

# Влияние разупорядочения на критическую температуру сверхпроводников с малой длиной когерентности

© И.А. Семенихин

Московский государственный инженерно-физический институт (технический университет),  
115409 Москва, Россия

E-mail: isemenihin@mail.ru

(Поступила в Редакцию 23 января 2003 г.)

Посредством численного моделирования исследовано влияние разупорядочения на критическую температуру  $s$ -волновых сверхпроводников с малой длиной когерентности. В качестве расчетной модели использовалась двумерная модель Хаббарда с притяжением. Расчеты проводились в рамках подхода Боголюбова–Де Жена, что позволило учесть пространственную неоднородность параметра порядка. Исследовано, насколько влияет учет пространственной неоднородности физических величин на полученные результаты. Показана возможность возрастания критической температуры при разупорядочении.

Согласно теореме Андерсона [1] немагнитные примеси слабо влияют на критическую температуру  $T_c$  обычных низкотемпературных сверхпроводников, что подтверждается экспериментальными данными. Такой же вывод следует из теории Абрикосова–Горькова [2] применительно к сверхпроводникам с изотропным  $s$ -волновым спариванием. Данный результат справедлив в случае сверхпроводников с большой длиной когерентности  $\xi_0$ , когда в пределах расстояний, на которых происходит изменение параметра порядка  $\Delta(\mathbf{r})$ , реализуется множество различных примесных конфигураций. В этом случае можно работать с величинами, усредненными по конфигурациям примесей, как это и делается при выводе уравнений Абрикосова–Горькова для критической температуры. Совершенно другая ситуация складывается в случае сверхпроводников с малой длиной когерентности. Здесь становится существенным учет пространственного изменения  $\Delta(\mathbf{r})$  в присутствии примесей, и теорема Андерсона уже не применима, за исключением, возможно, некоторых частных случаев [3]. На данный момент поведение критической температуры и параметра сверхпроводящего порядка в сверхпроводниках с малой длиной когерентности в присутствии разупорядочения до конца не изучено.

Одной из мотиваций нашего исследования стала работа [4], где показано, что учет пространственного изменения  $\Delta(\mathbf{r})$  ослабляет влияние эффекта распаривания на критическую температуру. При этом поправка к результатам теории Абрикосова–Горькова имеет порядок  $T_c/E_f$  и становится существенной в случае сверхпроводников с малой длиной когерентности. Наиболее интересным выводом, сделанным в этой работе, является, на наш взгляд, то, что небольшое количество немагнитных примесей может в случае изотропного  $s$ -волнового спаривания привести к увеличению критической температуры по сравнению с беспримесным случаем. Для проверки данного заключения нами проведено исследование влияния разупорядочения на критическую температуру сверхпроводника в рамках двумерной модели Хаббарда с притяжением. Численные расчеты были выполнены с использованием ме-

тода Боголюбова–Де Жена, который позволяет учесть пространственную неоднородность параметра порядка. Нашей целью было выяснить, насколько влияет учет пространственной неоднородности физических величин в сверхпроводнике с малой длиной когерентности на результаты расчетов  $T_c$ . На наш взгляд, это важный вопрос, поскольку многие теоретические подходы, включая теорию Абрикосова–Горькова, эту неоднородность не учитывают. Мы показали, что в  $s$ -волновых сверхпроводниках учет пространственной неоднородности  $\Delta(\mathbf{r})$  действительно приводит в некоторых случаях к повышению  $T_c$  при разупорядочении.

## 1. Описание модели

Для моделирования разупорядоченного сверхпроводника используем двумерную модель Хаббарда с притяжением и диагональным беспорядком

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} - \mu \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma} + \sum_{i,\sigma} \varepsilon_i n_{i\sigma} + V_0 \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (1)$$

где  $a_{i\sigma}^+$  и  $a_{i\sigma}$  — операторы рождения и уничтожения электрона с проекцией спина  $\sigma$  на узле  $i$  двумерной квадратной решетки,  $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}$ ,  $t$  — матричный элемент перескока, характеризующий кинетическую энергию,  $\langle \dots \rangle$  — означает суммирование по ближайшим соседям,  $\mu$  — химический потенциал,  $V_0$  — матричный элемент притяжения электронов на узле ( $V_0 < 0$ ). Примесный потенциал  $\varepsilon_i$  равномерно распределен в интервале  $(-W/2, W/2)$ . Вводимый с помощью  $\varepsilon_i$  беспорядок является аналогом немагнитных примесей и дефектов.

В рамках подхода Боголюбова–Де Жена [5] задача (1) сводится к решению задачи, описываемой эффективным гамильтонианом

$$H_{\text{eff}} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} - \mu \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma} + \sum_{i,\sigma} \varepsilon_i n_{i\sigma} + \sum_{i,\sigma} U(\mathbf{r}_i) n_{i\sigma} + \sum_i [\Delta(\mathbf{r}_i) a_{i\uparrow}^+ a_{i\downarrow}^+ + \Delta^*(\mathbf{r}_i) a_{i\downarrow} a_{i\uparrow}], \quad (2)$$

где

$$\Delta(\mathbf{r}_i) = |V_0| \langle a_{i\uparrow} a_{i\downarrow} \rangle, \quad U(\mathbf{r}_i) = \frac{V_0}{2} \sum_{\sigma} \langle n_{i\sigma} \rangle \quad (3)$$

— соответственно параметр сверхпроводящего порядка и энергия Хартри–Фока на узле  $i$ . Гамильтониан  $H_{\text{эф}}$  диагонализуется с помощью преобразования Боголюбова

$$\begin{aligned} a_{i\uparrow} &= \sum_n u_n(\mathbf{r}_i) \gamma_{n\uparrow} - v_n^*(\mathbf{r}_i) \gamma_{n\downarrow}^+, \\ a_{i\downarrow} &= \sum_n u_n(\mathbf{r}_i) \gamma_{n\downarrow} + v_n^*(\mathbf{r}_i) \gamma_{n\uparrow}^+, \end{aligned} \quad (4)$$

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

$$\begin{pmatrix} \hat{H}^N & \hat{\Delta} \\ \hat{\Delta}^* & -(\hat{H}^N)^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_n(\mathbf{r}_i) \\ v_n(\mathbf{r}_i) \end{pmatrix} = E_n \begin{pmatrix} u_n(\mathbf{r}_i) \\ v_n(\mathbf{r}_i) \end{pmatrix}, \quad (5)$$

где  $E_n$  — энергия квазичастичных возбуждений,  $\hat{H}^N u_n(\mathbf{r}_i) = -t \sum_{\delta} u_n(\mathbf{r}_i + \delta) + (\varepsilon_i - \mu + U(\mathbf{r}_i)) u_n(\mathbf{r}_i)$ ,  $\hat{\delta} = \pm \hat{x}, \pm \hat{y}$  — векторы, соответствующие ближайшим соседям,  $\hat{\Delta} u_n(\mathbf{r}_i) = \Delta(\mathbf{r}_i) u_n(\mathbf{r}_i)$ . Для  $v_i(\mathbf{r}_i)$  соотношения аналогичные. Потенциалы  $\Delta(\mathbf{r}_i)$  и  $U(\mathbf{r}_i)$  должны удовлетворять условиям самосогласования

$$\Delta(\mathbf{r}_i) = |V_0| \sum_n u_n(\mathbf{r}_i) v_n^*(\mathbf{r}_i) \text{th}(E_n/2k_B T), \quad (6)$$

$$U(\mathbf{r}_i) = V_0 \langle n_i \rangle / 2 = V_0 \sum_n |u_n(\mathbf{r}_i)|^2 f_n + |v_n(\mathbf{r}_i)|^2 (1 - f_n), \quad (7)$$

где  $f_n = 1/(1 + \exp(E_n/k_B T))$  — функция распределения Ферми–Дирака,  $n_i$  — среднее число электронов на узле  $i$ . Химический потенциал определяется из уравнения для концентрации электронов

$$n_e = \sum_i \langle n_i \rangle / N. \quad (8)$$

Система уравнений (5)–(7) на квадратной решетке  $L \times L$  с периодическими граничными условиями решается методом итераций. Выбирается первое приближение для  $\Delta(\mathbf{r}_i)$  и  $U(\mathbf{r}_i)$ , затем методом точной диагонализации уравнения (5) получаем  $u(\mathbf{r}_i)$ ,  $v(\mathbf{r}_i)$  и  $E_n$ , после чего из (6), (7) находим следующее приближение для  $\Delta(\mathbf{r}_i)$  и  $U(\mathbf{r}_i)$  и т.д. пока итерационный процесс не сойдется, т.е. разница между предыдущим и текущим значениями потенциалов  $\Delta(\mathbf{r}_i)$  и  $U(\mathbf{r}_i)$  на каждом узле  $i$  будет меньше заданной величины для нескольких следующих подряд итераций. После этого из (8) получаем среднюю концентрацию электронов. Если она отличается от заданного нами значения, то мы соответствующим образом изменяем химический потенциал и снова решаем систему (5)–(7), пока среднее число электронов в системе не станет равно заданному значению с соответствующей

точностью. Таким образом получаем значение параметра порядка при заданной температуре  $T$ . При увеличении температуры от  $T = 0$  абсолютное значение параметра порядка  $\Delta(\mathbf{r}_i)$  уменьшается и при критической температуре ( $T = T_c$ ) становится равным нулю на всех узлах  $\mathbf{r}_i$ . К сожалению, при приближении к  $T_c$  сходимость итерационного процесса (5)–(7) сильно ухудшается, и вблизи критической температуры данный метод практически перестает работать, так что значение  $T$ , при котором параметр порядка равен нулю, можно найти только экстраполяцией. Все это делает подобный подход мало эффективным для определения  $T_c$ . Можно предложить другой метод нахождения критической температуры [6]. При  $T \rightarrow T_c$  имеем  $\Delta(\mathbf{r}_i) \rightarrow 0$  и из (5)–(6) получается следующая система линейных уравнений на  $\Delta(\mathbf{r}_i)$ :

$$\begin{aligned} \Delta(\mathbf{r}_i) &= \frac{|V_0|}{2} \sum_j \Delta(\mathbf{r}_j) \sum_{n,m} u_n(\mathbf{r}_i) u_m(\mathbf{r}_i) u_n^*(\mathbf{r}_j) u_m^*(\mathbf{r}_j) \\ &\times \frac{\text{th}(E_n/2k_B T) + \text{th}(E_m/2k_B T)}{E_n + E_m}, \end{aligned} \quad (9)$$

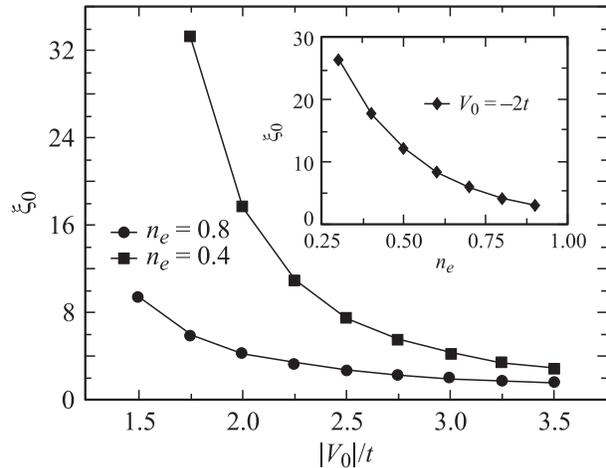
где  $u(\mathbf{r}_i)$  и  $E_n$  являются решением уравнений (5), (7), (8) для системы в нормальном состоянии, то есть уравнения

$$\hat{H}^N u_n(\mathbf{r}_i) = E_n u_n(\mathbf{r}_i), \quad (10)$$

уравнения самосогласования

$$U(\mathbf{r}_i) = V_0 \langle n_i \rangle / 2 = V_0 \sum_n |u_n(\mathbf{r}_i)|^2 f_n \quad (11)$$

и соответствующего уравнения на химический потенциал. Если взять начальное значение температуры несколько больше  $T_c$  и понижать затем  $T$ , то ненулевое

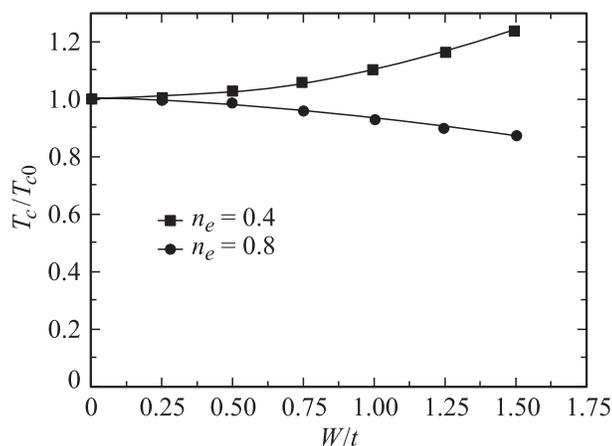


**Рис. 1.** Зависимость длины когерентности  $\xi_0$  от энергии межэлектронного взаимодействия  $V_0$  при концентрации электронов  $n_e = 0.8$  и  $0.4$ . На вставке показана зависимость  $\xi_0$  от  $n_e$  при  $V_0 = -2t$ . За единицу измерения  $\xi_0$  взята постоянная квадратной решетки.  $\xi_0$  определялась из соотношения  $\langle a(\mathbf{r}_i) a(\mathbf{r}_j) \rangle \sim 1/|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| \cdot \exp(-|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|/\xi_0)$ , справедливого при  $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| \gg \xi_0$  [8].

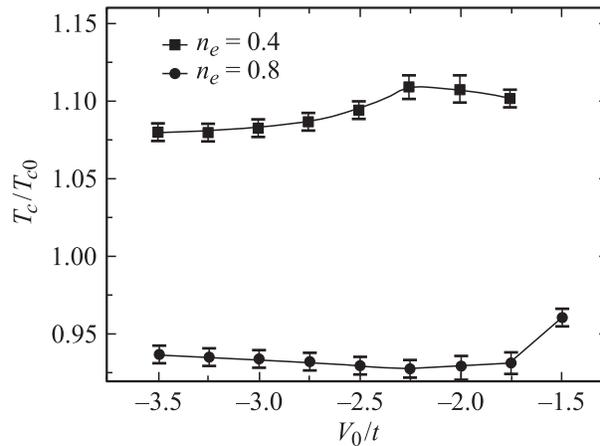
решение системы однородных уравнений (9) появится только начиная с  $T = T_c$ . Таким образом, критическую температуру можно найти из условия равенства нулю детерминанта (9). В нашей работе мы в основном использовали данный способ нахождения  $T_c$ , проводя в некоторых случаях проверку с помощью первого метода. Для расчетов мы брали следующие параметры:  $V_0 = -1.5t \text{—} -3.5t$ ,  $n_e = 0.4$  и  $0.8$ ,  $L = 20\text{—}50$ . Ограничение на  $L$  связано с быстрым ростом объема требуемых вычислений при увеличении размеров системы. Выбирая  $V_0$ , мы принимали во внимание то, что при больших по модулю значениях потенциала теория среднего поля перестает работать [7]. В то же время  $V_0$  не может быть слишком малым, так как размер нашей системы должен быть больше длины когерентности, которая при уменьшении  $V_0$  экспоненциально возрастает (рис. 1). При выборе средней электронной плотности  $n_e$  мы учитывали, что вблизи половинного заполнения ( $n_e = 1$ ) теория среднего поля для двумерной решетки дает неверные результаты [7], а при малых значениях  $n_e$  начинает резко возрастать длина когерентности (вставка к рис. 1). Поскольку при больших  $W$  результаты, полученные в рамках теории среднего поля, становятся менее достоверными [9], при выборе максимального значения  $W$  мы ограничились величиной  $W_{\max} = 1.5t$ .

## 2. Результаты и их обсуждение

На рис. 2 приведены результаты расчетов зависимости относительной критической температуры  $T_c/T_{c0}$  от величины  $W$ , определяющей степень беспорядка. Видно, что в то время как при концентрации электронов  $n_e = 0.8$  критическая температура убывает с увеличением беспорядка, при  $n_e = 0.4$  она возрастает. На рис. 3 приведены



**Рис. 2.** Зависимость относительной критической температуры  $T_c/T_{c0}$  от  $W$ , где  $T_{c0}$  — критическая температура в отсутствие беспорядка. Расчет проводился на квадратной решетке из  $N = 32 \times 32$  узлов с параметрами:  $V_0 = -2t$ ,  $n_e = 0.8$  и  $0.4$ ; усреднение производилось по 20 различным конфигурациям беспорядка. Среднее квадратичное отклонение меньше размера символа.



**Рис. 3.** Зависимость относительной критической температуры  $T_c/T_{c0}$  от энергии межэлектронного взаимодействия  $V_0$  при  $W = 1.0t$ , где  $T_{c0}$  — соответствующая критическая температура в отсутствие беспорядка. Поскольку при увеличении  $V_0$  уменьшается длина когерентности, для ускорения расчетов взяты меньшие размеры решетки, которые варьировались следующим образом: для  $n_e = 0.8$   $N = 40 \times 40$  ( $V_0 = -1.5t$ ),  $32 \times 32$  ( $V_0 = -1.75t \text{—} -2.25t$ ),  $24 \times 24$  ( $V_0 = -2.5t$ ) и  $20 \times 20$  ( $V_0 = -2.75t \text{—} -3.5t$ ); для  $n_e = 0.4$   $N = 50 \times 50$  при  $V_0 = -1.75t$ , остальные размеры такие же, как в случае  $n_e = 0.8$ . Усреднение во всех случаях проводилось по 20 различным конфигурациям беспорядка.

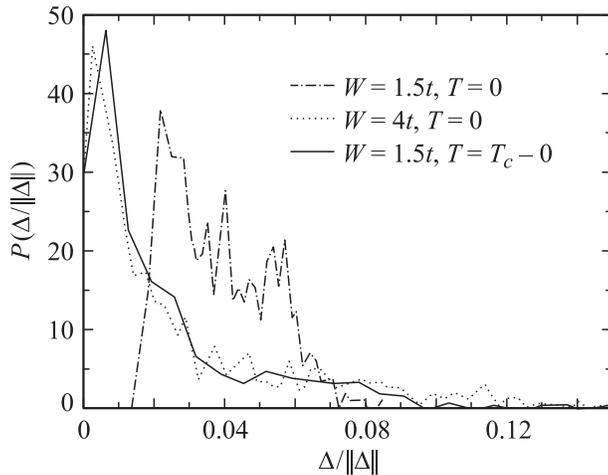
зависимости  $T_c/T_{c0}$  от величины энергии межэлектронного взаимодействия  $V_0$  при  $W = t$ . Видно, что  $T_c/T_{c0}$  в случае  $n_e = 0.4$  все время остается больше 1, при этом разупорядочение оказывает наибольшее влияние на  $T_c$  при  $|V_0| \approx 2.25t$ . При  $|V_0| < 1.5t$  длина когерентности превышает размеры системы, поэтому проверить, насколько справедлива теорема Андерсона, в области низких  $T_c$ , к сожалению, не удастся. Из приведенных результатов следует, что  $T_c$  при определенном выборе параметров может возрастать в результате разупорядочения.

Здесь следует, однако, заметить, что хотя в отсутствие беспорядка критическая температура может быть найдена по обращению в нуль параметра порядка<sup>1</sup>, в разупорядоченном сверхпроводнике ситуация менее однозначна. Например, моделирование перехода сверхпроводник-изолятор при нулевой температуре показывает, что параметр порядка сохраняет ненулевое значение даже когда образец становится изолятором [11]. В процессе этого перехода образец разбивается на множество отдельных слабо связанных областей, в которых  $\Delta(\mathbf{r}) \neq 0$ , окруженных областями с  $\Delta(\mathbf{r}) \approx 0$ . И хотя среднее значение  $\Delta$  не равно нулю, образец в целом уже не является сверхпроводником. Иными словами, в данном случае условие  $\sum_i \Delta(\mathbf{r}_i) \neq 0$  перестает играть

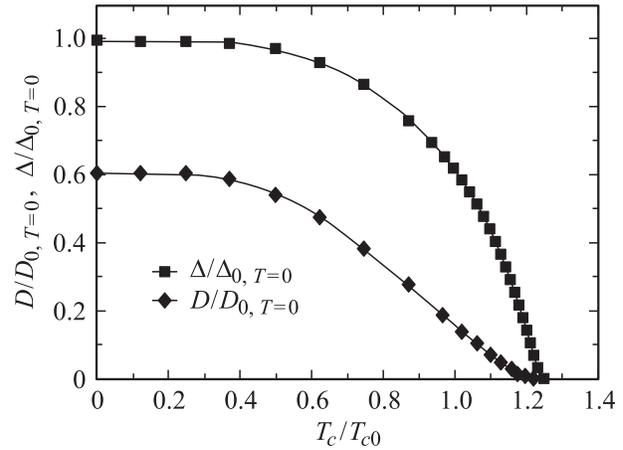
<sup>1</sup> При выбранном диапазоне изменения потенциала взаимодействия  $V_0$  температура образования куперовских пар, т.е. температура, при которой параметр порядка приобретает ненулевое значение, и температура их конденсации практически совпадают [10].

свою роль критерия наличия сверхпроводящего состояния. О сверхпроводящем переходе можно судить по отклику на приложенное магнитное поле, а именно по величине сверхтекучей плотности  $\rho_s$  [12], которая при сверхпроводящем переходе обращается в нуль. Это является более надежным критерием сверхпроводимости, поскольку дает информацию о состоянии образца в целом. При  $T = T_c$  происходит переход сверхпроводник–металл в отличие от перехода сверхпроводник–изолятор при  $T = 0$ . Из рис. 4 видно сходство в поведении параметра порядка при этих переходах. Видно, что в обоих случаях  $\Delta(\mathbf{r}_i)$  уменьшается неравномерно. Такое неравномерное уменьшение  $\Delta(\mathbf{r}_i)$  в случае перехода сверхпроводник–изолятор может служить признаком начала распада образца на сверхпроводящие и нормальные области. Таким образом, в случае перехода сверхпроводник–металл могут возникнуть некоторые сомнения относительно надежности определения  $T_c$  по равенству нулю параметра порядка.

Чтобы прояснить ситуацию, мы рассчитали критическую температуру для нескольких конфигураций примесей по отклику системы на магнитное поле. Обычно для расчета  $\rho_s$  используют формулу, полученную по теории возмущений с проведением усреднения по примесям [11,13,14]. В настоящей работе используется метод, позволяющий получить аналогичный результат для конкретной конфигурации беспорядка без усреднения. Как известно, при действии на сверхпроводник постоянного магнитного поля в сверхпроводнике возникают экранирующие это поле электрические токи (эффект Мейснера). В случае нормального состояния разупорядоченной системы незатухающие электрические токи не могут



**Рис. 4.** Функция распределения  $P$  нормированного параметра порядка  $\Delta(\mathbf{r}_i)/\|\Delta(\mathbf{r}_i)\|$  в случае  $T \rightarrow T_c$  (переход сверхпроводник–металл) при  $W = 1.5t$  (сплошная линия) и в случае сильного беспорядка  $W = 4t$  при  $T = 0$  (штриховая линия). Для сравнения дано распределение  $\Delta(\mathbf{r}_i)/\|\Delta(\mathbf{r}_i)\|$  при  $W = 1.5t$  и  $T = 0$  (штрих-пунктирная линия). Расчет проводился на квадратной решетке из  $N = 24 \times 24$  узлов с параметрами  $V_0 = -2.5t$  и  $n_e = 0.4$  для одной произвольно выбранной конфигурации беспорядка.



**Рис. 5.** Зависимость величин  $D/D_{0,T=0}$  и  $\Delta/\Delta_{0,T=0}$  от относительной температуры  $T/T_{c0}$ .  $D_{0,T=0}$  и  $\Delta_{0,T=0}$  — величины  $D$  и  $\Delta$  в отсутствие беспорядка при  $T = 0$  соответственно.  $T_{c0}$  — критическая температура в отсутствие беспорядка. Расчет проводился на квадратной решетке из  $N = 24 \times 24$  узлов с параметрами:  $V_0 = -2.5t$ ,  $W = 1.5t$  и  $n_e = 0.4$  для одной произвольно выбранной конфигурации беспорядка.

возникнуть. Поэтому, чтобы убедиться в том, что система находится в сверхпроводящем состоянии, достаточно показать, что слабое магнитное поле, приложенное перпендикулярно плоскости квазидвумерного образца, индуцирует электрический ток. Для того чтобы провести данный расчет, нужно учесть, что в присутствии магнитного поля, описываемого вектор-потенциалом  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ , матричный элемент  $t_{l,l+\hat{x}}$  в (1) будет иметь следующий вид [15]:

$$t_{l,l+\hat{x}}(\mathbf{A}) = t \cdot \exp\left(\frac{ie}{\hbar c} \int_{R_{l+\hat{x}}}^{R_l} \mathbf{A}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}\right), \quad (12)$$

или, если принять  $\hbar, c$ , а также постоянную решетки равными единице,  $t_{l,l+\hat{x}}(\mathbf{A}) = t \cdot \exp(ieA_x(\mathbf{r}_l))$ , где  $A_x(\mathbf{r}_l)$  — проекция вектор-потенциала  $\mathbf{A}$  на ось  $x$ . Выражение для соответствующей проекции плотности тока запишется в виде

$$j_x(\mathbf{r}_l) = iet \sum_{\sigma} \left( e^{ieA_x(\mathbf{r}_l)} a_{l+\hat{x},\sigma}^+ a_{l,\sigma} - e^{-ieA_x(\mathbf{r}_l)} a_{l,\sigma}^+ a_{l+\hat{x},\sigma} \right). \quad (13)$$

Вектор-потенциал представим в виде  $\mathbf{A} = H_z(-y, 0, 0)$ , где ось  $z$  перпендикулярна плоскости образца и начало координат совпадает с краем образца. Таким образом, экранирующий ток будет течь вдоль оси  $x$ . Возьмем периодические граничные условия по оси  $x$  и нулевые по  $y$ , так что образец получится свернутым в кольцо.<sup>2</sup> На рис. 5 приведены результаты расчета температурной зависимости отношения средней плотности тока

<sup>2</sup> Нулевые граничные условия по оси  $x$  приняты, чтобы исключить скачок вектор-потенциала  $\mathbf{A}$  на границе  $x = 0$ .

$J_x = (1/N) \cdot \sum_l \langle j_x(\mathbf{r}_i) \rangle$  к величине приложенного магнитного поля  $H_z$  при  $H_z \rightarrow 0$ . Данный расчет выполнен для одной из произвольно выбранных конфигураций беспорядка при  $W = 1.5t$ . Как видно из рисунка, величина  $D = \lim_{H_z \rightarrow 0} (J_x/H_z)$  становится равной нулю одновременно с параметром порядка. Таким образом, оба критерия определения критической температуры приводят к одинаковым результатам.

Итак, критическая температура действительно может повышаться в результате разупорядочения. При этом, как видно из рис. 1 и 3 для  $n_e = 0.4$ , эта тенденция сохраняется и в случае достаточно больших длин когерентности. Здесь следует отметить, что в настоящее время известны экспериментальные данные, свидетельствующие о подобном отношении  $T_c$ . Например, при добавлении к Ti примесей атомов переходных металлов наблюдается рост критической температуры, который нельзя объяснить простым изменением концентрации носителей [16]. Заметим, что переходные металлы в Ti, как было показано Андерсоном, играют роль немагнитных примесей [17].

В начале статьи уже указывалось на необходимость учета пространственной неоднородности физических величин в случае сверхпроводника с малой длиной когерентности, и все вычисления, сделанные нами до этого момента, проводились с учетом этого условия. Рассмотрим, насколько пренебрежение данным условием может изменить результаты. Для этого просуммируем уравнение (9) по всем узлам и поделим на число узлов  $N$ . Получим

$$\Delta = \frac{|V_0|}{2N} \int_{-\infty}^{\infty} dE \sum_i g(\mathbf{r}_i, E) \Delta(\mathbf{r}_i) \frac{\text{th}(E/2k_B T)}{E}, \quad (14)$$

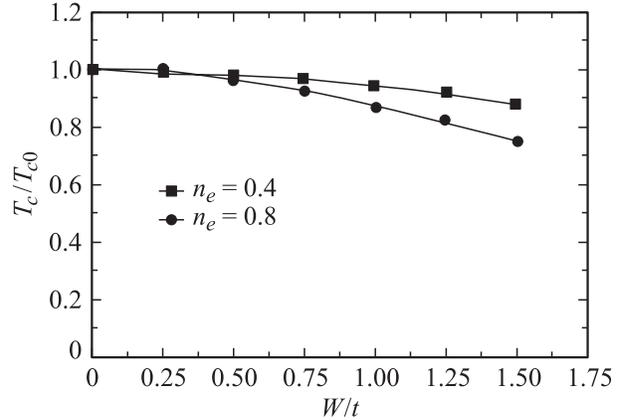
где учтено, что в отсутствие магнитного поля волновые функции  $u(\mathbf{r}_i)$  можно выбрать вещественными. Здесь  $\Delta = (1/N) \cdot \sum_i \Delta(\mathbf{r}_i)$  — среднее значение параметра порядка,  $g(\mathbf{r}_i, E) = (1/N) \cdot \sum_n u_n^2(\mathbf{r}_i) \delta(E - E_n)$  — локальная плотность состояний. Представим (14) в следующем виде:

$$1 = \frac{|V_0|}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dE g(E) \frac{\text{th}(E/2k_B T)}{E} + \frac{|V_0|}{2N} \int_{-\infty}^{\infty} dE \sum_i \delta g(\mathbf{r}_i, E) \frac{\delta \Delta(\mathbf{r}_i)}{\Delta} \frac{\text{th}(E/2k_B T)}{E}; \quad (15)$$

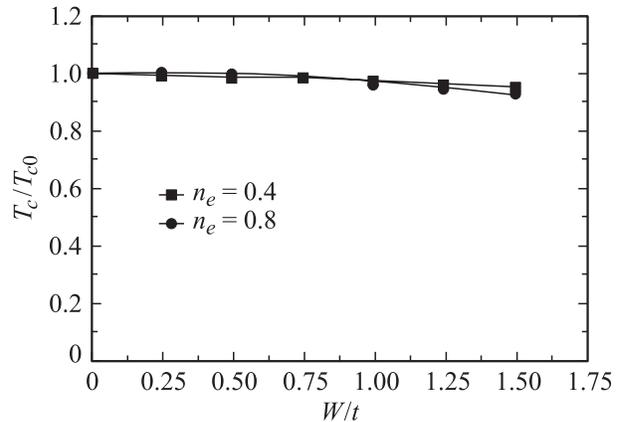
здесь  $g(E) = (1/N) \cdot \sum_i g(\mathbf{r}_i, E)$ ,  $\delta \Delta(\mathbf{r}_i) = \Delta(\mathbf{r}_i) - \Delta$  и  $\delta g(\mathbf{r}_i, E) = g(\mathbf{r}_i, E) - g(E)$ . При выводе (15) учтено, что  $\sum_i \delta \Delta(\mathbf{r}_i) = 0$  и  $\sum_i \delta g(\mathbf{r}_i, E) = 0$ . Если пренебречь пространственным изменением параметра порядка или локальной плотности состояний, второе слагаемое в правой части исчезнет, и мы получим следующую формулу:

$$1 \approx \frac{|V_0|}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dE g(E) \frac{\text{th}(E/2k_B T_c)}{E}. \quad (16)$$

Расчет критической температуры проведен для этого случая (рис. 6). Видно, что относительная критическая температура в случае  $n_e = 0.4$  с ростом концентрации примесей убывает. Этот результат качественно отличается от полученного нами ранее, что показывает важность учета пространственного изменения параметра порядка и локальной плотности состояний. Следует заметить, что до сих пор учитывалась пространственная зависимость энергии Хартри-Фока  $U(\mathbf{r}_i)$ . Если же считать  $U(\mathbf{r}_i)$  постоянной, то получится несколько иная



**Рис. 6.** Зависимость относительной критической температуры  $T_c/T_{c0}$  от  $W$  в случае пренебрежения пространственной неоднородностью  $\Delta(\mathbf{r}_i)$  и (или) локальной плотности состояний  $g(\mathbf{r}_i, E)$ .  $T_{c0}$  — критическая температура в отсутствие беспорядка. Расчет проводился на квадратной решетке из  $N = 32 \times 32$  узлов с параметрами  $V_0 = -2t$ ,  $n_e = 0.8$  и  $0.4$ , усреднение производилось по 20 различным конфигурациям беспорядка. Среднее квадратичное отклонение меньше размера символа.



**Рис. 7.** Зависимость относительной критической температуры  $T_c/T_{c0}$  от силы разупорядочения  $W$  в случае пренебрежения пространственной неоднородностью параметра порядка  $\Delta(\mathbf{r}_i)$  и энергии Хартри-Фока  $U(\mathbf{r}_i)$ .  $T_{c0}$  — критическая температура в отсутствие беспорядка. Расчет проводился на квадратной решетке из  $N = 32 \times 32$  узлов с параметрами  $V_0 = -2t$ ,  $n_e = 0.8$  и  $0.4$ , усреднение производилось по 20 различным конфигурациям беспорядка. Среднее квадратичное отклонение меньше размера символа.

картина (рис. 7). Видно, что  $T_c$  в этом случае почти не меняется при разупорядочении. Здесь получен тот же результат, что и в теории Абрикосова–Горькова, где также пренебрегается пространственной неоднородностью  $\Delta(\mathbf{r}_i)$  и  $U(\mathbf{r}_i)$  и критическая температура не зависит от концентрации примесей. Сравнение рис. 6 и 7 показывает, что критическая температура в сверхпроводнике с примесями чувствительна к пространственной неоднородности  $U(\mathbf{r}_i)$ . Из всего сказанного выше видно, что пренебрежение пространственной неоднородностью может привести к неверным результатам. В нашем случае это хорошо иллюстрируется качественным различием в поведении  $T_c$  при разупорядочении в случае  $n_e = 0.4$ .

В заключение хотим обратить внимание на то, что в разупорядоченном сверхпроводнике относительная критическая температура в случае концентрации электронов  $n_e = 0.4$  всегда получалась больше, чем при  $n_e = 0.8$  (рис. 6, 7). На наш взгляд, это объясняется поведением плотности состояний при разупорядочении. Можно показать, что основной вклад в интеграл в формуле (16) вносит область с размерами порядка  $|V_0|$  близки энергии Ферми, т. е. область малых  $E$  (отсчет энергии ведется от значения химического потенциала, который в случае не слишком больших энергий межэлектронного взаимодействия близок к энергии Ферми). В случае концентрации электронов  $n_e = 0.8$  энергия Ферми находится близко к пику в плотности состояний, который при разупорядочении размывается и вносит меньший вклад в интеграл, в результате чего равенство (16) может быть выполнено только при более низких  $T_c$ . В то же время при  $n_e = 0.4$  область энергий, вносящая основной вклад в интеграл в формуле (16), расположена вдали от этого пика, при этом значение интеграла увеличивается за счет хвостов в плотности состояний, появившихся в результате разупорядочения. Следовательно, в этом случае равенство (16) может быть выполнено при более высоких  $T_c$ . Данное рассуждение справедливо для  $|V_0|$  порядка  $t$ . При больших  $|V_0|$  описываемая зависимость будет выражена слабее, поскольку вклад в интеграл будет вносить вся энергетическая зона. При малых  $|V_0|$  критическая температура в (16) будет зависеть практически только от плотности состояний на уровне Ферми, и здесь требуется детальное изучение поведения  $g(0)$ . При этом надо еще учитывать изменение химического потенциала при разупорядочении, поскольку мы фиксируем среднее число электронов. Заметим, что описанный выше механизм, возможно, работает и в случае, когда мы не пренебрегаем пространственным изменением параметра порядка и локальной плотности состояний, однако он не объясняет возрастания  $T_c$  при разупорядочении, которое, по всей вероятности, есть результат действия нескольких факторов, причем важнейшую роль играет сильная пространственная неоднородность  $\Delta(\mathbf{r}_i)$  и  $g(\mathbf{r}_i, E)$ .

Таким образом, полученные результаты позволяют сделать следующие выводы: 1) при расчете физических характеристик сверхпроводников с малой длиной

когерентности необходимо учитывать неоднородность параметра сверхпроводящего порядка в координатном пространстве; 2) критическая температура  $s$ -волновых сверхпроводников с малой длиной когерентности может повышаться в результате разупорядочения.

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

## Список литературы

- [1] P.W. Anderson. J. Phys. Chem. Solid. **11**, 26 (1959).
- [2] А.А. Абрикосов, Л.П. Горьков. ЖЭТФ **35**, 1558 (1958); **36**, 319 (1959); **39**, 1781 (1960).
- [3] K. Tanaka, F. Marsiglio. Phys. Rev. B **62**, 5345 (2000).
- [4] M.E. Zhitomirsky, M.B. Walker. Phys. Rev. Lett. **80**, 5413 (1998).
- [5] П. Де Жен. Сверхпроводимость металлов и сплавов. Мир, М. (1968). 280 с.
- [6] Marcin Mierzejewski, Maciej M. Maska. Phys. Rev. B **60**, 6300 (1999).
- [7] R. Micnas, J. Ranninger, S. Robaszkiewicz. Rev. Mod. Phys. **62**, 113 (1990).
- [8] А.В. Свидзинский. Пространственно неоднородные задачи теории сверхпроводимости. Наука, М. (1982). 312 с.
- [9] J. Lages, D.L. Shepelyansky. Phys. Rev. B **64**, 094 502 (2001).
- [10] J.M. Singer, M.H. Pedersen, T. Schneider, H. Beck, H.-G. Matuttis. Phys. Rev. B **54**, 1286 (1996).
- [11] A. Ghosal, M. Randeria, N. Trivedi. Phys. Rev. B **65**, 014 501 (2001).
- [12] D.J. Scalapino, S.R. White, S. Zhang. Phys. Rev. B **47**, 7995 (1993).
- [13] T. Xiang, J.M. Wheatley. Phys. Rev. B **51**, 11 721 (1995).
- [14] M. Franz, C. Kallin, A.J. Berlinsky, M.I. Salkola. Phys. Rev. B **56**, 7882 (1997).
- [15] R.E. Peierls. Z. Phys. **80**, 763 (1933); J.M. Luttinger. Phys. Rev. **84**, 814 (1951).
- [16] B.T. Matthias, A.C. Compton, H. Suhl, E. Corenzwit. Phys. Rev. **115**, 1597 (1959).
- [17] P.W. Anderson. Rev. Mod. Phys. **50**, 191 (1978).