

Влияние разупорядочения на критическую температуру d -волновых сверхпроводников с малой длиной когерентности

© И.А. Семенихин

Физико-технологический институт Российской академии наук,
117218 Москва, Россия

E-mail: isemenihin@mail.ru

(Поступила в Редакцию 12 января 2004 г.)

Посредством численного моделирования исследовано влияние атомного разупорядочения на критическую температуру d -волновых сверхпроводников с малой длиной когерентности. Расчеты проводились с помощью метода Боголюбова–Де Жена, что позволило учесть пространственную неоднородность параметра сверхпроводящего порядка. Показано, что такой подход позволяет объяснить наблюдаемое на эксперименте более медленное, чем предсказывает теория Абрикосова–Горькова, уменьшение критической температуры при разупорядочении, а также квазилинейную зависимость критической температуры от концентрации дефектов.

Работа выполнена при поддержке Министерства промышленности, науки и технологии РФ (грант № 40.012.1.1.1357).

1. Введение

Механизм воздействия примесей и дефектов на высокотемпературные сверхпроводники (ВТСП) с анизотропным параметром сверхпроводящего порядка $\Delta(\mathbf{k})$ (\mathbf{k} — волновой вектор) до сих пор остается до конца не выясненным. Для сверхпроводников с произвольным типом симметрии $\Delta(\mathbf{k})$ известна следующая теоретическая зависимость, связывающая критическую температуру T_c и время релаксации носителей на немагнитных примесях и дефектах τ , полученная в приближении теории БКШ в рамках подхода Абрикосова–Горькова [1]:

$$\ln\left(\frac{T_{c0}}{T_c}\right) = \chi \left[\Psi\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{4\pi T_c \tau}\right) - \Psi\left(\frac{1}{2}\right) \right], \quad (1)$$

где T_{c0} — величина T_c в отсутствие примесей, Ψ — дигамма-функция, коэффициент $\chi = 1 - \langle \Delta(\mathbf{k}) \rangle_{FS}^2 / \langle \Delta^2(\mathbf{k}) \rangle_{FS}$ характеризует степень анизотропии параметра порядка, $\langle \dots \rangle_{FS}$ означает усреднение по поверхности Ферми. В случае изотропного s -волнового спаривания $\Delta(\mathbf{k}) = \text{const}$, поэтому $\langle \Delta(\mathbf{k}) \rangle_{FS}^2 = \langle \Delta^2(\mathbf{k}) \rangle_{FS}$ и, следовательно, $\chi = 0$. Для сверхпроводника с d -волновым типом симметрии $\chi = 1$, поскольку $\langle \Delta(\mathbf{k}) \rangle_{FS} = 0$. При анизотропном s -волновом и смешанном ($s + d$ -волновом) типе симметрии величина χ принимает значения в интервале от 0 до 1, при этом чем больше степень анизотропии $\Delta(\mathbf{k})$, тем ближе χ к единице. Следует отметить, что выяснение вопроса о том, какой тип симметрии $\Delta(\mathbf{k})$ в действительности реализуется в ВТСП, является отдельной, достаточно важной проблемой, поскольку ее решение может помочь в определении механизма высокотемпературной сверхпроводимости. К настоящему времени установлена сильная анизотропия $\Delta(\mathbf{k})$, что отличает ВТСП от обычных низкотемпературных сверхпроводников. И хотя сейчас принято считать, что в ВТСП реализуется d -волновой тип симметрии $\Delta(\mathbf{k})$ [2], существуют

экспериментальные данные, в том числе полученные фазочувствительными методами, которые можно интерпретировать как свидетельствующие в пользу анизотропной s -волновой симметрии $\Delta(\mathbf{k})$ [3]. Имеет смысл также говорить о смешанном ($s + d$ -волновом) типе симметрии; при этом интерес представляют удельные веса, с которыми s -волновая и d -волновая компоненты входят в $\Delta(\mathbf{k})$.

На рис. 1 приведены графики зависимостей T_c/T_{c0} от $1/\tau T_{c0}$, рассчитанные по формуле (1) для различных значений χ . Заметим, что при $\chi = 0$ (изотропное s -волновое спаривание) примеси не влияют на T_c , тогда как при $\chi = 1$ (d -волновое спаривание) величина T_c обращается в нуль при критическом значении τ_c , определяемом из условия $1/\tau T_{c0} = 4\pi \cdot \exp(-\Psi(1/2)) \approx 1.76$. При $0 < \chi < 1$ величина T_c монотонно уменьшается с ростом $1/\tau T_{c0}$ тем быстрее, чем больше χ .

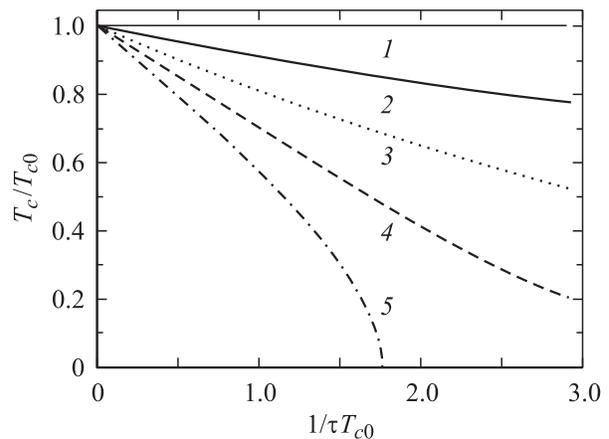


Рис. 1. Зависимость приведенной критической температуры T_c/T_{c0} от $1/\tau T_{c0}$, рассчитанная по формуле (1) для различных значений χ : 1 — $\chi = 0$, 2 — $\chi = 0.25$, 3 — $\chi = 0.5$, 4 — $\chi = 0.75$, 5 — $\chi = 1.0$. T_{c0} — критическая температура в отсутствие беспорядка.

Между тем выражение (1) не объясняет имеющиеся экспериментальные данные (см., например, [4] и ссылки в [5]), которые свидетельствуют о намного более слабом влиянии примесей на T_c , чем это следует из (1) для d -волновых сверхпроводников. При этом T_c на эксперименте уменьшается с ростом концентрации дефектов (которая пропорциональна $1/\tau$) почти линейно [4,6], в то время как из формулы (1) следует отрицательная кривизна зависимости T_c/T_{c0} от $1/\tau T_{c0}$ для d -волновых сверхпроводников (рис. 1). Если следовать выражению (1), получится, что такое сравнительно медленное уменьшение T_c более соответствует сверхпроводникам, имеющим анизотропный s -волновой или смешанный ($s+d$)-волновой тип симметрии $\Delta(\mathbf{k})$. Для разрешения данного противоречия между теорией и экспериментом было предложено несколько подходов. Например, в работе [5] показано, что противоречие можно разрешить, оставаясь в рамках теории Абрикосова–Горькова, но полагая $\chi < 1$ и допуская наличие в образце магнитных примесей. В работе [6] экспериментальные данные по влиянию электронного облучения на T_c объяснены эффектами фазовых флуктуаций. В работе [7] показано, что наличие сингулярности в плотности состояний d -волновых сверхпроводников может ослабить влияние немагнитных примесей на T_c .

В настоящей работе предложен альтернативный вариант объяснения причин подобного разногласия между теорией и экспериментом. Известно, что уравнение (1) было получено без учета пространственной неоднородности параметра порядка, имеющейся в сверхпроводнике с примесями. Данное приближение справедливо в случае сверхпроводников с большой длиной когерентности ξ_0 , когда в пределах расстояний, на которых происходит изменение Δ , реализуется много различных примесных конфигураций. В этом случае можно работать с величинами, усредненными по конфигурациям примесей, как это и делается при выводе уравнений Абрикосова–Горькова для T_c . В то же время в сверхпроводниках с малой величиной ξ_0 , к которым относятся ВТСП, учет пространственной неоднородности Δ является крайне важным и, как показано в работе [8] на примере s -волновых сверхпроводников, может качественно влиять на поведение T_c при разупорядочении. В [9,10] показано, что учет неоднородности Δ приводит, вообще говоря, к ослаблению влияния примесей на T_c в сверхпроводниках с d -волновым спариванием.

Цель настоящей работы — детальное исследование влияния разупорядочения на критическую температуру сверхпроводников с малой длиной когерентности. Подробно изучен вопрос о том, как изменяется характер влияния примесей на T_c при переходе от сверхпроводников с большой ξ_0 (и низкой T_{c0}) к сверхпроводникам с малой ξ_0 (ВТСП). Для решения этой задачи использован подход Боголюбова–Де Жена, что позволило учесть пространственную неоднородность параметра порядка.

2. Описание модели

Для исследования влияния разупорядочения на критическую температуру d -волнового сверхпроводника будем использовать следующий модельный гамильтониан:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} - \mu \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma} + \sum_{i,\sigma} \varepsilon_i n_{i\sigma} + \sum_{i,j} V_{i,j} n_{i\uparrow} n_{j\downarrow}, \quad (2)$$

где $a_{i\sigma}^+$ и $a_{i\sigma}$ — операторы рождения и уничтожения электрона с проекцией спина σ на узле i двумерной квадратной решетки, $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}$, t — матричный элемент перескока, характеризующий кинетическую энергию электронов, $\langle \dots \rangle$ означает суммирование по ближайшим соседям, μ — химический потенциал. Диагональный примесный потенциал ε_i равномерно распределен в интервале $(-W/2, W/2)$. Вводимый с помощью ε_i диагональный андерсоновский беспорядок является аналогом немагнитных примесей и дефектов. Матричные элементы $V_{i,j}$ имеют вид

$$V_{i,j} = \begin{cases} V_0, & i = j, \\ V_1, & i \text{ и } j \text{ — ближайшие соседи,} \\ 0 & \text{в остальных случаях} \end{cases} \quad (3)$$

Потенциал $V_0 > 0$ описывает отталкивание электронов, находящихся на одном узле, а потенциал $V_1 < 0$ — притяжение электронов, находящихся на соседних узлах.

Отметим, что при таком выборе $V_{i,j}$ единственным отличием выражения (2) от часто используемой при моделировании ВТСП обобщенной модели Хаббарда [10,11] является то, что в гамильтониане (2) учтено взаимодействие электронов только с противоположными спинами, поскольку только они участвуют в образовании куперовских пар. Это непринципиальное упрощение сделано с целью сокращения объема вычислений при численных расчетах. Можно показать, что в рамках теории среднего поля учет членов вида $n_{i\uparrow} n_{j\uparrow}$ и $n_{i\downarrow} n_{j\downarrow}$, изменяет лишь выражение для энергии Хартри–Фока. Как будет ясно из дальнейшего обсуждения, это не должно сказаться на полученных результатах.

В рамках подхода Боголюбова–Де Жена [12] задача (2) сводится к решению задачи, описываемой эффективным гамильтонианом

$$H_{\text{eff}} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + \sum_{i,\sigma} (\varepsilon_i + U(\mathbf{r}_i) - \mu) n_{i\sigma} + \sum_i [\Delta(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) a_{i\uparrow}^+ a_{j\downarrow}^+ + \Delta^*(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) a_{j\downarrow} a_{i\uparrow}], \quad (4)$$

где

$$\Delta(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = V_{i,j} \langle a_{i\downarrow} a_{j\uparrow} \rangle \text{ и } U(\mathbf{r}_i) = \frac{1}{2} \sum_j V_{i,j} n_j \quad (5)$$

— параметр сверхпроводящего порядка и энергия Хартри–Фока на узле i соответственно, n_i — среднее

число электронов на узле i . Гамильтониан H_{eff} диагонализуется с помощью преобразования Боголюбова

$$\begin{aligned} a_{i\uparrow} &= \sum_n u_n(\mathbf{r}_i) \gamma_{n\uparrow} - v_n^*(\mathbf{r}_i) \gamma_{n\downarrow}^+, \\ a_{i\downarrow} &= \sum_n u_n(\mathbf{r}_i) \gamma_{n\downarrow} + v_n^*(\mathbf{r}_i) \gamma_{n\uparrow}^+, \end{aligned} \quad (6)$$

где γ_n^+ и γ_n — новые квазичастичные операторы, а амплитуды $u_n(\mathbf{r}_i)$ и $v_n(\mathbf{r}_i)$ получаются из уравнения

$$\begin{pmatrix} \hat{H}^N & \hat{\Delta} \\ \hat{\Delta}^* & -(\hat{H}^N)^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_n(\mathbf{r}_i) \\ v_n(\mathbf{r}_i) \end{pmatrix} = E_n \begin{pmatrix} u_n(\mathbf{r}_i) \\ v_n(\mathbf{r}_i) \end{pmatrix}, \quad (7)$$

где E_n — энергия квазичастичных возбуждений,

$$\hat{H}^N u_n(\mathbf{r}_i) = -t \sum_{\delta} u_n(\mathbf{r}_i + \delta) + (\varepsilon_i + U(\mathbf{r}_i) - \mu) u_n(\mathbf{r}_i), \quad (8)$$

$$\hat{\Delta} v_n(\mathbf{r}_i) = \sum_j \Delta(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) v_n(\mathbf{r}_j), \quad (9)$$

$\delta = \pm \hat{x}, \pm \hat{y}$ — векторы, соответствующие ближайшим соседям узла i .

Величины $\Delta(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$ и $U(\mathbf{r}_i)$ должны удовлетворять условиям самосогласования

$$\Delta(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = -V_{i,j} \sum_n u_n(\mathbf{r}_i) v_n^*(\mathbf{r}_j) (1 - f_n) - v_n^*(\mathbf{r}_i) u_n(\mathbf{r}_j) f_n, \quad (10)$$

$$U(\mathbf{r}_i) = \sum_j V_{i,j} \sum_n |u_n(\mathbf{r}_j)|^2 f_n + |v_n(\mathbf{r}_j)|^2 (1 - f_n), \quad (11)$$

где $f_n = 1/(1 + \exp(E_n/T))$ — функция распределения Ферми–Дирака (постоянную Больцмана здесь и далее полагаем равной единице). Химический потенциал определяется из уравнения для концентрации электронов

$$\begin{aligned} n_e &= \sum_i n_i/N \\ &= 2 \sum_{n,i} \left[|u_n(\mathbf{r}_i)|^2 f_n + |v_n(\mathbf{r}_i)|^2 (1 - f_n) \right] / N. \end{aligned} \quad (12)$$

Величина T_c находится подобно тому, как это подробно описано в работе [8]. В линейном приближении по Δ , справедливом при $T \rightarrow T_c$, из уравнений (7) и (10) можно получить

$$\begin{aligned} \Delta(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) &= -\frac{V_{i,j}}{2} \\ &\times \sum_{i_1, j_1} \Delta(\mathbf{r}_{i_1}, \mathbf{r}_{j_1}) \sum_{n,m} u_n(\mathbf{r}_i) u_m(\mathbf{r}_j) u_m^*(\mathbf{r}_{i_1}) u_n^*(\mathbf{r}_{j_1}) \\ &\times \frac{\text{th}(E_n/2T) + \text{th}(E_m/2T)}{E_n + E_m}, \end{aligned} \quad (13)$$

где $u(\mathbf{r}_i)$ и E_n являются решениями уравнений (7), (10), (11) для системы в нормальном состоянии, т.е. уравнения

$$\hat{H}^N u_n(\mathbf{r}_i) = E_n u_n(\mathbf{r}_i), \quad (14)$$

уравнения самосогласования

$$U(\mathbf{r}_i) = \frac{1}{2} \sum_j V_{i,j} n_j = \sum_{n,j} V_{i,j} |u_n(\mathbf{r}_j)|^2 f_n \quad (15)$$

и соответствующего уравнения на химический потенциал. При этом в отсутствие токов и магнитных полей значения $\Delta(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$, так же как и амплитуды $u_n(\mathbf{r}_i)$, можно выбрать вещественными. Величину T_c мы определяем как наибольшую температуру, ниже которой существуют ненулевые решения однородного уравнения (13).

Если пренебречь неоднородностью $\Delta(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$, то для средних значений диагональной (Δ_0) и недиагональной (Δ_1) компонент параметра порядка получим

$$\Delta_0 = \sum_i \Delta(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_i) / N, \quad (16)$$

$$\begin{aligned} \Delta_1 &= \sum_i \left(\Delta(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_i + \hat{x}) \mp \Delta(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_i + \hat{y}) \right. \\ &\left. + \Delta(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_i - \hat{x}) \mp \Delta(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_i - \hat{y}) \right) / 4N, \end{aligned} \quad (17)$$

где \hat{x} и \hat{y} — векторы, соответствующие ближайшим соседям по осям x и y соответственно. Знак „+“ отвечает s -волновому типу симметрии $\Delta(\mathbf{k})$, а знак „–“ — d -волновому. Данное различие в определении Δ_1 возникает из-за того, что в d -волновом сверхпроводнике, в отличие от s -волнового, матричные элементы $\Delta(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_i \pm \hat{x})$ и $\Delta(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_i \pm \hat{y})$ имеют противоположные знаки. В этом случае при переходе в квазиимпульсное представление получаются известные выражения для параметра порядка: $\Delta(\mathbf{k}) = \Delta_0 + 2\Delta_1(\cos(k_x) + \cos(k_y))$ для s -волнового типа симметрии Δ и $\Delta(\mathbf{k}) = 2\Delta_1(\cos(k_x) - \cos(k_y))$ для d -волнового. В приближении пространственного однородного Δ из (13) можно получить уравнения для компонент Δ_0 и Δ_1 , справедливые вблизи T_c ,

$$\begin{aligned} \Delta_0 &= -\frac{V_0}{2N} \sum_n (\Delta_0 + \Delta_1 a_{n,n}) \frac{\text{th}(E_n/2T)}{E_n}, \\ \Delta_1 &= -\frac{V_1}{8N} \sum_{n,m} a_{n,m} (\Delta_0 \delta_{n,m} + \Delta_1 a_{m,n}) \\ &\times \frac{\text{th}(E_n/2T) + \text{th}(E_m/2T)}{E_n + E_m}, \end{aligned} \quad (18)$$

где $a_{n,m} = \sum_i u_n(\mathbf{r}_i) (u_m(\mathbf{r}_i + \hat{x}) \mp u_m(\mathbf{r}_i + \hat{y}) + u_m(\mathbf{r}_i - \hat{x}) \mp u_m(\mathbf{r}_i - \hat{y}))$, $\delta_{n,m}$ — символ Кронекера, знак „+“ выбирается для сверхпроводника с s -волновым, а знак „–“ — для сверхпроводника с d -волновым типом симметрии Δ .

Из первого уравнения (18) видно, что при $V_0 > 0$ в случае d -волнового сверхпроводника мы всегда будем иметь нулевое значение диагональной компоненты Δ_0 . Интересно также отметить, что в данном приближении критическая температура d -волнового сверхпроводника не зависит от величины потенциала V_0 , определяющего отталкивание электронов, находящихся на одном узле. В случае же анизотропной s -волновой симметрии увеличение V_0 приводит к уменьшению T_c . Уравнения (18) будем использовать для нахождения T_c в приближении пространственно однородного Δ .

Для того чтобы сравнить результаты, полученные с учетом пространственной неоднородности параметра порядка, с рассчитанными по формуле (1), необходимо знать зависимость T_c от $1/\tau$, в то время как из (13) мы получаем зависимость T_c от W . Это потребует от нас нахождения зависимости $\tau(W)$, но, с другой стороны, упростит нашу задачу, поскольку, работая с зависимостью $T_c(1/\tau)$, а не с $T_c(W)$, мы освобождаемся от необходимости явно учитывать потенциал Хартри–Фока $U(\mathbf{r}_i)$. Для этого при расчете $T_c(W)$ и $\tau(W)$ будем считать $\varepsilon'_i = \varepsilon_i + U(\mathbf{r}_i)$ новым распределением примесей, которое задается так же, как мы раньше задавали ε_i , и будем рассчитывать T_c и τ обычным образом. Это позволит получить зависимость $T_c(1/\tau)$, но уже без явного учета потенциала $U(\mathbf{r}_i)$.

3. Результаты и их обсуждение

Остановимся сначала на выборе значения концентрации электронов n_e , при которой будут проводиться расчеты. На рис. 2 изображена расчетная зависимость T_c от n_e в отсутствие разупорядочения. Видно, что если $n_e \approx 1$ (половинное заполнение), то реализуется d -волновая симметрия Δ . При небольших концентрациях электронов (дырок) получаем сверхпроводник с анизотропной s -волновой симметрией Δ . Можно также отметить следующий интересный момент. Если взять значение n_e вблизи точки пересечения графиков критических температур d -волнового и анизотропного s -волнового сверхпроводников так, чтобы критическая температура d -волнового сверхпроводника была чуть больше s -волнового, то при добавлении примесей можно столкнуться с изменением симметрии параметра порядка с d -волновой на анизотропную s -волновую. Последнее может произойти из-за более сильного влияния примесей на T_c сверхпроводников, имеющих d -волновой тип симметрии Δ (рис. 1). Поскольку нашей целью является исследование сверхпроводников с d -волновой симметрией Δ , следует выбрать значение $n_e \approx 1$. В то же время нельзя выбрать n_e слишком близким к единице, так как при половинном заполнении теория среднего поля для двумерной решетки может дать неверные результаты [11]. Учитывая указанное выше, мы проводили расчеты при $n_e = 0.8$.

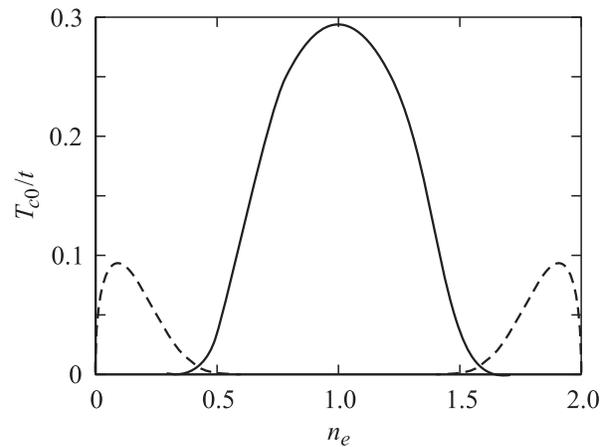


Рис. 2. Зависимость критической температуры T_{c0} от относительной концентрации электронов n_e в случае d -волновой (сплошная линия) и анизотропной s -волновой (штриховая линия) симметрии параметра порядка в отсутствие атомного разупорядочения ($W = 0$) при $V_0 = 0$, $V_1 = -1.6t$.

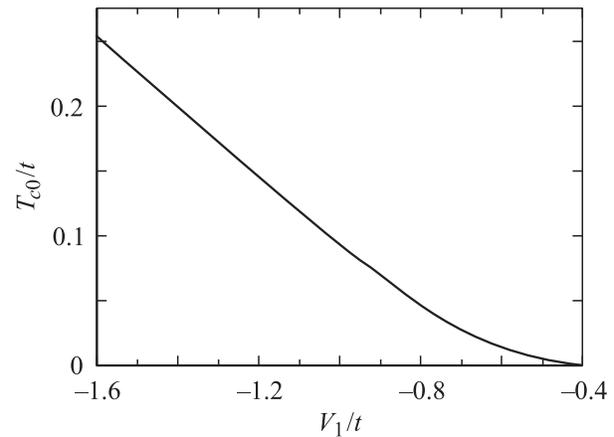


Рис. 3. Зависимость критической температуры T_{c0} от потенциала V_1 в случае d -волновой симметрии параметра порядка в отсутствие атомного разупорядочения ($W = 0$) при $n_e = 0.8$.

Перейдем теперь к выбору потенциала V_1 . При малых значениях $|V_1|$ критическая температура экспоненциально быстро убывает с ростом $|V_1|$ (рис. 3) и соответственно возрастает величина ξ_0 . Поскольку размер системы должен быть больше ξ_0 , это накладывает ограничение на $|V_1|$ снизу. С другой стороны, при больших $|V_1|$ теория среднего поля перестает работать [11]. Поэтому расчеты проводились при значениях V_1 в интервале от -0.8 до $-1.6t$. При этом случае ВТСП, где ξ_0 имеет порядок нескольких постоянных решетки, соответствуют значения $|V_1| > t$.

На рис. 4 изображена зависимость T_c/T_{c0} от величины беспорядка W для d -волнового сверхпроводника в случае пренебрежения пространственной неоднородностью параметра порядка, как это делалось в [1] при выводе выражения (1). Сопоставляя данную зависимость с кривой,

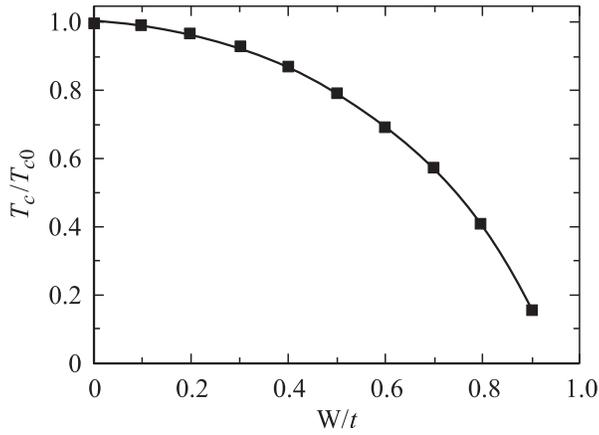


Рис. 4. Зависимость T_c/T_{c0} от степени разупорядочения W для d -волнового сверхпроводника в случае пренебрежения пространственной неоднородностью параметра порядка. Приведен результат расчета для одной произвольно выбранной конфигурации беспорядка на квадратной решетке из $N = 50 \times 50$ узлов при $V_0 = 0$, $V_1 = -0.8t$ и $n_e = 0.8$.

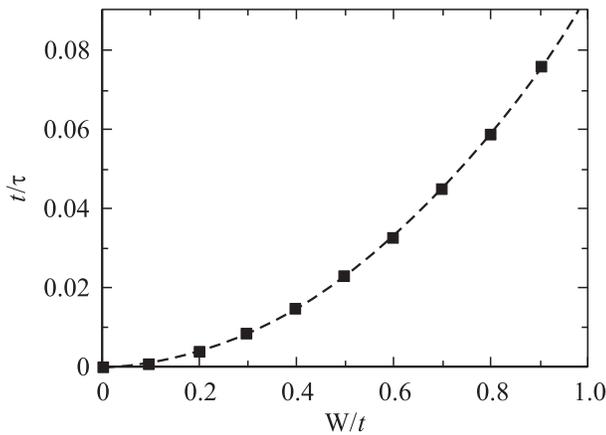


Рис. 5. Зависимость обратного времени релаксации носителей на примесях $1/\tau$ от степени разупорядочения W , найденная путем сопоставления расчетной зависимости T_c/T_{c0} от W и зависимости T_c/T_{c0} от $1/\tau T_{c0}$, см. (1). Приведен результат расчета для одной произвольно выбранной конфигурации беспорядка на квадратной решетке из $N = 50 \times 50$ узлов при $V_0 = 0$, $V_1 = -0.8t$ и $n_e = 0.8$.

построенной по формуле (1) при $\chi = 1$ (рис. 1), можно найти зависимость τ от W . Она изображена на рис. 5. Как и следовало ожидать, $1/\tau \sim W^2$. Коэффициент пропорциональности незначительно меняется от конфигурации к конфигурации, составляя около 0.1. Расчет зависимости τ от W проводился отдельно для каждой конфигурации беспорядка. Зная $\tau(W)$, можно получить зависимость T_c/T_{c0} от $1/\tau T_{c0}$ с учетом пространственной неоднородности Δ . На рис. 6 приведены результаты расчетов зависимости T_c/T_{c0} от $1/\tau T_{c0}$ при $V_0 = 0$ и $n_e = 0.8$ для различных значений V_1 . Штриховой линией на этом же рисунке изображена кривая, построенная по формуле (1) при $\chi = 1$ (чистая d -волновая симметрия).

Мы уже отмечали, что приближения, которые делаются при выводе (1), являются справедливыми при больших значениях ξ_0 и соответственно малых значениях $|V_1|$. Это соответствует приближению слабой связи теории БКШ. Поэтому при малых $|V_1|$ зависимости T_c/T_{c0} от $1/\tau T_{c0}$, рассчитанные с учетом и без учета пространственной неоднородности Δ , должны быть близки. Действительно, из рис. 6 видно, что для $V_1 = -0.8t$ кривая, построенная с учетом неоднородности Δ , очень близка к кривой, построенной по формуле (1) для однородного параметра порядка. При увеличении $|V_1|$ и соответственно уменьшении ξ_0 становится существенным учет пространственной неоднородности Δ . Видно, что при возрастании $|V_1|$ зависимость T_c/T_{c0} от $1/\tau T_{c0}$ все более отличается от рассчитанной по формуле (1). При этом T_c/T_{c0} уменьшается при разупорядочении гораздо медленнее, чем следует из формулы (1). Похожее поведение T_c наблюдается и в эксперименте [4,6]. Отметим также, что с ростом $|V_1|$ происходит изменение кривизны зависимости T_c/T_{c0} от $1/\tau T_{c0}$ с отрицательной на положительную. При $|V_1| \approx t$ зависимость T_c/T_{c0} от $1/\tau T_{c0}$ близка к линейной, наблюдаемой в эксперименте [4,6]. Таким образом, учет неоднородности параметра порядка при расчетах критической температуры d -волновых сверхпроводников с примесями приводит к качественному согласию с экспериментальными данными.

До сих пор мы ограничивались случаем, когда отталкивание электронов, находящиеся на одном узле, отсутствует ($V_0 = 0$). Это приводит к сохране-

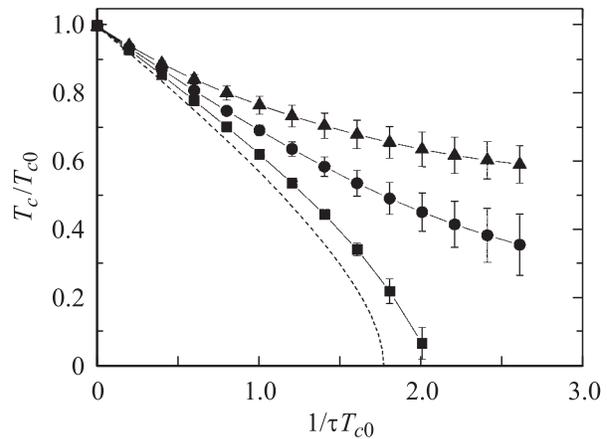


Рис. 6. Зависимость T_c/T_{c0} от $1/\tau T_{c0}$ для различных значений V_1 с учетом пространственной неоднородности параметра порядка. Расчеты проводились при следующих значениях параметров: $V_1 = -0.8t$, $N = 50 \times 50$ (квадраты); $V_1 = -1.2t$, $N = 28 \times 28$ (кружки); $V_1 = -1.6t$, $N = 28 \times 28$ (треугольники). Во всех случаях $V_0 = 0$ и $n_e = 0.8$. Для решетки из $N = 50 \times 50$ узлов усреднение производилось по 20 различным конфигурациям беспорядка, для решетки из $N = 28 \times 28$ узлов — по 40 конфигурациям. Штриховой линией изображена кривая, построенная по формуле (1) при $\chi = 1$ (d -волновая симметрия). Вертикальным линиям соответствует среднее квадратичное отклонение значений T_c/T_{c0} , обусловленное различием T_c для разных конфигураций беспорядка.

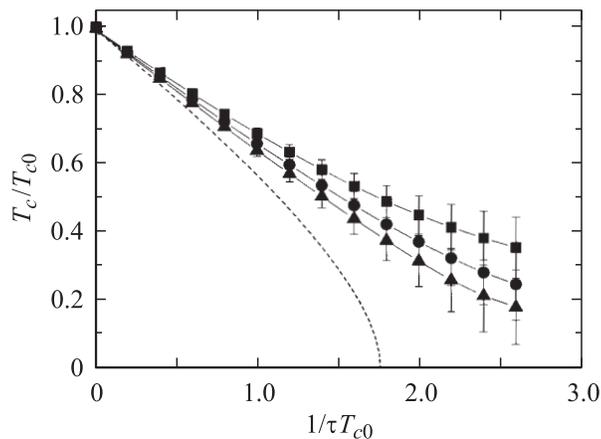


Рис. 7. Зависимость T_c/T_{c0} от $1/\tau T_{c0}$ для различных значений V_0 с учетом пространственной неоднородности параметра порядка. Расчеты проводились при следующих значениях параметров: $V_0 = 0$ (квадраты); $V_0 = 1.2t$ (кружки); $V_0 = 2.4t$ (треугольники). Во всех случаях $N = 28 \times 28$, $V_1 = -1.2t$ и $n_e = 0.8$. Усреднение производилось по 40 различным конфигурациям беспорядка. Штриховой линией изображена кривая, построенная по формуле (1) при $\chi = 1$ (d -волновая симметрия).

нию чистой d -волновой симметрии параметра порядка при разупорядочении, поскольку матричные элементы $\Delta(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$, отвечающие за s -волновую компоненту, всегда остаются равными нулю. Поэтому в \mathbf{k} -пространстве всегда $\Delta(\mathbf{k}) = 2\Delta_1(\cos(k_x) - \cos(k_y))$, где Δ_1 — среднее $\Delta(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$ по всем узлам, рассчитанное по формуле (17). Если при $V_0 = 0$ учет пространственной неоднородности Δ не приводит к изменению d -волновой симметрии Δ при разупорядочении ($\Delta(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = 0$ для любого узла i), то при $V_0 > 0$ имеем $\Delta(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \neq 0$. Казалось бы, это свидетельствует о возникновении смешанной ($s + d$)-волновой симметрии. Однако, как показывают расчеты, величина $\Delta(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$ является знакопеременной функцией координаты \mathbf{r}_i , поэтому в среднем $\Delta_0 = \langle \Delta(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \rangle \approx 0$.¹ Таким образом, d -волновая симметрия параметра порядка, по всей видимости, сохраняется при разупорядочении и для $V_0 > 0$.

На рис. 7 изображена зависимость T_c/T_{c0} от $1/\tau T_{c0}$ при различных значениях V_0 . Видно, что увеличение V_0 приводит к более быстрому уменьшению T_c/T_{c0} при разупорядочении. Поскольку изменение V_0 также меняет кривизну зависимости T_c/T_{c0} от $1/\tau T_{c0}$, близкая к наблюдаемой к эксперименте линейная зависимость T_c/T_{c0} от концентрации примесей может быть получена для целого ряда значений V_0 и V_1 . То, что, как и в случае $V_0 = 0$ (рис. 6), зависимость T_c/T_{c0} от $1/\tau T_{c0}$ для d -волновых сверхпроводников не является универсальной в отличие

¹ Поскольку численное моделирование проводится на решетке конечных размеров, мы не получаем здесь строго равенства $\Delta_0 = 0$. Но отношение Δ_0/Δ_1 очень мало (например, $\Delta_0/\Delta_1 < 10^{-3}$ для $N = 28 \times 28$, $W = 2.0t$, $V_1 = -1.2t$ и $V_0 = 2.4t$) и уменьшается при увеличении размеров решетки.

от предсказаний теории Абрикосова–Горькова (см. (1) и рис. 1) является следствием учета пространственной неоднородности Δ . Это также позволяет понять причину различного поведения T_c/T_{c0} в разных ВТСП при разупорядочении. С

4. Заключение

Суммируя полученные результаты, можно сделать следующие основные выводы.

1) Критическая температура d -волнового сверхпроводника с малой длиной когерентности уменьшается при разупорядочении медленнее, чем предсказывает теория Абрикосова–Горькова. При этом чем меньше длина когерентности, тем слабее разупорядочение влияет на критическую температуру и тем больше различие между теоретическими кривыми, построенными с учетом и без учета пространственной неоднородности параметра порядка. Это может быть причиной неоднократно отмечавшихся в литературе противоречий между предсказаниями теории Абрикосова–Горькова и экспериментальными данными по влиянию примесей и радиационных дефектов на критическую температуру ВТСП.

2) Для d -волновых сверхпроводников с малой длиной когерентности приведенная критическая температура T_c/T_{c0} не является универсальной функцией параметра $1/\tau T_{c0}$, что позволяет понять различное поведение T_c/T_{c0} в разных ВТСП при разупорядочении.

3) При учете пространственной неоднородности параметра порядка можно получить наблюдаемую на эксперименте линейную зависимость критической температуры от концентрации примесей.

Автор благодарит Л.А. Опеню за обсуждение и ценные замечания по данной работе.

Список литературы

- [1] A.A. Abrikosov. *Physica C* **214**, 1–2, 107 (1993).
- [2] C.C. Tsuei, J.R. Kirtley. *Rev. Mod. Phys.* **72**, 4, 969 (2000).
- [3] G.-M. Zhao. *Cond-mat/0305483*.
- [4] В.Ф. Елесин, К.Э. Коныхов, А.В. Крашенинников, Л.А. Опеню. *ЖЭТФ* **110**, 2, 731 (1996).
- [5] L.A. Openov. *Phys. Rev. B* **58**, 14, 9468 (1998).
- [6] F. Rullier-Albenque, H. Alloul, R. Tourbot. *Phys. Rev. Lett.* **91**, 047 001 (2003).
- [7] I. Grosu. *J. Supercond.* **13**, 1, 141 (2000).
- [8] И.А. Семенихин. *ФТТ* **45**, 9, 1545 (2003).
- [9] M.E. Zhitomirsky, M.B. Walker. *Phys. Rev. Lett.* **80**, 24, 5413 (1998).
- [10] M. Franz, C. Kallin, A.J. Berlinsky, M.I. Salkola. *Phys. Rev. B* **56**, 13, 7882 (1997).
- [11] R. Micnas, J. Ranninger, S. Robaszkiewicz. *Rev. Mod. Phys.* **62**, 1, 113 (1990).
- [12] П. Де Жен. *Сверхпроводимость металлов и сплавов*. Мир, М. (1968). 280 с.