УДК 537.312.62

О ПРОЯВЛЕНИЯХ ВАНХОВОВСКОЙ ОСОБЕННОСТИ В СВОЙСТВАХ $La_{2-x}Sr_xCuO_4$

И. М. Суслов

На основе данных о зонной структуре $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ показано, что величина изотоп-эффекта в этом соединении соответствует фононному механизму. Обсуждается зависимость изотоп-эффекта от x. В тех же предположениях получены согласующиеся с экспериментом оценки термодинамических характеристик $La_{2-x}Sr_xCuO_4$.

В современных публикациях по высокотемпературной сверхпроводимости оксидных соединений борются две точки зрения. Первая исходит из предположения о наличии широкой электронной зоны и картины Ферми-жидкости, тяготея к традиционным механизмам сверхпроводимости типа БКШ. Вторая исходит из модели узкой хаббардовской зоны и приводит к экзотическим механизмам сверхпроводимости (поляронному, магнитному и т. д.). Первая точка зрения подтверждается расчетами зонной структуры оксидных сверхпроводников, выполненными стандартными методами [1]. Сторонники второй точки зрения считают эти методы непригодными из-за недостаточно корректного учета межэлектронного взаимодействия и ссылаются на экспериментальные данные по фотоэмиссии [2] и спектрам характеристических потерь [3]; последние эксперименты, однако, указывают на то, что результаты [2, 3] связаны с диэлектризацией поверхностного слоя образцов из-за обеднения его кислородом [4].

В настоящей работе показано, что использование результатов зонных расчетов [1], свидетельствующих о наличии в электронном спектре ванхововской особенности, позволяет удовлетворительно описать термодинамические свойства $La_{2-x}Sr_xCuO_4$, а также величину изотоп-эффекта и ее зависимость от x. Ранее в тех же предположениях объяснены структурные аномалии [5] и дана интерпретация «сверхпроводящего взрыва» 1987 г. [6].[1]

Согласно зонным расчетам [1], уровень Ферми в La_2CuO_4 лежит в центре квазидвумерной зоны шириной 4 эВ, спектр которой $\varepsilon(k_x, k_y)$ хорошо описывается приближением сильной связи

$$\varepsilon(k_x, k_y) = 2\mathcal{J} \cos k_x a + 2\mathcal{J} \cos k_y a. \tag{1}$$

В центре зоны лежит особенность плотности состояний

$$N_{2D}(\varepsilon) = N_{2D}(0) \ln (V/|\varepsilon|), \tag{2}$$

которая из-за небольших отклонений спектра от (1) оказывается на ~ 0.1 эВ ниже уровня Ферми. В $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ уровень Ферми понижается и при $x \sim 0.1$ проходит через ванхововскую особенность: в зависимости $T_c(x)$ возникает максимум, который действительно наблюдается при $x = 0.15 \div 0.20$ [7]. Для оптимального состава уровень Ферми лежит вблизи центра особенности (2), что и будет предполагаться ниже; ромбические искажения структуры и связанная с ними диэлектризация спектра имеют место лишь при $x < 0.15$ и несущественны для дальнейшего.

[1] В работе [6] вследствие опечаток в ряде формул вместо $\varphi_0(z)$ стоит $\gamma_0(z)$.

Для спектра (1) двумерная Ферми-поверхность имеет самопересечение под прямым углом, и для анализа сверхпроводящих свойств требуется суммирование «паркета» [8]. Будем считать отклонения угла от прямого малыми, но достаточными для применимости теории БКШ [8]; по-видимому, такая ситуация близка к реальной [1]. Считая константу четырехфермионного взаимодействия g не зависящей от импульсов, подставляя (2) в уравнение БКШ

$$1=g\int\limits_{-\omega_D}^{\omega_D} d\varepsilon N_{2D}(\varepsilon)\,\frac{1}{2\varepsilon}\,\operatorname{th}\frac{\varepsilon}{2T} \tag{3}$$

и полагая $\lambda_0=gN_{2D}(0)$, получим (см. Приложение 1 в [9])

$$T_c=1.14V\exp\left\{-\sqrt{2/\lambda_0+\ln^2(V/\omega_D)-1.31}\right\}. \tag{4}$$

Здесь и далее нетривиальные численные константы связаны со значениями безразмерных интегралов. При $\lambda_0 \ll (\ln(V/\omega_D))^{-2}$ имеем $T_c\sim\exp(-\mathrm{const}/\lambda_0^{1/2})$ [8, 10], в обратном случае $T_c\sim\omega_D\exp(-1/\lambda_0\ln(V/\omega_D))$, т. е. формулу БКШ с особенностью, обрезанной на ω_D.

Как указывалось в [11–13], особенности плотности состояний могут приводить к уменьшению величины изотоп-эффекта: дело в том, что при наличии на уровне Ферми узкого пика плотности состояний роль дебаевской энергии ω_D, входящей в теорию БКШ как параметр обрезания по энергии, переходит к ширине пика. Интересно провести количественную оценку этого эффекта. Пусть массы всех ионов M_i увеличились в $(1+\gamma)$ раз $(\gamma\ll 1)$, тогда ω_D заменяется на $\omega_D(1-\gamma/2)$, а T_c — на $T_c(1-\alpha\gamma)$, где α — показатель степени в законе $T_c\sim M^{-\alpha}$. Из (4) легко получить

$$\alpha=\ln(V/\omega_D)/2\sqrt{2/\lambda_0+\ln^2(V/\omega_D)-1.31}\,. \tag{5}$$

В зависимости от соотношения между $1/\lambda_0$ и $\ln(V/\omega_D)$ α может меняться от идеального значения 0.5 до нуля.

Параметры особенности (2) связаны с параметрами спектра (1) соотношениями $N_{2D}(0)=1/2\pi^2\mathcal{J}a^2$ и $V=16\,\mathcal{J}$. Подставляя в (4) $T_c=40$ K, $\omega_D=500$ K, $\mathcal{J}=0.5$ эВ, получим $\lambda_0=0.056$, и (5) дает $\alpha=0.33$. Если меняются массы не всех ионов, а только одного (i-го) сорта, то, вводя показатели α_i соотношениями $T_c\sim M_i^{-\alpha_i}$, имеем

$$\alpha=\sum_i\alpha_i=\alpha_{\mathrm{O}}+\alpha_{\mathrm{Cu}}+\alpha_{\mathrm{La}}+\alpha_{\mathrm{Sr}}. \tag{6}$$

Согласно Веберу [14], $\alpha_{\mathrm{O}}/\alpha=0.6$, [2] откуда $\alpha_{\mathrm{O}}=0.20$ — в разумном согласии с экспериментальными значениями $\alpha_{\mathrm{O}}=0.16\pm0.02$ [4], $\alpha_{\mathrm{O}}=0.10\div0.37$ [15]. Если путем изменения x удалить уровень Ферми от особенности, то α возрастет до 0.5, т. е. величина α_{O} увеличится в 1.5 раза. Из (3) нетрудно получить и детальную зависимость α от уровня Ферми ε_F, который будем отсчитывать от центра особенности

$$\alpha=\begin{cases}\dfrac{1}{2}\,\dfrac{\ln(V/|\varepsilon_F-\omega_D|)+\ln(V/|\varepsilon_F+\omega_D|)}{2\ln(V/\varepsilon_F)}, & |\varepsilon_F|\gg T_c, \quad (7а)\\ \ln(V/\omega_D)/2\ln(1.14V/T_c), & |\varepsilon_F|\ll T_c. \quad (7б)\end{cases}$$

Согласно (7а), α может превышать 1/2 (расходимости при $\varepsilon_F=\pm\omega_D$ связаны с модельным характером теории БКШ); результат (7б) совпадает

[2] В расчетах Вебера [14] использовалась формула Мак-Миллана, не учитывающая быстрого изменения $N_{2D}(\varepsilon)$ на масштабе ω_D, поэтому отличие α от 0.5 возникало лишь за счет кулоновского псевдопотенциала. Плотность состояний бралась в виде (2) без обрезания особенности; появление слишком больших значений $N_{2D}(\varepsilon_F)$ исключалось путем исследования решетки на устойчивость (положения уровня Ферми, слишком близкие к центру особенности, неустойчивы [5]).

с (5). В недавних экспериментах на $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ [16] обнаружено, что при уменьшении x α_0 возрастает от 0.1—0.2 при $x=0.20$ до 0.6, а затем уменьшается до 0.4; такое поведение качественно согласуется с (7).

Покажем, что в принятых предположениях получается непротиворечивое описание других сверхпроводящих свойств $La_{2-x}Sr_xCuO_4$. Будем считать слои Cu—O расположенными на расстоянии d друг от друга; для учета слабого взаимодействия между ними примем трехмерный спектр в виде $\varepsilon(k_x, k_y)+2\mathcal{J}_\perp \cos k_z d$ с $\varepsilon(k_x, k_y)$ из (1) и $\mathcal{J}_\perp \ll \mathcal{J}$. Пользуясь выражением термодинамического потенциала Ω через мацубаровские функции [17] и проводя стандартные разложения [18, 19] с учетом сильной зависимости плотности состояний от энергии, получим, что коэффициенты разложения в функционале Гинзбурга—Ландау

$$\Omega-\Omega_0=\int d\mathbf{r} A\left\{\xi_\parallel^2\left|\frac{\partial\Delta}{\partial\mathbf{r}_\parallel}\right|^2+\xi_\perp^2\left|\frac{\partial\Delta}{\partial z}\right|^2+\frac{T-T_c}{T_c}|\Delta|^2+\beta\frac{|\Delta|^4}{T_c^2}\right\} \tag{8}$$

($\Delta(\mathbf{r})$ — параметр порядка) имеют вид

$$\xi_\parallel=a\frac{\mathcal{J}}{T_c}\left[\frac{4\beta_{\text{БКШ}}}{\ln(1.14V/T_c)}\right]^{1/2},\quad A=\frac{N_{2D}(0)}{d}\ln\frac{1.14V}{T_c},$$

$$\xi_\perp=d\frac{\mathcal{J}_\perp}{T_c}\left[\beta_{\text{БКШ}}\frac{\ln(1.32V/T_c)}{\ln(1.14V/T_c)}\right]^{1/2},\quad \beta=\beta_{\text{БКШ}}\frac{\ln(0.81V/T_c)}{\ln(1.14V/T_c)}, \tag{9}$$

где $\beta_{\text{БКШ}}=7\zeta(3)/8\pi^2$. Знание коэффициентов A, $\xi_\parallel$, $\xi_\perp$, β позволяет описать все термодинамические свойства сверхпроводника в окрестности T_c (а по порядку величины — при любых температурах). Для сопоставления с экспериментом воспользуемся результатами работы Горькова и Копнина [20], в которой проведены отбор и обработка экспериментальных данных.

$\mathcal{J}$, эВ	$\xi_\parallel$, Å	ΔC, мДж/см$^3\cdot$К	χ_p, см^3/моль	α_0
		Эксперимент		
	60	10	$1.5\cdot10^{-4}$	0.16±0.02 [14] 0.10—0.37 [15]
		Расчет		
0.5	110	4.6	$0.58\cdot10^{-4}$	0.20
0.25	58	8.6	$1.1\cdot10^{-4}$	0.19

Величина $\xi_\perp$ определяется перекрытием волновых функций соседних слоев Cu—O и очень чувствительна к их виду. Из экспериментального значения $\xi_\perp=4.6$ Å [20] получим $\mathcal{J}_\perp\approx 2T_c$, а следовательно, обрезание особенности за счет трехмеризации спектра малосущественно. Остальные три параметра A, $\xi_\parallel$, β связаны с характеристиками двумерного спектра (1). Они однозначно определяются выбором любых трех независимых термодинамических величин: в качестве таковых примем скачок теплоемкости ΔC, паулиевскую восприимчивость χ_p при $T=T_c$

$$\Delta C=\frac{T_c}{\beta}\frac{N_{2D}(0)}{d}\ln\frac{1.14V}{T_c},\quad \chi_p=2\mu_B^2\frac{N_{2D}(0)}{d}\ln\frac{1.14V}{T_c} \tag{10}$$

и длину когерентности $\xi_\parallel$ вдоль слоев Cu—O. В первой строке таблицы приведены значения $\xi_\parallel$, ΔC, χ_p, полученные из эксперимента [20], во второй строке — рассчитанные по формулам (9), (10) с $\mathcal{J}=0.5$ эВ, $a=3.8$ Å, $d=6.6$ Å. Во всех случаях расхождение примерно в 2 раза, что ввиду модельности оценки (пренебрежение зависимостью g от импульсов, фермижидкостными эффектами, электрон-фононной перенормировкой спектра) нельзя считать существенным. Любопытно, однако, что во всех случаях согласие улучшается при уменьшении $\mathcal{J}$; если принять для $\mathcal{J}$ значение в 2 раза меньшее $\mathcal{J}=0.25$ эВ, то согласие с экспериментом становится полным (см. таблицу). Можно предположить, что зонные расчеты [1] дают завышенное значение $\mathcal{J}$.

Мы считали, что $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ находится в чистом пределе. Оценки длины пробега из электропроводности [20], на наш взгляд, ненадежны: при наличии в образце протяженных дефектов — плоскостей двойникования, межкристаллитных границ, трещин и т. д. — его сопротивление с края на край может быть велико, даже если в основном объеме он является чистым.

Таким образом, для описания сверхпроводящих свойств $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ не требуется привлечения никаких экзотических механизмов.

Список литературы

[1] Mattheiss L. F. // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 58. N 10. P. 1028—1031.
[2] Fuggle J. C. e. a. // Phys. Rev. B. 1988. V 37. N 1. P. 123—130.
[3] Nücker N. e. a. // Phys. Rev. B. 1988. V. 37. N 7. P. 5158—5167.
[4] Киреев И. В., Михеева М. Н., Назин В. Г., Свищев А. В. // Письма в ЖЭТФ. 1988. Т. 48. № 2. С. 633—636; ЖЭТФ. 1989. Т. 95. № 6. С. 2060—2068.
[5] Суслов И. М. // Письма в ЖЭТФ. 1987. Т. 46. № 10. С. 402—404.
[6] Суслов И. М. /// ФТТ. 1989. Т. 31. № 1. С. 278—280.
[7] Van Dover R. B. e. a. // Phys. Rev. B. 1987. V. 35. N 7. P. 5357—5360; Torrance J. B. e. a. // Phys. Rev. Lett. 1988. V. 61. N 9. P. 1127—1130.
[8] Дзялошинский И. Е. // ЖЭТФ. 1987. Т. 93. № 4. С. 1487—1502.
[9] Суслов И. М. // ЖЭТФ. 1989. Т. 95. № 3. С. 949—965.
[10] Hirsh J. E., Scalapino D. F. // Phys. Rev. Lett. 1986. V. 56. N 5. P. 2732—2736.
[11] Gorbatsevich A. A. e. a. // Phys. Lett. 1987. V. 125. N 1. P. 149—156.
[12] Mattis D. C., Mattis M. P. // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 59. N 24. P. 2780—2783.
[13] Combescott R., Labbe I. // Physica C. 1988. V. 153—155. N 1. P. 204—208.
[14] Batlog B., Kourouklis G., Weber W. e. a. // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 59. N 8. P. 912—914; Weber W. // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 58. N 12. P. 1371—1373.
[15] Faltens T. A. a. e. // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 59. N 8. P. 915—917.
[16] Crawford M. K., Farheth W. E., McCarroh E. M. // Intern. Conf. «Materials and Mechanisms of Superconductivity, High-Temperature Superconductors». Stanford, Iuly, 23—28, 1989.
[17] Свидзинский А. В. Пространственно-неоднородные задачи теории сверхпроводимости. М.: Наука, 1982. С. 41.
[18] Горьков Л. П., Мелик-Бархударов Т. К. // ЖЭТФ. 1963. Т. 45. № 4. С. 1493—1450.
[19] Булаевский Л. Н. // УФН. 1975. Т. 116, № 2. С. 449—465.
[20] Горьков Л. П., Копнин Н. Б. // УФН. 1988. Т. 156. № 1. С. 117—135.

Физический институт им. П. Н. Лебедева
Москва

Поступило в Редакцию
22 марта 1990 г.