УДК 537.312.62

СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ КРИСТАЛЛОВ С АНИЗОТРОПНЫМ ЭЛЕКТРОННЫМ СПЕКТРОМ

Г. М. Генкин, Н. В. Щедрина, М. И. Щедрин

Рассмотрена зависимость температуры сверхпроводящего перехода от параметров системы в модели с двумерным электронным спектром. Исследуется случай косинусной дисперсии, для которого при полузаполненной зоне имеется логарифмическая особенность в плотности электронных состояний вблизи поверхности Ферми. Получены формулы, связывающие температуру перехода T_c с шириной электронной зоны и константой связи. Оказывается, что при одной и той же константе связи и экспериментальной величине ширины зоны эти формулы дают более высокое значение T_c, чем в случае классического сверхпроводника с изотропным трехмерным электронным спектром. Дана оценка влияния реальной трехмерности кристалла на поведение T_c; получено условие, при котором это влияние можно считать малым. Проведено сравнение с экспериментальными данными по лантановым и иттриевым сверхпроводникам.

1. Можно считать установленным тот факт, что в высокотемпературных сверхпроводниках (ВТСП) электронный спектр, как правило, является анизотропным (см., например, [1-7]). Сильная анизотропия электронного спектра ВТСП была продемонстрирована также и численным расчетом в работе [2]; и в настоящее время широкое распространение получили $2D$-модели электронного спектра [3, 4]. С использованием этой двумерной модели исследовались многие вопросы, связанные с высокотемпературной сверхпроводимостью, в частности RVB-фаза [5], волны зарядовой и спиновой плотности [6], кинетические коэффициенты в ВТСП [8]. Следует отметить, что для оценок и сравнения с экспериментом в ВТСП часто пользуются результатами классической модели БКШ с трехмерным изотропным спектром, согласно которым

$$T_c = (2\gamma\omega_D/\pi)\exp(-\lambda_0^{-1}), \tag{1}$$

где λ_0 — безразмерная константа связи в этой модели; $\lambda_0 = g\nu(\mu)$; $\nu(\mu) = mp_F/2\pi^2\hbar^3$ — плотность электронных состояний на поверхности Ферми (ПФ). Однако при более детальной конкретизации модели возникают вопросы о влиянии на T_c и другие свойства сверхпроводника таких параметров, как ширина зоны W, анизотропия электронного спектра, тем самым форма ПФ. Форма ПФ для ВТСП подробно исследовалась в работе [9], где было установлено, что ПФ этих соединений имеет $2D$-характер и представляет собой гофрированный скругленный «короб», центрированный в точке Г зоны Бриллюэна. Эти результаты находятся в согласии с выводами более ранних работ [3, 4]. В связи с этим для описания электронного спектра более подходящим является выражение, которое уже использовалось для объяснения различных физических свойств ВТСП [4], а именно

$$\xi(p) = -B[\cos(p_x a) + \cos(p_y a)] - \mu, \tag{2}$$

где $B > 0$ — интеграл перекрытия в квадратной плоской решетке только между ближайшими соседями; $W = 4B$; a — постоянная решетки в базовой плоскости ВТСП; μ — химический потенциал. Отметим, что такой вид электронного спектра получается в приближении сильной связи и, кроме ВТСП, используется также для описания сверхпроводников с тяжелыми фермионами. Для полузаполненной зоны ПФ для спектра (2) является «псевдоцилиндром», состоящим из четырех плоскостей, перпендикулярных плоскости (p_x, p_y). Сечением этого цилиндра является ромб, соединяющий точки (0, $\pm\pi/a$) и ($\pm\pi/a$, 0). При введении в (2) интеграла перекрытия B_1, описывающего переходы между слоями по оси c, происходит некоторая гофрировка ПФ (при $B_1 \ll B$). Характерной чертой спектра (2) является логарифмическая особенность вблизи ПФ в плотности электронных состояний для полузаполненной зоны. Заметим, что расчет с таким спектром может представлять и самостоятельный интерес, так как указанная особенность не позволяет выполнить вычисления по стандартной схеме, когда плотность состояний на ПФ предполагается постоянной. Настоящая работа и посвящена исследованию влияния электронного спектра (2) на сверхпроводящие свойства.

2. Запишем уравнение, определяющее T_c сверхпроводника (см., например, [10])

$$1=(g/2)\int \nu(\xi+\mu)\,\mathrm{th}\,(\xi/2T_c)\,\xi^{-1}d\xi, \tag{3}$$

где для фононного механизма спаривания пределы интегрирования по ξ есть $\pm\omega_D$. Из выражения (3) следует, что влияние электронного спектра на термодинамические свойства определяется плотностью электронных состояний в энергетическом спектре $\nu(\xi)$. Очевидно, что если $\nu(\xi)$ не имеет особенности вблизи ПФ, то результаты расчетов для различных электронных спектров и различных размерностей могут отличаться лишь численными множителями. Следует отметить, что энергетическая щель Δ также может быть анизотропной.[1] Однако для существования анизотропии Δ необходимым условием является [11] анизотропия константы электрон-фононного взаимодействия, и поскольку надежных данных об этой анизотропии в отличие от анизотропии электронного спектра в настоящее время нет, то ниже мы не будем учитывать анизотропию щели. Кроме того, следует отметить, что для ВТСП, которые являются «грязными» сверхпроводниками [12], имеет место [13] изотропизация щели. При $\mu=0$ (полузаполненная зона) для спектра (2) ПФ в базовой плоскости имеет вид ромба и плотность состояний равна

$$\nu(\xi)=2\int\frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3}\,\delta[\xi-\xi(\mathbf{p})]=\frac{2}{\pi^2}(Bv_c)^{-1}K\left(\sqrt{1-(\xi/2B)^2}\right), \tag{4}$$

где v_c — объем элементарной ячейки кристалла, $K(x)$ — полный эллиптический интеграл первого рода. При $\xi\to 0$ (4) имеет логарифмическую особенность

$$\nu(\xi)=(8/\pi^2)(Wv_c)^{-1}\ln|2W/\xi|. \tag{5}$$

Введем также среднюю плотность состояний по всей зоне

$$\nu=W\tau^1\int\limits_{-W/2}^{+W/2}\nu(\xi)\,d\xi=2(Wv_c)^{-1}. \tag{6}$$

Рассмотрим зависимость T_c от параметров модели. Из (3) с учетом (5) в асимптотике $\omega_D/2T_c \gg 1$ получаем

$$T_c=(4\gamma W/\pi)\exp\left[-\sqrt{\ln^2(2W/\omega_D)-Q+\lambda^{-1}}\right]. \tag{7}$$

В (7) $Q=C-\ln^2(4\gamma/\pi)$; C, γ — постоянные величины; λ — безразмерная константа связи в рассматриваемой анизотропной модели

$$\lambda=2g\nu/\pi^2=(4g/\pi^2)(Wv_c)^{-1}. \tag{8}$$

[1] Отметим также, что анизотропная часть щели Δ_1 много меньше [11] изотропной части Δ_0.

Обсудим полученную формулу (7), которая определяет T_c как функцию параметров системы W, ω_D, g и ν. Q имеет числовое значение порядка 1.5. Формула (7) справедлива при $W \geqslant 2\omega_D$. В пределе $W/\omega_D \gg 1$ и при условии $\ln^2(2W/\omega_D) \gg \lambda^{-1}-Q$ (постоянной Q по сравнению с λ^{-1} обычно можно пренебречь, что следует из приведенных ниже оценок, так как в рассматриваемом случае $\lambda \ll 1$) получаем следующую асимптотическую формулу:

$$T_c = (2\gamma\omega_D/\pi)\exp\{-[\lambda\ln(2W/\omega_D)^2]^{-1}\}. \tag{9}$$

В этом предельном случае (9) отличается по виду от классической формулы БКШ выражением в показателе экспоненты, где наряду с безразмерной константой λ содержится дополнительный множитель $\ln(2W/\omega_D)^2$. При этом следует иметь в виду, что и сама λ, согласно (8), имеет совершенно другой вид, чем в обычной теории БКШ для изотропного электронного спектра. Формально при $W\to\infty$ плотность состояний $\nu\to 0$ и $\lambda\to 0$, и в результате $T_c\to 0$. Уменьшение ширины зоны приводит к повышению T_c (при указанном выше условии $W/\omega_D \gg 1$).

3. Рассмотрим ситуацию, когда притяжение между электронами имеет место по всей зоне проводимости; в этом случае будем иметь

$$T_c = (4\gamma W/\pi)\exp(-\sqrt{\ln^2 4 - Q + \lambda^{-1}}). \tag{10}$$

Подкоренное выражение в (10) всегда положительно; заметим, что подкоренное выражение в экспоненте (7) как функция W в указанном приближении $W/\omega_D \gg 1$ является возрастающей функцией W и заведомо положительно. В формуле (10) в подкоренном выражении при не слишком больших λ можно пренебречь слагаемым $\ln^2 4 - Q$, и при этом получается простое выражение для T_c

$$T_c = (4\gamma W/\pi)\exp(-\lambda^{-1/2}). \tag{11}$$

В отличие от классической формулы в (11) стоит большой предэкспоненциальный множитель $\sim W$ и, кроме того, λ зависит от величины W согласно (8). Поэтому T_c как функция W является немонотонной и имеет максимум при ширине зоны $W_0=16\ g/\pi^2 v_a$; при этом $T_c\,(\max)=4\gamma W_0/\pi e^2$. Таким образом, если предположить существование механизмов, обеспечивающих притяжение во всей зоне, то в рамках рассматриваемой модели предельно допустимые значения для $T_c\,(\max)$ могут быть достаточно большими. Действительно, используя значения константы g, приведенные ниже ($g=19$ эВ$\cdot$Å^3 для соединений 124 и $g=60$ эВ$\cdot$Å^3 для соединений 123), получаем соответственно $W_0=0.15$ и 0.58 эВ, что дает $T_c\,(\max)\sim$ ~ 500 и 1900 К. Обратим внимание на то обстоятельство, что такие большие T_c отвечают тем не менее достаточно малой константе связи $\lambda=0.25$.

4. Рассмотрим величину щели Δ_0 при $T\to 0$. Оценка Δ_0 в асимптотике $\Delta_0/\omega_D \ll 1$ дает

$$\Delta_0 = 4W\exp\left[-\sqrt{\ln(2W/\omega_D) + \ln^2 2 + \lambda^{-1}}\right]. \tag{12}$$

Аналогично рассмотренным выше для T_c предельным случаям (9) и (11) можно получить приближенные выражения для Δ_0 в случае достаточно широких зон

$$\Delta_0 = 2\omega_D\exp\{-[\lambda\ln(2W/\omega_D)^2]^{-1}\} \tag{13}$$

и для случая, когда притяжение осуществляется во всей зоне проводимости

$$\Delta_0 = 4W\exp(-\lambda^{-1/2}). \tag{14}$$

В обоих предельных случаях соотношение между Δ_0 и T_c остается классическим $\Delta_0=(\pi/\gamma)\,T_c$. В общем случае связь Δ_0 и T_c оказывается более сложной и имеет вид

$$\Delta_0 = (\pi/\gamma)\,T_c\exp\left[\sqrt{\ln^2(2W/\omega_D) - Q + \lambda^{-1}} - \sqrt{\ln^2(2W/\omega_D) + \ln^2 2 + \lambda^{-1}}\right], \tag{15}$$

причем показатель экспоненты всегда меньше нуля, так что $\Delta_0 < (\pi/\gamma)\, T_c$.

5. Исследуем теперь поведение щели $\Delta(T)$ в окрестности $T=T_c$. В этом случае

$$\Delta(T)=\pi \sqrt{\frac{8}{7\zeta(3)}} \left\{\frac{\ln(4\gamma W/\pi T_c)}{\ln(2eW/a\pi T_c)}\right\}^{1/2} T_c \sqrt{1-T/T_c}. \qquad (16)$$

Температурная зависимость $\Delta(T)$ в (16) вблизи $T \sim T_c$ имеет тот же характер, что и в случае трехмерного изотропного спектра, однако величина коэффициента при температурно-зависящем множителе определяется параметрами системы и зависит от отношения W/T_c. В пределе широких зон $W/T_c \gg 1$ (16) переходит в классический результат БКШ.

В окрестности $T=0$ имеем

$$\Delta(T)=\Delta_0\left[1-\sqrt{\frac{\pi T}{2\Delta_0}}\, \frac{\ln(8\gamma W^2/\Delta_0 T)}{\ln(4W/\Delta_0)} \exp(-\Delta_0/T_0)\right]. \qquad (17)$$

Видно, что (17) отличается от классического результата логарифмическими множителями и в пределе широких зон $W/\Delta_0 \gg 1$ переходит в результат БКШ

$$\Delta(T)=\Delta_0\left[1-\sqrt{\pi T/2\Delta_0}\, \exp(-\Delta_0/T)\right). \qquad (17а)$$

6. Обсудим полученные результаты и приведем оценки. Отметим, что в приведенных расчетах предполагалось, что $W > \omega_D$. Заметим также, что в рассматриваемой модели безразмерная константа связи имеет другой вид, чем в изотропной модели, и для получения достаточно высоких T_c в изотропной модели необходимы большие значения константы связи g.

Приведем оценки. Для La—Sr—Cu—O, используя $T_D \approx 400$ К [14] для $W \approx 1$ эВ [15] и полагая $\lambda^{-1} \approx 25$, получаем $T_c \approx 40$ К, $\Delta_0 \approx 72$ К. Для Y—Ba—Cu—O, используя $T_D \approx 300$ К [16] и $W \approx 2$ эВ [17] и полагая $\lambda^{-1} \approx 14$, получаем $T_c \approx 90$ К, $\Delta_0 \approx 170$ К.

Кратко обсудим влияние трехмерности на полученные результаты. Все особенности вида электронного спектра проявляются через плотность состояний $\nu(\xi)$. С учетом B_1, которая включает третью координату p_z в зависимости $\xi(\mathbf{p})$ в (2), вместо (4) имеем

$$\nu(\xi)=(\pi B v_c)^{-1} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[i(\xi/B)x]\, J_0^2(x)\, J_0(B_1 x/B)\, dx, \qquad (18)$$

где $J_0(x)$ — функция Бесселя. Используя интегральное представление функции Бесселя, получаем

$$\nu(\xi)=(\pi^3 B v_c)^{-1} \int_{-\pi}^{\pi} K\sqrt{1-((B_1 \sin\theta+\xi)/2B)^2}\, d\theta. \qquad (19)$$

Нас будет интересовать поведение плотности состояний вблизи ПФ при малых B_1, поэтому при условии $(B_1 \sin\theta + \xi/2B) \ll 1$ используем асимптотическое представление K-функции. Тогда получаем

$$\nu(\xi)=(\pi^3 B v_c)^{-1} \int_{-\pi}^{\pi} \ln\left|\frac{8B}{B_1\sin\theta+\xi}\right| d\theta = 2(\pi^2 B v_c)^{-1} \ln\left(\frac{16B}{|\xi|+\sqrt{\xi^2+B_1^2}}\right). \qquad (20)$$

Влияние параметра B_1 на результат будет пренебрежимо мало при условии $(B_1/\omega_D)^2 \ll 1$.

Заметим, что для рассматриваемого электронного спектра (2) могут возникнуть дополнительные вопросы, связанные со структурными неустойчивостями кристаллической решетки при выполнении нестинга для полузаполненной зоны (волны зарядовой и спиновой плотности). Как хорошо известно, в результате такой неустойчивости появляется энергетическая щель σ, и сосуществование такого пайерлсовского и сверхпроводящего переходов обсуждается уже давно, еще до открытия ВТСП [18-20]. Здесь следует лишь заметить, что учет трехмерности электронного спектра, а также учет интеграла перекрытия с неближайшими соседями (при этом появляется добавочное в энергетическом спектре (формула (2) слагаемое $\xi_1(\mathbf{p}) = -B_2 \cos(p_x a) \cos(p_y a)$) приводят к тому, что условие нестинга выполняется не для всей области ПФ [6]. Из [6] следует, что область $\Delta\mathbf{k}$, где нарушается нестинг при учете неближайших соседей, есть

$$\Delta K \backsim \frac{\pi}{a} \cos^{-1}\left\{\frac{\sqrt{B_2^2(B^2+\sigma^2) - B^2\sigma^2} - B^2}{B^2 - B_2^2}\right\}. \tag{21}$$

Пайерлсовская диэлектризация уменьшает температуру сверхпроводящего перехода T_c, при этом количественно это уменьшение зависит от соотношения параметров рассматриваемой модели. Существуют численные расчеты [21], из которых следует, что при $T_{c0}/T_{w0} < 1$ $T_c/T_{c0} \sim (T_{c0}/T_{w0})^n$, где n зависит от относительного вклада области ПФ Δk, в которой нестинг не выполняется; T_{w0}, T_{c0} — затравочная температура пайерлсовского и сверхпроводящего переходов соответственно.

Следует, однако, заметить, что в рассматриваемом случае $T_{w0} > T_{c0}$ помимо учета неближайших соседей, приводящего к нарушению нестинга, существует целый ряд различных механизмов, подавляющих диэлектрическую щель σ (например, учет немагнитных примесей [20]). Если же $T_{c0} > T_{w0}$, то сверхпроводимость подавляет возникновение волны зарядовой плотности (ВЗП). К тому же следует отметить, что до настоящего времени нет надежных экспериментальных доказательств существования[2] ВЗП в ВТСП.

Следует также указать, что при учете неближайших соседей энергетический спектр, включающий член $\xi_1(\mathbf{p})$, сохраняет особые точки, в которых скорость обращается в нуль. Это обстоятельство и приводит к логарифмической особенности в плотности состояний $\nu(\xi)$ и в данной работе ответственно за большие величины T_c. Действительно, с учетом B_2 имеем следующее выражение для скорости:

$$v = Ba\left[\sin^2 p_x a\,(1+\beta\cos p_y a)^2 + \sin^2 p_y a\,(1+\beta\cos p_x a)^2\right]^{1/2}, \tag{22}$$

где $\beta = B_2/B < 1$. Из (22) видно, что изоэнергетическая поверхность $\xi_0 = B_2$ проходит через те же особые точки соприкосновения ПФ и границы зоны Бриллюэна, в которых имеет место ванховская особенность (для (2) это имело место при $\xi_0 = 0$). Поскольку теперь $\xi_0 = B_2$, это означает, что особенность имеет место на ПФ, отвечающей заполнению, немного превышающему половинное (так как обычно $B_2/B \ll 1$). Для этого случая заполнения для плотности состояний $\nu(\xi)$ вместо (4) получаем следующее выражение:

$$\nu(\xi) = 2(\pi^2 B v_c)^{-1}\left[1 - (\xi B_2/B^2)^2\right]^{-1/2} K\left(\sqrt{1 - (\xi - B_2)^2/4(B^2 - \xi B_2)}\right), \tag{23}$$

которое имеет логарифмическую особенность при $\xi_0 = B_2$. Поэтому приведенные в работе результаты для T_c сохраняются и в этом случае, однако для зоны, заполненной несколько выше, чем наполовину.

В заключение отметим, что в настоящей работе показано, что в рассматриваемой модели электронного спектра получаются высокие значения T_c для достаточно малых значений константы связи.

Список литературы

[1] Булаевский Л. П., Гинзбург В. Л., Собянин А. А. // ЖЭТФ. 1988. Т. 94. № 7. С. 355—375.

[2] Mattheiss L. F. // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 58. N 10. P. 1028—1030.

---

[2] Структурный фазовый переход в ВТСП обусловлен, по-видимому, чисто фононной неустойчивостью [22].

[3] Jorgensen J., Schüttler H. B., Hink D. E. e. a. // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 58. N 10. P. 1024—1027.
[4] Mattis D. C. // Phys. Rev. 1987. V. B36. N 1. P. 745—747.
[5] Anderson P. W., Zou Z. // Phys. Rev. Lett. 1988. V. 60. N 2. P. 132—135.
[6] Machida K., Kato M. // Phys. Rev. 1987. V. B 36. N 1. P. 854—856.
[7] Горьков Л. П., Копнин Н. П. // УФН. 1988. Т. 156. № 1. С. 117—135.
[8] Копелиович А. И. // ФНТ. 1988. Т. 14. № 11. С. 1222—1225.
[9] Антонов В. Н., Антонов Вл. Н., Барьяхтар В. Г. и др. // ЖЭТФ. 1989. Т. 95. № 2. С. 732—741.
[10] Абрикосов А. А. Основы теории металлов. М., 1987. 520 с.
[11] Гейликман Б. Т., Крейсин В. З. // ФТТ. 1963. Т. 5. № 12. С. 3549—3559.
[12] Anderson P. // J. Phys. Chem. Sol. 1959. V. 11. N 1. P. 26—30.
[13] Хохенберг П. // ЖЭТФ. 1963. Т. 45. № 4. С. 1208—1217.
[14] Walter U., Shewin M. S., Stacy A. e. a. // Phys. Rev. 1987. V. B 35. N 10. P. 5327—5329.
[15] Setsuko Tajima, Shin-ichi Uchida e. a. // Jpn. J. Appl. Phys. 1987. V. 26. P. 432.
[16] Головашкин А. И., Данилов В. А., Иваненко О. М. и др. // Письма в ЖЭТФ. 1987. Т. 46. № 7. С. 273—275.
[17] Siraishi K., Oshiyama A. // Jpn. J. Appl. Phys. 1987. Suppl. V. 26. N 3. P. 983—985.
[18] Проблема высокотемпературной сверхпроводимости / Под ред. В. Л. Гинзбурга, Д. А. Киржница. М., 1977. 400 с.
[19] Kopaev Y. V., Rusinov A. I. // Phys. Lett. A. 1987. V. 121. N 6. P. 300—304.
[20] Кон Л. З., Москаленко В. А., Табакарь В. П. // СФХТ. 1989. Т. 2. № 5. С. 5—10.
[21] Machida K. // J. Phys. Soc. Jap. 1984. V. 53. N 2. P. 712—720.
[22] Boni P., Axe J. D. // Phys. Rev. 1988. V. B 38. N 1. P. 185—194.

Институт прикладной физики
АН СССР
Горький

Поступило в Редакцию
17 июля 1989 г.
В окончательной редакции
11 июня 1990 г.