

$$dH_{c2}/dP|_{T=0} \approx 4T/\Gamma\text{Па},$$

что согласуется с экстраполяцией к $T=0$ экспериментальных значений ($dH_{c2}/dP \approx 5$ Т/ГПа).

Довольно распространены сейчас различные варианты модели сверхпроводимости локализованных пар (биполяронный механизм). В [4] предложена следующая зависимость H_{c2} от параметра решетки d и T_c :

$$H_{c2}(T) = 6\Phi_0 \tau / \pi d^2, \quad (2)$$

где $\tau = (T_c - T)/T_c$, Φ_0 — квант потока. Оценка по этой формуле величины H_{c2} дает значение $2 \cdot 10^3$ Т при $T=30$ К, что, очевидно, не согласуется с имеющимися ныне результатами. Соответственно БП, вычисленная по формуле (2), равна ≈ 1500 Т/ГПа, а экспериментальная 0.6 Т/ГПа (при $T=30$ К).

Другой вариант биполяронной модели сверхпроводимости [5] дает выражение для H_{c2} в виде

$$H_{c2} = \Phi_0 (1 - t^{3/2})^{3/2} / 2\pi K^2 (l/n)^{1/2} t^{3/2} \quad (3)$$

(в «грязном» пределе), где $t = T/T_c$, l — длина свободного пробега, n — концентрация биполяронов, что позволяет оценить БП $d \ln H_{c2}/dP$: 0.3 и 1 ГПа⁻¹ соответственно для 25 и 30 К (используя экспериментальные значения сжимаемости [6] и БП $d \ln T_c/dP$), что согласуется с нашими экспериментальными значениями (соответственно 0.5 и 0.7 ГПа⁻¹). Эта модель, кроме того, позволяет объяснить экспериментально наблюдаемый знак кривизны зависимости $H_{c2}(T)$ вблизи T_c ($d^2 H_{c2}/dT^2 > 0$), что, возможно, имеет альтернативное объяснение, основанное на предположении о неоднородности образцов.

Таким образом, полученные в настоящей работе экспериментальные результаты согласуются с оценками по теории БКШ и биполяронной модели сверхпроводимости.

Л и т е р а т у р а

- [1] Griessen R. Phys. Rev. B, 1987, vol. 36, N 10, p. 5284—5290.
- [2] Будько С. Л., Гапотченко А. Г., Ицкевич Е. С. и др. ФТТ, 1986, т. 28, № 6, с. 1920—1922.
- [3] Werthamer N. R., Helfand E., Hohenberg P. C. Phys. Rev., 1966, vol. 147, N 1, p. 295—302.
- [4] Булаевский Л. Н., Собянин А. А., Хомский Д. И. ЖЭТФ, 1984, т. 87, № 4, с. 1490—1500.
- [5] Alexandrov A. S., Ranninger J., Robaszkiewicz S. Phys. Rev. B, 1986, vol. 33, N 7, p. 4526—4542; Александров А. С. Письма в ЖЭТФ, 1987, т. 46. Приложение, с. 128—131.
- [6] Takahashi H. et al. In: Proc. 18 th Conf. Low Temp. Phys. Kyoto, 1987, pt 2, p. 1109.

Институт физики
высоких давлений АН СССР
Троицк
Московская область

Поступило в Редакцию
20 июня 1988 г.

О КИНЕМАТИЧЕСКОМ МЕХАНИЗМЕ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ В СИСТЕМЕ p - d -ЭЛЕКТРОНОВ

Р. О. Зайцев, В. А. Иванов, Ю. В. Михайлова

Описание электронной структуры оксидов меди в рамках модели Хаббарда [1] содержит предположение о полностью заполненной $2p$ -оболочке O^{2-} и недозаполненной $3d$ -оболочке Cu^{2+} . При этом d -электроны туннелируют через возбужденные состояния кислорода, энергия которых

считается выше и 1-частичных, и полярных состояний $3d$. В настоящей работе мы отказываемся от этого предположения и фактически изучаем возможность расположения 1-частичных p -состояний внутри хаббардовской энергетической щели. Мы изучаем сверхпроводимость в более реалистической модели Эмери [2], когда задан интеграл перескока t между соседними ионами меди и кислорода, которые образуют двумерные слои CuO_2 с гамильтонианом

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}', \sigma, \lambda} t_{\lambda}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') (\hat{p}_{\mathbf{r}\sigma}^{\dagger}(\lambda) \hat{a}_{\mathbf{r}'\sigma} + \text{h. c.}) + \varepsilon_p \sum_{\mathbf{r}, \sigma, \lambda} \hat{p}_{\mathbf{r}\sigma}^{\dagger}(\lambda) \hat{p}_{\mathbf{r}\sigma}(\lambda) + \varepsilon_d \sum_{\mathbf{r}, \sigma} \hat{a}_{\mathbf{r}\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{r}\sigma}. \quad (1)$$

Здесь $\hat{p}_{\mathbf{r}\sigma}^{\dagger}(\lambda)$ — операторы рождения дырочных $\lambda=x, y$ -возбуждений в $2p^6$ -оболочке O^{2-} ; $\hat{a}_{\mathbf{r}\sigma}^{\dagger}$ — операторы рождения дырочных $3d(x^2-y^2)$ -возбуждений в $3d^{10}$ -оболочке Cu^{2+} в ячейке \mathbf{r} с проекцией спина σ . Пренебрегая переносом p_x и p_y возбуждений в направлениях y и x , флуктуациями и эффектами рассеяния, получаем энергии 1-частичных возбуждений, формирующих зоны

$$\xi_{\mathbf{p}}^{(\pm)} = \pm \left(\frac{r^2}{4} + f_p f_d t_p^2 \right)^{1/2} - \mu, \quad t_p^2 = 2t^2 (2 - \cos p_x - \cos p_y). \quad (2)$$

В (2) энергетическая раздвижка p - и d -зон $r = \varepsilon_p - \varepsilon_d$, химпотенциал $2\mu = \varepsilon_p + \varepsilon_d$, а факторы f_p, d заданы средними числами недозаполнения $2p^6$ - и $3d^{10}$ -оболочек: n_p и n_d . Валентность (степень окисления) кислорода равна $n_p - 2$, где $f_p = 1 - 3/4 \cdot n_p$,

$$n_p = f_p \left[3n_F \left(\frac{r}{2} - \mu \right) + \sum_{\mathbf{p}, k=\pm} a_{\mathbf{p}}^{(k)} n_F(\xi_{\mathbf{p}}^{(k)}) \right],$$

$$a_{\mathbf{p}}^{(\pm)} = 1/2 \cdot [1 \pm r(r^2 + 4f_p f_d t_p^2)^{1/2}], \quad (3)$$

$n_F(\varepsilon)$ — распределение Ферми.

Если p -состояния находятся на уровне Ферми нижней p -подзоны Хаббарда, $n_d < 1$, то валентность меди равна $1 + n_d < 2$ и

$$n_d = 2f_d \sum_{\mathbf{p}, k=\pm} a_{\mathbf{p}}^{(-k)} n_F(\xi_{\mathbf{p}}^{(k)}). \quad (4)$$

Если p -состояния расположены на уровне Ферми верхней хаббардовской подзоны, $1 < n_d < 2$, то валентность меди составляет $1 + n_d > 2$ и

$$n_d = 1 + f_d \sum_{\mathbf{p}, k=\pm} a_{\mathbf{p}}^{(-k)} n_F(\xi_{\mathbf{p}}^{(k)}). \quad (5)$$

Температура сверхпроводящего перехода определяется обычным образом [3] из условия разрешимости однородной системы уравнений на 2-частичные вершинные части, $T_c \propto t \exp(-1/\lambda)$. После перехода к Х-операторам Хаббарда эффективная константа λ определяется всевозможными борновскими амплитудами кинематического взаимодействия (см. рис. 1 и [4]). В пределе бесконечного отталкивания электронов в каждом узле имеем

$$\lambda = g \sum_{\mathbf{p}} \delta(\xi_{\mathbf{p}}), \quad g = \varepsilon_p \varepsilon_d (\pm 2f_p \varepsilon_p - f_d \varepsilon_d) / 4\mu^2 f_p f_d. \quad (6)$$

Верхний и нижний знаки относятся к верхней ($1 < n_d < 2$) и нижней ($n_d < 1$) d -подзонам Хаббарда. Сверхпроводимость осуществляется при условии $g > 0$; соответствующая фазовая диаграмма изображена на рис. 2.

В нижней зоне $\xi_{\mathbf{p}}^{(-)}$ для малых заполнений n_p и n_d сверхпроводимости нет из-за сильного короткодействующего отталкивания. В заполненной нижней зоне всегда $g > 0$ и сверхпроводимость существует при всех $\mu > |r|/2$

$$4(8 - 5n_d) / (32 - 19n_d) < n_p < 1. \quad (7)$$

В этой области все $p-p$ и $d-d$ амплитуды рассеяния отрицательны: с ростом n_p и n_d температура сверхпроводящего перехода имеет максимум.

Если валентность меди больше двух, $n_d > 1$, сверхпроводимость существует при заполнении и $\xi_p^{(-)}$, и $\xi_p^{(+)}$ зон. При заполнении зоны $\xi_p^{(-)}$, когда $\mu < -|r|/2$,

$$0 < n_p < 4(2 - n_d)/(6 + n_d). \quad (8)$$

Здесь сверхпроводимость осуществляется в основном кинематическим

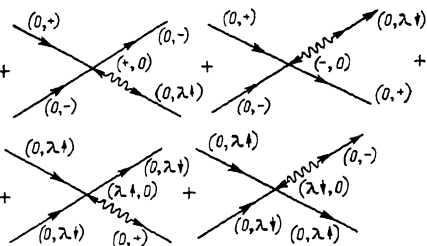


Рис. 1. Борновские амплитуды кинематического взаимодействия при $n_d < 1$.

Для верхней подзоны Хаббарда $n_d > 1$ следует произвести замену $(0, \pm) \rightarrow (\mp, 2)$.

притяжением d -возбуждений. В то же время, $p-p$ амплитуда рассеяния положительна, так что с ростом числа p -возбуждений их «отталкивательная» роль усиливается, ограничивая сверхпроводящую область справа снизу на рис. 2 неравенством (8).

Для $\mu > |r|/2$ заполняется $\xi_p^{(+)}$ зона

$$4(1 + n_d)/(3 + 5n_d) < n_p < 1, \quad 1.33 < n_d < 2. \quad (9)$$

Здесь $d-d$ амплитуда рассеяния положительна, так что сверхпроводимость возникает только для $n_p > 12/13$ по причине $p-p$ притяжения.

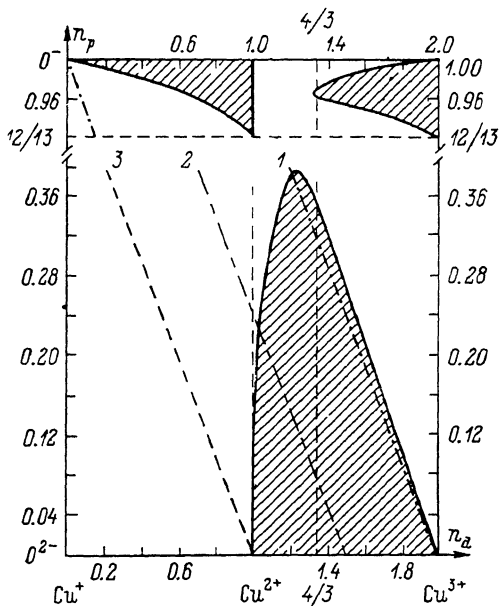


Рис. 2. Фазовая диаграмма плоской системы CuO_2 .

Заштрихованы области существования сверхпроводящего конденсата. Численное решение выполнено с прямоугольной загрузочной плотностью состояний $\nu_0(\epsilon) = \sum_p \delta(\epsilon - \epsilon_p) = \theta(1 - \epsilon^2)/2$. 1 — $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$, $2n_p + n_d = 2$; 2 — $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$, $2n_p + n_d = 3/2$; 3 — La_2CuO_4 , $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.5}$, $2n_p + n_d = 1$.

На рис. 3 при различных r представлена зависимость T_c от среднего заряда $Q = 2n_p + n_d - 3$ комплекса CuO_2 в слоях сверхпроводников. Для оксидных высокотемпературных сверхпроводников $\text{La}_{2-x}\text{M}^{2+}(\text{CuO}_2)_x\text{O}_{2-x}$, $\text{Y}^{3+}\text{Ba}_2(\text{CuO}_2)_x\text{Cu}^{2+}\text{O}_{3-x}$ и $\text{Bi}_2^{3+}\text{Sr}_{2-x}\text{Ca}_x(\text{CuO}_2)_x\text{O}_{5-x}$, заряд Q принимает значения $x - 2$, $-3/2 - \delta$ и $-1 - \delta'$. В рамках предположенной выше валентности ионов вне CuO_2 удается получить T_c^{max} при $Q = -1.6 \div -1.8$, что согласуется с экспериментом: $x \sim 0.2$, $\delta \sim 0.13$ [5], $\delta' \sim 0.7 \div 0.8$ [6].

При $T < T_c$ уравнения сверхпроводимости изучаемой системы содержат аномальные собственно-энергетические части Δ_p и Δ_d в виде $\Delta = (\epsilon_p \Delta_d + \epsilon_d \Delta_p) / 2\mu$. Энергия основного состояния E_0 обычным образом выражается через $\Delta (T=0) = \Delta_0$ и плотность состояний на уровне Ферми ρ

$$E_0 = -\rho \Delta_0^2 / 2, \quad \rho = \frac{1}{V} \sum_p \delta(\xi_p). \quad (10)$$

Таким образом, резкая зависимость T_c от заполнения p - и d -состояний обязана своим происхождением кинематическому взаимодействию, которое вблизи края зоны Бриллюэна формирует отрицательную амплитуду рассеяния возбуждений. С увеличением параметра $r = \epsilon_p - \epsilon_d$ влияние p -электронов ослабевает, что при $n_p < 0.39$ увеличивает, а при $n_p > 0.92$ уменьшает T_c . Этот эффект приводит к асимметрии фазовой диаграммы относительно преобразования частично-дырочной симметрии $n_d \rightleftharpoons 2 - n_d$ по d -электронам. В этом состоит основная особенность изучаемой модели

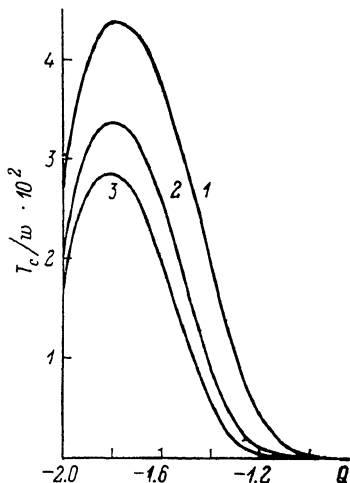


Рис. 3.

r : 1 — 0.3 w , 2 — 0.1 w , 3 — 0. С увеличением параметра $r = \epsilon_p - \epsilon_d$ влияние p -электронов ослабевает, что приводит к увеличению T_c при заданном заряде комплекса $(\text{CuO}_2)_x^Q$. $Q = 2n_p + n_d - 3$, w — полуширина прямоугольной плотности состояний.

(1) по сравнению с классической моделью Хаббарда. Предельный переход к [1] удается получить для самых больших $\epsilon_p \gg U$, где восстанавливается частично-дырочная d -симметрия, а эффективный интеграл перескока равен $t_p^2 f_p / \epsilon_p$.

Авторы благодарят С. Т. Беляева и А. А. Левина за критику и обсуждение результатов.

Л и т е р а т у р а

- [1] Hubbard J. Proc. Roy. Soc., 1963, vol. 276, N A1365, p. 238—257.
- [2] Emery V. J. Phys. Rev. Lett., 1987, vol. 58, N 26, p. 2794—2797.
- [3] Горьков Л. П. ЖЭТФ, 1958, т. 34, № 3, с. 735—746.
- [4] Зайцев Р. О., Иванов В. А. ФТТ, 1987, т. 29, № 8, с. 2554—2557.
- [5] Sreedhar K., Ramakrishnan T. V., Rao C. N. R. Sol. St. Commun., 1987, vol. 63, N 9, p. 835—837.
- [6] Subramanian M. A., Torardi C. C., Calabrese J. C. et al. Science, 1987, vol. 239, N 4843, p. 1015—1017.

Институт общей и неорганической химии им. Н. С. Курнакова АН СССР
Москва

Поступило в Редакцию
7 апреля 1988 г.
В окончательной редакции
21 июня 1988 г.