е. $\beta \approx 1$, то $Z > 0$. Тогда T_c при $\delta \approx 0$ проходит через максимум. Но если пик весьма острый, то $Z < 0$ и T_c при $\delta \approx 0$ будет проходить через минимум. Заметим, что наличие парамагнитных дефектов уменьшает Z и способствует возникновению особенностей в зависимости $T_c(\delta)$.

С использованием полученных результатов можно качественно объяснить экспериментальные результаты, полученные в [3]. Напомним, что в системе LSCO с оптимальным составом по стронцию уровень Ферми лежит вблизи центра пика в плотности состояний. При замещении части атомов меди на изовалентные примесные атомы цинка положение этого уровня не должно меняться. В такой ситуации эксперимент по T_c и α должен приближенно описываться в рамках однопараметрического варианта теории, когда варьируется только концентрация парамагнитных дефектов. Вместе с тем, если атомы меди замещаются трехвалентными примесями железа, уровень Ферми смещается влево по энергетической шкале. При этом электронная плотность системы близка к таковой для менее легированного соединения LSCO ($y < 0.15$). Как следует из наших результатов, в этом случае эксперимент не описывается в рамках однопараметрической модели. За счет тонкой структуры плотности состояний эффект парамагнитных примесей существенно усиливается.

Указанные отличия в поведении T_c и α для систем LSCO:Zn и LSCO:Fe иллюстрируются рис. 4, 5. При этом в случае Zn при возрастании концентрации парамагнитных дефектов c_s изменение названных параметров происходит вдоль направления $1 \rightarrow 2'$. В то же время для примеси железа с увеличением c_s изменения T_c и α происходят вдоль линии, соединяющей точки 1 и 1'.

Отметим, что для системы LSCO:Me приведенные на этих рисунках кривые в действительности не симметричны относительно точки $E_R = E_F$. Дело в том, что в соединениях, избыточно легированных Sr, существенным образом изменяются магнитные свойства и в значительной степени подавляются спиновые корреляции (см., например, [18, 19]). Поэтому в системах LSCO:Me с $y > 0.15$ особенности проявления в T_c и α тонкой структуры плотности состояний и эффекта парамагнитных примесей должны быть сильно ослаблены.

Вкратце сформулируем полученные результаты. В работе предложена модель для объяснения аномального изотопического эффекта для T_c наблюдавшегося в соединении $\text{La}_{1.85}\text{Sr}_{0.15}\text{Cu}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_4$ [3]. Модель основана на фононном механизме сверхпроводимости и представлении о существовании тонкой структуры в плотности состояний носителей. Наличие тонкой структуры у $N(E)$ связывалось со специфическим свойством Ферми-жидкости — квазидвумерным характером

спектра носителей. Предполагалось, что появление примесей Fe и Zn в медь-подрешетке ведет к локальной раскомпенсации пространственно скомпенсированного магнитного момента матрицы и возникновению эффективных парамагнитных точечных дефектов. Наконец, считалось, что трехвалентная примесь Fe меняет число носителей и смещает уровень Ферми причем реализуется ситуация, характерная для субоптимально легированного соединения LSCO. Что касается примесей Zn, то они ведут себя как изоэлектронные дефекты.

Показано, что в рамках такой модели из-за тонкой структуры спектра носителей влияние парамагнитных примесей на изотопический сдвиг T_c существенным образом усиливается.

Для объяснения эксперимента можно рассмотреть и другие механизмы. В их число входят 1) примесное состояние типа Кюндо (предложено в [3]), 2) взаимодействие между парамагнитными дефектами [39]. Мы предполагаем подробно обсудить эти вопросы в другой работе.

В заключение отметим, что в данной работе мы рассматривали ионы железа как точечные парамагнитные дефекты, основываясь на результатах работ [17–19]. В действительности для случая иона Fe^{3+} , замещающего ион Cu^{2+} в решетке 2–1–4, может иметь место частичный перенос заряда с соседних ионов O^{2-} . В результате этого может возникнуть ситуация, когда для ионов Fe^{2+} и O^- реализуется псевдоэффект Яна–Теллера [40,41]. В подобной ситуации магнитная подсистема ионов Cu^{2+} может испытывать неточечные возмущения со стороны примесных атомов. Этот весьма важный вопрос требует специального рассмотрения.

Выражаем признательность за интерес к работе и полезные советы В.И. Ожогину, Н.А. Бабушкиной и А.В. Инюшкину, а также рецензенту за ценное замечание.

Работа осуществлена в рамках проектов № 90344, 93090, утвержденных Научным советом по проблемам ВТСП, и при частичном финансировании Международным научным фондом Дж. Сороса (грант N 93000).

ПРИЛОЖЕНИЕ

Рассмотрим уравнение для T_c в виде

$$1 = 4\lambda T_c \int_0^{\omega_D} dz [1 + n_R(z)] \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{[\omega_k + \tau_s^{-1}(\omega_k)]^2 + z^2}, \quad (П1)$$

где обратное время релаксации носителей определяется как

$$\tau_s^{-1}(\omega_k) = \tau_s^{-1} \frac{N(E_F + \omega_k)}{N(E_F)}.$$

После ряда преобразований уравнение (П1) можно привести к виду, сходному с (6). При этом

$$\ln \frac{T_c}{T_c^0} = \Phi_1(\rho) + \int_0^{\omega_D} \frac{dz}{z} \operatorname{th} \frac{z}{2T_c} n_R(z) + \int_0^{\omega_D} \frac{dz}{z} n_R(z) \Phi_2 \left(\rho, \frac{z}{\pi T_c} \right). \quad (П2)$$

$$\Phi_1(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{1}{k + \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\rho(k)} - \frac{1}{k + \frac{1}{2}} \right), \quad \rho(k) = \rho \frac{N(E_F + \omega_k)}{N(E_F)},$$

$$\Phi_2(\rho, 2u) = \frac{2}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \left[\frac{u}{(k + \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\rho(k))^2 + u^2} - \frac{u}{(k + \frac{1}{2})^2 + u^2} \right].$$

Соответствующее выражение для фактора изотопического сдвига имеет вид

$$\alpha = \dot{\alpha} \frac{1 + \text{th} \frac{\omega_D}{2T_c} n_R(\omega_D) + \Phi_2 \left(\rho, \frac{\omega_D}{\pi T_c} \right) n_R(\omega_D)}{1 + \int_0^{\omega_D} \frac{dz}{2T_c} n_R(z) \frac{1}{\text{ch}^2 \frac{z}{2T_c}} - T_c \frac{\partial}{\partial T_c} \Phi_1(\rho) - \int_0^{\omega_D} \frac{dz}{z} T_c \frac{\partial}{\partial T_c} \Phi_2 \left(\rho, \frac{z}{\pi T_c} \right)}. \quad (\text{П3})$$

При использовании для T_c и α соотношений (П2) и (П3) вместо (6) и (7) основные результаты, полученные выше, сохраняются.

Список литературы

- [1] Crawford M.K., Farneth W.E., Mc Carron III E.M., Harlow R.L., Moudden A.H. *Science* **250**, 1390 (1990); Crawford M.K., Kunchur M.N., Farneth W.E., Mc Carron III E.M., Poon S.J. *Phys. Rev.* **B41**, 282 (1990).
- [2] Frank J.P., Harker S., Brewer J.N. *Phys. Rev. Lett.* **71**, 283 (1993).
- [3] Ozhogin V., Babushkina N., Inyushkin A., Taldenkov A., Molchanova L. *Appl. Supercon.* **165**, 359 (1993).
- [4] Плакида Н.М., Черный С. *СФХТ* **4**, 1281 (1991).
- [5] Zhernov A.P., Mamedov T.A. In: VI Intern. Symp. «High-purity materials in Science and Technology». Dresden (May, 1990); Жернов А.П., Мамедов Т.А. *СФХТ* **4**, 1046 (1991).
- [6] Tsui C.C., Newns D.W., Chi C.C., Pattnaik P.C. *Phys. Rev. Lett.* **65**, 2724 (1990).
- [7] Mueller K.A. *Z. Phys.* **B80**, 193 (1990); Idem-Phase *Trans.* **22**, 3 (1990).
- [8] Schwarz R.B., Ivon P.J., Coffey D. *Studies of High Temperature Superconductors* / Ed. Anant Narlikar. N. Y. (1991). Т. 8.
- [9] Bornemann H.J., Morris D.E., Liu H.B., Sinha A.P.B., Nazwankar P., Chandrachud M. *M²S-HTSC III. Third Intern. Conf. on Materials and Mechanisms of Superconductivity.* Kanazawa, Japan (1991).
- [10] Carbotte J.P., Greeson M., Prez-Gonzales A. *Phys. Rev. Lett.* **66**, 1789 (1991).
- [11] Абрикосов А.А., Горьков Л.П. *ЖЭТФ* **39**, 1781 (1960).
- [12] Абрикосов А.А. *Основы теории металлов.* М. (1987).
- [13] Вонсовский С.В., Изюмов Ю.А., Курмаев Э.З. *Сверхпроводимость переходных металлов, их сплавов и соединений.* М. (1977).
- [14] Coffey D., Schwarz R., Ivon P. Preprint LA-UR-91-1013 (1990).
- [15] Friedel J. *J. Physique* **48**, 1787 (1987).
- [16] Александров А.С., Архипов В.Е., Гощицкий Б.Н., Елесин В.Ф. Влияние облучения на физические свойства перспективных упорядоченных сверхпроводников. М. (1989). С. 223.
- [17] Xiao Gang, Cieplak M.Z., Xiao J.Q., Chien C.L. *Phys. Rev.* **B42**, 8752 (1990).
- [18] Ishikawa N., Kuroda N., Ikeda H., Yoshizaki R. *Phys. C* **203**, 284 (1992).
- [19] Juichiro Arai, Saji Ogawa, Kikuo Umezawa. *Phys. C* **206**, 257 (1993).
- [20] Akimenko A.I., Goll G., Yanson I.K. *Z. Phys.: Cond. Matter.* **B88**, 778 (1991).
- [21] Matukievicz J.M., Kimball C.W., Giapintzakis J., Dwight A.E., Brodsky M.B., Dulap B.D., Sladki M., Fradin F. *Phys. Lett.* **A124**. 453 (1987).

- [22] Жернов А.П., Кулагина Т.Н., Мамедов Т.А. СФХТ **5**, 589 (1992).
- [23] Изюмов Ю.А. УФН **161**, 1 (1991).
- [24] Grewe N., Steglich F. Handbook of the Physycs and Chemistry / Ed. Gschneier Jr. and L. Eyong. Elsever Scince Publishers B. V. (1991). V. 14.
- [25] Kleiman A.N., Bishop D.J., Ott H.R., Fisk Z., Smith J.L. Phys. Rev. Lett. **64**, 1975 (1990).
- [26] Moriya T. Yoshinori Takahashi, Kazuo Veda. J. Phys. Soc. Jap. **59**, 2905 (1990).
- [27] Monien H., Pines D., Slichter C.P. Phys. Rev. **B41**, 11120 (1990).
- [28] Plakida N.M. Appl. Superc. **1**, 231 (1993).
- [29] Ashraf M., Carbotte J.P. Phys. Rev. **B31**, 2617 (1985).
- [30] Schachinger E., Mitrovic B., Carbotte J.P. J. Phys. F **12**, 1771 (1982).
- [31] Whitmore M.D., Carbotte J.P. J. Low Temp. Phys. **50**, 113 (1983).
- [32] Schachinger E., Carbotte J.P. Phys. Rev. **B42**, 406 (1990).
- [33] Lie S.C., Carbotte J.P. Solid State Commun. **34**, 599 (1980).
- [34] Labbe J., Bok J. Europhys. Lett. **3**, 1225 (1987).
- [35] Жернов А.П., Чулкин Е.П. СФХТ **5** 236 (1992).
- [36] Yong-Jihn Kim, Overhauser A.W. Phys. Rev. **B47**, 8025 (1994).
- [37] Abrikosov A.A., Gor'kov L. Phys. Rev. **B49**, 12337 (1994).
- [38] Yong-Jihn Kim, Overhauser A.W. Phys. Rev. **B49**, 12339 (1994).
- [39] Fisher O., Treyvaud A., Bongi G., Jones H., Flukiger R. J. Phys. F **4**, 1187 (1974).
- [40] Gehring G.A., Gehring K.A. Rep. Prog. Phys. **38**, 1 (1975).
- [41] Барсукер И.Б., Полингер В.З. Вибрационные взаимодействия в молекулах и кристаллах. М. (1983).