Письма в ЖЭТФ, том 67, вып.7, стр.473 - 477 © 1998г. 10 апреля

О ВЛИЯНИИ КОРНЕВОЙ СИНГУЛЯРНОСТИ ВАН ХОВА НА КРИТИЧЕСКУЮ ТЕМПЕРАТУРУ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКОВ

Э.А.Пашицкий, В.И.Пентегов, Е.Абрахам[1]*

Институт физики НАН Украины
252650 Киев, Украина

**Department of Physics, Heriot-Watt University*
Edinburgh, EH14 4AS, UK

Поступила в редакцию 6 февраля 1998 г.

Показано, что корневая сингулярность Ван Хова в плотности состояний $\nu(E_F) \sim$ $\sim (E_F - E_0)^{-1/2}$, связанная с протяженными седловыми особенностями в электронном спектре высокотемпературных сверхпроводников на основе купратных металлооксидных соединений дырочного типа, приводит к немонотонной зависимости критической температуры T_c от положения уровня Ферми E_F относительно дна седловин E_0. При этом, в результате сокращения расходимости $\nu(E_F)$ в перенормированной за счет эффектов сильной связи константе электрон-электронного взаимодействия, T_c стремится к нулю в пределе $E_F \to E_0$, в отличие от приближения слабой связи, в рамках которого T_c стремится к конечному (близкому к максимальному) значению при $E_F \to E_0$. Зависимость T_c от концентрации допированных дырок, полученная в приближении сильной связи, качественно согласуется с экспериментальными данными для передопированных купратных металлооксидов.

PACS: 74.20.-z

1. Эксперименты [1 – 5] по фотоэлектронной спектроскопии с высокой разрешающей способностью по углу и энергии показывают, что в электронных спектрах слоистых кристаллов купратных металлооксидных соединений (МОС) с дырочным типом проводимости (YBaCuO, BiSrCaCuO, TlBaCaCuO) вблизи уровня Ферми существуют "плоские" участки зон, которые представляют собой протяженные седловые особенности (СО) с корневой сингулярностью Ван Хова (СВХ) в электронной плотности состояний $\nu(E_F) \sim (E_F - E_0)^{-1/2}$. Энергия Ферми $\mu_1 \equiv (E_F - E_0)$ и ферми-импульс $k_{F1} \approx \sqrt{2m_1^*\mu_1}$ на таких квазиодномерных участках спектра с эффективной массой $m_1^* \gg m_0$ (где m_0 – масса свободного электрона) аномально малы и для оптимально допированных кристаллов составляют соответственно $\mu_1 \cong (20 \div 30)$ мэВ и $k_{F1} \cong (0.15 \div 0.17)\,\text{Å}^{-1}$, а протяженность седловин равна $P_1 \cong 0.5\,\text{Å}^{-1}$ [4, 5].

Как было показано в [2, 6] в рамках приближения слабой связи (модель БКШ [7]), протяженные СО с корневыми СВХ приводят для $\mu_1 \le T_c$ с неэкспоненциальной (степенной) зависимости T_c от безразмерной константы λ эффективного межэлектронного притяжения: $T_c \approx \mu_1\lambda^2$, где $\lambda \approx \lambda_1\sqrt{E_1/\mu_1}$, то есть критическая температура стремится к постоянному пределу $T_c \approx E_1\lambda_1^2$ при $\mu_1 \to 0$. Таким образом, согласно [2], при энергии E_1 порядка ширины зоны ($E_1 > 1$ эВ) могут быть достигнуты достаточно высокие значения $T_c \ge 100$ К при весьма малых значениях $\lambda_1 \sim 0.1$, независимо от механизма куперовского спаривания носителей тока.

Однако при больших значениях λ необходимо использовать приближение сильной связи [8], в рамках которого перенормировка константы взаимодействия $\tilde{\lambda} =$

---

[1] E.Abraham.

$= \lambda/(1+\lambda)$ приводит к сокращению расходимости $\lambda \sim \nu(\mu_1) \sim \mu_1^{-1/2}$ в точке $\mu_1 = 0$. Благодаря этому, как показано в настоящей работе, $T_c \sim \mu_1$ при $\mu_1 \to 0$, то есть T_c обращается в нуль, когда уровень Ферми касается дна протяженных СО, в отличие от приближения слабой связи [2, 6], когда T_c стремится к конечному (близкому к максимальному) значению при $\mu_1 \to 0$. Полученная с учетом эффектов сильной связи немонотонная зависимость T_c от концентрации допированных дырок n_p качественно согласуется с экспериментальными данными для передопированных купратных МОС [9, 10].

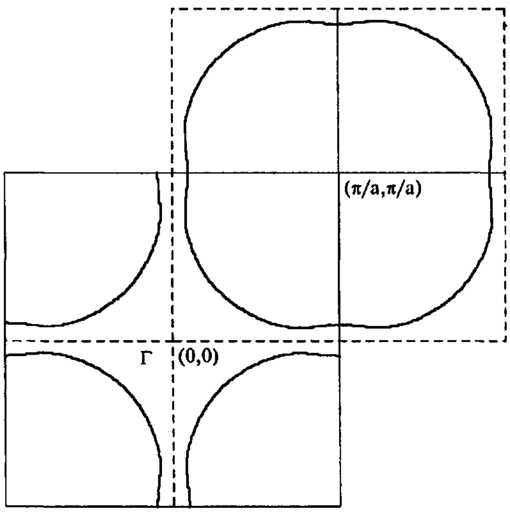

Рис.1. Сечение поверхности Ферми купратных слоистых металлооксидов типа BSCCO. Замкнутая цилиндрическая поверхность Ферми дырочного типа центрирована в углу зоны Бриллюэна $(\pi/a, \pi/a)$

2. Будем исходить из предположения о том, что механизм высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) в слоистых купратных МОС обусловлен куперовским спариванием фермионов (электронов, дырок) за счет обмена виртуальными бозонами (фононами, магнонами, плазмонами, экситонами). Как известно [7, 8], в приближении сильной связи сверхпроводящее состояние описывается системой уравнений для нормальной, Σ_1 и аномальной, Σ_2, собственно-энергетических частей. При условии, что характерная энергия $\tilde{\Omega}$ бозонов, переносящих взаимодействие, значительно больше T_c, линеаризованное уравнение для щели $\Delta(\mathbf{k}, \omega)$ на поверхности Ферми при $T \to T_c$ с учетом квазидвумерности электронного спектра в слоистых кристаллах МОС и анизотропной структуры межэлектронного взаимодействия может быть представлено в виде

$$(1+\lambda(\theta))\Delta(\theta,0) = \frac{1}{2}\int\limits_0^{2\pi}\frac{d\theta}{2\pi}\int\limits_{-\tilde{\Omega}}^{\tilde{\Omega}}\frac{d\omega}{\omega}\Delta(\theta',\omega)\nu(\theta',\omega)W(\theta,\theta',\omega)\,\mathrm{th}\frac{\omega}{2T_c}, \qquad (1)$$

где $\lambda(\theta) = -\partial\Sigma_1(\theta,\omega)/\partial\omega|_{\omega=0}$ – безразмерная константа запаздывающего взаимодействия, $\Delta(\theta,\omega) = \Sigma_2(\theta,\omega)/(1+\lambda(\theta))$ – анизотропная щель в спектре квазичастиц, θ и θ' – углы между лежащими на поверхности Ферми импульсами электрона $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$ и направлением одной из главных кристаллографических осей ($\mathbf{a}$ или $\mathbf{b}$) в плоскости слоев, а $W(\theta,\theta',\omega)$ и $\nu(\theta,\omega)$ – матричный элемент межэлектронного взаимодействия и электронная плотность состояний, соответственно, которые можно представить в виде разложения в ряды Фурье по углам θ и θ'. В дальнейшем ограничимся для простоты первыми членами в разложении $W(\theta,\theta',\omega)$, которые соответствуют представлениям A_1 и B_1 группы симметрии $C_{4\nu}$ купратной плоскости CuO_2:

$$W(\theta,\theta,\omega)=W_0(\omega)+W_2(\omega)\cos 2\theta\cos 2\theta'+W_4(\omega)\cos 4\theta\cos 4\theta', \tag{2}$$

а анизотропную плотность состояний в окрестности замкнутой цилиндрической поверхности Ферми дырочного типа (рис.1) представим в виде

$$\nu(\theta',\omega)=\nu_+(\omega)+\nu_-(\omega)\cos 4\theta';\quad \nu_\pm(\omega)=\frac{1}{2}\left[\nu_1\mathrm{Re}\sqrt{\frac{\mu_1}{\mu_1+\omega}}\pm\nu_2\right]. \tag{3}$$

Здесь $\nu_1(\mu_1)\sim\mu_1^{-1/2}$ – плотность состояний на квазиодномерных участках поверхности Ферми в области протяженных СО с корневой СВХ, а ν_2 – постоянная плотность состояний на квазидвумерных участках поверхности Ферми в направлении диагоналей зоны Бриллюэна. В этом случае анизотропная константа связи $\lambda(\theta)$ имеет вид

$$\lambda(\theta)=\lambda_0+\lambda_4\cos 4\theta;\quad \lambda_0=\nu_+(0)W_0(0);\quad \lambda_4=\frac{1}{2}\nu_-(0)W_4(0). \tag{4}$$

При достаточно больших положительных значениях $W_0(0)$ и $W_4(0)$ преобладающей может быть s-волновая симметрия куперовского спаривания с анизотропным параметром щели

$$\Delta_s(\theta,\omega)=\Delta_0(\omega)+\Delta_4(\omega)\cos 4\theta. \tag{5}$$

При этом критическая температура T_c^s определяется из решения следующей системы связанных интегральных уравнений (для простоты пренебрегаем зависимостью Δ и W от ω в области $|\omega|<\tilde{\Omega}$) :

$$(1+\lambda_0)\Delta_0+\frac{1}{2}\lambda_4\Delta_4=\frac{1}{2}W_0(0)\int\limits_{-\tilde{\Omega}}^{\tilde{\Omega}}\frac{d\omega}{\omega}\left[\nu_+(\omega)\Delta_0+\frac{1}{2}\nu_-(\omega)\Delta_4\right]\mathrm{th}\frac{\omega}{2T_c^s}, \tag{6}$$

$$(1+\lambda_0)\Delta_4+\lambda_4\Delta_0=\frac{1}{4}W_4(0)\int\limits_{-\tilde{\Omega}}^{\tilde{\Omega}}\frac{d\omega}{\omega}\left[\nu_+(\omega)\Delta_4+\nu_-(\omega)\Delta_0\right]\mathrm{th}\frac{\omega}{2T_c^s}. \tag{7}$$

В то же время, при достаточно большом положительном значении W_2 может преобладать $d_{x^2-y^2}$-волновая симметрия куперовского спаривания с анизотропной щелью $\Delta_d(\theta)\sim\cos 2\theta$ и с критической температурой T_c^d, определяющейся уравнением

$$(1+\lambda_0)=\frac{1}{4}W_2(0)\int\limits_{-\tilde{\Omega}}^{\tilde{\Omega}}\frac{d\omega}{\omega}\left[\nu_+(\omega)+\frac{1}{2}\nu_-(\omega)\right]\mathrm{th}\frac{\omega}{2T_c^d}. \tag{8}$$

3. Поскольку большинство экспериментов (см., например, [11–14]) свидетельствуют в пользу $d_{x^2-y^2}$ -волновой симметрии щели в высокотемпературных сверхпроводниках, рассмотрим именно этот случай, соответствующий в нашей модели большой положительной величине матричного элемента W_2 в (2). При этом уравнение (8) с учетом (3) для $\mu_1 < \tilde{\Omega}$ приводится к виду

$$1 = \frac{W_2}{4(1+\lambda_0)} \left\{ \frac{3}{2}\nu_1(\mu) \int\limits_{\mu 1}^{\tilde{\Omega}} \frac{d\omega}{\omega} \sqrt{\frac{\mu_1}{\mu_1+\omega}} \mathrm{th}\frac{\omega}{2T_c^d} + \nu_2 \ln\left(\frac{\tilde{\Omega}}{T_c^d}\right) \right\}. \tag{9}$$

Первое слагаемое в фигурных скобках (9) описывает вклад квазиодномерных участков поверхности Ферми с корневой СВХ в плотность состояний, а второе – вклад квазидвумерных участков поверхности Ферми с постоянной плотностью состояний.

При условии $T_c^d \ll \mu_1$ в результате приближенного интегрирования по ω в (9) получаем:

$$(T_c^d)^{3\alpha_1+\alpha_2} \approx (4\mu_1)^{3\alpha_1} \tilde{\Omega}^{\alpha_2} \exp\left\{-\frac{1+\lambda_0}{\lambda_2}\right\}, \tag{10}$$

где

$$\alpha_1(\mu_1) = \frac{\nu_1(\mu_1)}{\nu_1(\mu_1)+\nu_2}; \quad \alpha_2(\mu_1) = \frac{\nu_2}{\nu_1(\mu_1)+\nu_2}; \quad \lambda_2(\mu_1) = \frac{1}{2}(\nu_1(\mu_1)+\nu_2)W_2. \tag{11}$$

В противном случае, $T_c^d \gg \mu_1$, когда $\nu_1 \gg \nu_2$ и $\lambda_0 \approx \frac{1}{2}\nu_1 W_0 \gg 1$ при $\mu_1 \to 0$, из уравнения (9) в результате сокращения ν_1 в перенормированной константе связи следует:

$$T_c^d \approx 2\mu_1(3W_2/2W_0)^2, \tag{12}$$

так что $T_c^d \to 0$ при $\mu_1 \to 0$. Пользуясь уравнениями (6) и (7), можно показать, что в приближении сильной связи аналогичный результат ($T_c^s \sim \mu_1$ при $\mu_1 \to 0$) справедлив и в случае s-волновой симметрии щели, в отличие от результата [2, 6], полученного в приближении слабой связи, когда значение T_c конечно и близко к максимальному при $\mu_1 = 0$.

На рис.2 показаны зависимости T_c^d от μ_1, полученные в результате численного решения уравнения (8) для разных значений параметров $\tilde{\Omega}$, $\lambda_1 = \nu_1^* W$, где $\nu_1^* \equiv \nu_1(\mu_1^*)$, а $\mu_1^* \approx (0.02 \div 0.03)$ эВ, что соответствует положению уровня Ферми в оптимально допированных кристаллах купратных МОС [3, 4]. Сплошные кривые *1* и *2* рассчитаны для значений $\tilde{\Omega} = 0.1$ эВ и $\tilde{\Omega} = 2$ эВ при фиксированном отношении $\nu_1^*/\nu_2 = 5$ и для таких величин констант λ_1 и λ_0, которые обеспечивают положение максимума зависимости T_c^d от μ_1 в точке $\mu_1^* = 0.03$ эВ и экспериментально наблюдаемое для BSCCO максимальное значение $T_c \approx 110$ К. Заметим, что при фиксированном отношении констант λ_1 и λ_0 тождественно равное $\lambda_0(\mu^*)$ эти условия, налагаемые на положение и величину максимума T_c, приводят к степенной зависимости λ_1 от $\tilde{\Omega}$ с малым показателем $\beta \approx -0.06$, которая показана на врезке в двойном логарифмическом масштабе. Как видим, константа связи λ_1, обеспечивающая достаточно высокие T_c, относительно невелика и слабо зависит от характерной энергии взаимодействия $\tilde{\Omega}$, которая определяется конкретным механизмом куперовского спаривания. Штриховыми кривыми на рис.2 показаны зависимости T_c^d, вычисленные при тех же значениях параметров, но без учета перенормировки константы взаимодействия на фактор $(1+\lambda_0)$, что соответствует приближению слабой связи [2, 6].

На рис.3 изображены концентрационные зависимости T_c^d, соответствующие кривым *1* и *1'* (рис.2) и полученные с учетом формулы (3) для плотности состояний. Для сравнения приведены экспериментальные значения критической температуры в зависимости от концентрации дырок n_p в расчете на один атом Cu, взятые из [10]. Как

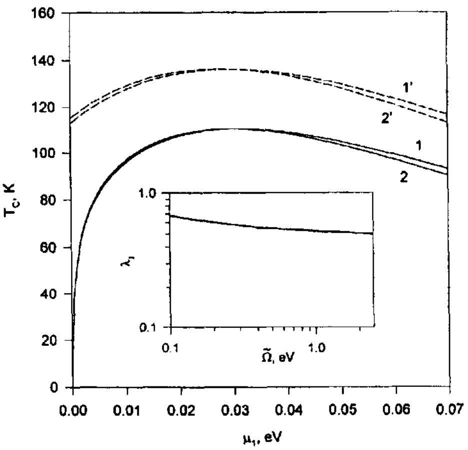

Рис.2. Зависимости T_c от энергии Ферми $\mu_1 = E_F - E_0$ не протяженных CO, вычисленные в приближении сильной (сплошные кривые) и слабой (штриховые кривые) связи. Кривые *1* и *1'* соответствуют $\tilde{\Omega} = 0.1$ эВ и $\lambda_1 = 0.68$, а кривые *2* и *2'* – $\tilde{\Omega} = 2$ эВ и $\lambda_1 = 0.5$

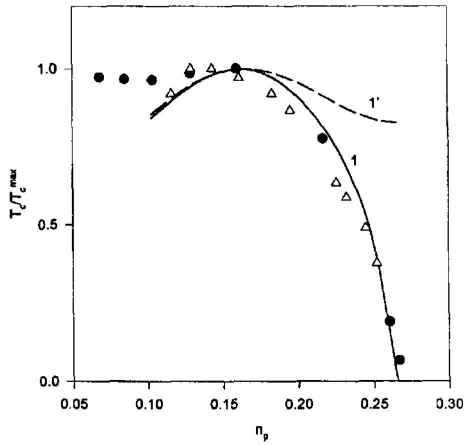

Рис.3. Зависимость T_c от концентрации дырок n_p в расчете на один атом Cu. Теоретические кривые соответствуют кривым *1* и *1'* на рис.2. Экспериментальные данные взяты из [10]: • – TlPbCaYSrCuO (1212), Δ – BiPbSrLaCuO (2201)

видим, наблюдается хорошее согласие экспериментальных данных с теоретической зависимостью $T_c(n_p)$, полученной в приближении сильной связи.

Таким образом, в настоящей работе показано, что понижение критической температуры сверхпроводящего перехода в передопированных купратных МОС с ростом дырочной концентрации и обращения T_c в нуль при некотором значении n_p связаны с корневой СВХ в электронной плотности состояний на протяженных СО и не зависят от механизма куперовского спаривания носителей тока и симметрии щели.

Авторы выражают благодарность А.В.Гуревичу и А.В.Семенову за полезные дискуссии. Работа поддержана грантом 2.4/561 Государственного фонда фундаментальных исследований Украины и грантом GR/L25363 (Visiting Fellowship Research Grant, EPSRC, United Kingdom).

---

1. D.S.Dessau, Z.-X.Shen, D.M.King et al., Phys. Rev. Lett. **71**, 2781 (1993).
2. A.A.Abrikosov, J.C.Campuzano, and V.Gofron, Physica C **214**, 73 (1993).
3. D.M.King, Z.-X.Shen, and D.S.Dessau, Phys. Rev. Lett. **73**, 3298 (1994).
4. V.Gofron, J.C.Campuzano, A.A.Abrikosov et al., Phys. Rev. Lett. **73**, 3302 (1994).
5. H.Ding, J.C.Campuzano, A.F.Bellman et al., Phys. Rev. Lett. **74**, 2784 (1995); **75**, 1425 (1995).
6. A.A.Abrikosov, Physica C **214**, 107 (1993); **222**, 191 (1994); **244**, 243 (1995).
7. Дж.Шриффер, *Теория сверхпроводимости*, М.: Наука, 1970.
8. Г.М.Элиашберг, ЖЭТФ **38**, 966 (1960); **39**, 1437 (1960).
9. J.B.Torrance, A.Bezinge, A.I.Mazzal, and S.S.P.Parkin, Physica C **162-164**, 291 (1989).
10. J.L.Tallon, R.G.Bucckley, E.M.Haines et al., Physica C **185-189**, 855 (1991).
11. D.A.Wollman, D.J.Van Harlingen, W.C.Lee et al., Phys. Rev. Lett. **71**, 2134 (1993); D.A.Wollman, D.J.Van Harlingen, J.Giapintzakis, and D.M.Ginsberg, Phys. Rev. Lett. **74**, 797 (1995).
12. S.S.Tsuei, J.R.Kirtley, C.C.Chi et al., Phys. Rev. Lett. **73**, 593 (1994).
13. J.R.Kirtley, S.S.Tsuei, M.Rupp et al., Phys. Rev. Lett. **76**, 1336 (1996).
14. M.R.Norman, M.Randeria, H.Ding et al., Phys. Rev. B **52**, 15107 (1995).