

Гиперболическое спаривание при кулоновском отталкивании как механизм высокотемпературной сверхпроводимости

В. И. Белявский⁺, Ю. В. Копаев*

⁺ Воронежский государственный педагогический университет
394043 Воронеж, Россия

* Физический Институт им. П.Н.Лебедева РАН
117924 Москва, Россия

Поступила в редакцию 8 декабря 2000 г.

Гиперболическая метрика закона дисперсии (разные знаки компонент тензора эффективных масс носителей) вблизи контура Ферми в ВТСП купратах приводит при отталкивательном взаимодействии к возникновению сверхпроводящего состояния, характеризующегося конденсатом пар с большим суммарным импульсом (гиперболическое спаривание). Выигрыш в энергии сверхпроводящего состояния над нормальным обусловлен изменением кинетической энергии пар (из-за отрицательной легкой компоненты эффективной массы), преобладающим над соответствующим проигрышу изменением потенциальной энергии. Существенным при этом является сдвиг химического потенциала при переходе в сверхпроводящую фазу. С ростом отталкивательного взаимодействия растет величина сверхпроводящей щели Δ_K , а суммарный выигрыш в энергии сменяется проигрышем при некотором критическом значении отталкивательного потенциала. Низкая температура T_c сверхпроводящего перехода и большая величина Δ_K в этой области значения потенциала являются причиной большого значения отношения $2\Delta_K/T_c$ и развитых квантовых флуктуаций, наблюдаемых в недодопированных (*underdoped*) купратных сверхпроводниках.

PACS: 74.20.-z

При спаривании квазичастиц с ненулевым квазиимпульсом пары K в ферми-системе квазиимпульс относительного движения пары принадлежит некоторой области Ξ_K внутри зоны Бриллюэна [1, 2]. Размеры и форма этой области зависят от K и определяются из условия, что квазиимпульсы двух квазичастиц, образующих пару, должны находиться либо вне, либо внутри области, ограниченной поверхностью Ферми.

В ВТСП соединениях электронные состояния имеют квазидвумерный характер, и структура энергетических зон такова, что изоэнергетические линии в окрестности уровня Ферми имеют длинные, почти прямолинейные, участки, чем обеспечивается почти идеальный нестинг контура Ферми [3]. Таким образом, если рассматривать пары не с $K \ll k_F$ [4, 5], а с $K \approx 2k_F$, где k_F – фермиевский импульс для данного направления, то область Ξ_K имеет вид длинной узкой полосы, как это для случая, когда K направлен вдоль [010], схематически показано на рис.1. Ось k_1 делит область Ξ_K на две части: если в одной из них (верхней на рис.1а) квазиимпульс относительного движения пары дырок равен k , а спин дырки с квазиимпульсом $k_+ = K/2 + k$ ориентирован условно вверх (\uparrow), то в другой (нижней) квазиимпульс относительного движения равен $-k$, а спин

дырки с квазиимпульсом $k_- = K/2 - k$ при синглетном спаривании имеет ориентацию \downarrow . Внутри Ξ_K , располагающейся в окрестности седловой точки закона дисперсии, дырки имеют весьма слабую дисперсию (*extended flat-band saddle point* [3]), и (отрицательная) эффективная масса вдоль оси k_2 по абсолютной величине существенно меньше эффективной массы вдоль k_1 (соответствующие фермиевские скорости v_{F1} и v_{F2} вдоль k_1 и k_2 более чем на порядок отличаются друг от друга: $v_{F1}/v_{F2} < 0.1$ [6]).

Особенность амплитуды рассеяния при относительном движении двух дырок [2], испытывающих кулоновское отталкивание (рис.2), указывает на возможность образования пар ($k_+ \uparrow; k_- \downarrow$): парам с положительным затуханием соответствуют квазистационарные состояния, которые могут быть ответственными за появление псевдощели [1], наличие же состояний с отрицательным затуханием [2] отражает тенденцию к перестройке основного состояния системы, сопровождающейся возникновением сверхпроводящего конденсата пар.

Рассмотрим область Ξ_K , соответствующую энергиям дырок, меньшим энергии Ферми (рис.1), и запишем гамильтониан, описывающий относительное

Энергия основного состояния записывается как

$$E_{K0} = -2 \sum_{k \in \Xi_K} \xi_{Kk} v_{Kk}^2 + \sum_{k \in \Xi_K} \Delta_{Kk} u_{Kk} v_{Kk}, \quad (5)$$

где $2\xi_{Kk} = 2\mu_K - \varepsilon(K/2 + k) - \varepsilon(K/2 - k)$ и, по определению,

$$\Delta_{Kk} = \sum_{k \in \Xi_K} U(k - k') u_{Kk'} v_{Kk'}. \quad (6)$$

Диагональная по операторам \hat{b} часть гамильтониана представляется в виде

$$\hat{H}_K^{(0)} = \sum_{\substack{k \in \Xi_K \\ \beta = \pm 1}} \eta_{K\beta}(k) \hat{b}_{k\beta}^+ \hat{b}_{k\beta}, \quad (7)$$

где

$$\eta_{K\beta} = \left[\varepsilon \left(\frac{K}{2} + \beta k \right) - \mu_K \right] u_{Kk}^2 - \left[\varepsilon \left(\frac{K}{2} - \beta k \right) - \mu_K \right] v_{Kk}^2 - 2\Delta_{Kk} u_{Kk} v_{Kk}. \quad (8)$$

Недиагональная (билинейная по операторам \hat{b}) часть имеет вид

$$\hat{H}_K^{(1)} = - \sum_{k \in \Xi_K} \{ 2\xi_{Kk} u_{Kk} v_{Kk} - (u_{Kk}^2 - v_{Kk}^2) \Delta_{Kk} \} (\hat{b}_{k,+1}^+ \hat{b}_{k,-1}^+ + \hat{b}_{k,-1} \hat{b}_{k,+1}), \quad (9)$$

Минимизация E_{K0} по u_{Kk} и v_{Kk} при дополнительном условии $u_{Kk}^2 + v_{Kk}^2 = 1$ приводит к погашению вклада $\hat{H}_K^{(1)}$, то есть к тождественному обращению в нуль выражения в фигурных скобках в (9). Получающееся уравнение удовлетворяется тождественно при выборе решения в виде

$$v_{Kk}^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{Kk}}{\sqrt{\xi_{Kk}^2 + \Delta_{Kk}^2}} \right),$$

$$u_{Kk}^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_{Kk}}{\sqrt{\xi_{Kk}^2 + \Delta_{Kk}^2}} \right), \quad (10)$$

тогда уравнение, определяющее Δ_{Kk} , имеет обычную для ВКС форму:

$$\Delta_{Kk} = \frac{1}{2} \sum_{k' \in \Xi_K} \frac{U(k - k') \Delta_{Kk'}}{\sqrt{\xi_{Kk'}^2 + \Delta_{Kk'}^2}}. \quad (11)$$

Из (11) следует наблюдаемый в ВКС купратах d тип орбитальной симметрии сверхпроводящей щели, если, как отмечено в [1], учесть, что Δ_{Kk} как функция квазиимпульса пары K преобразуется по неприводимому представлению B_{1g} группы симметрии кристалла.

При $\Delta_{Kk} \rightarrow 0$ система формально может быть рассмотрена [1] как газ дырочных пар (с нулевой энергией связи), при этом преобразование (3) приводит к “правильным” волновым функциям нулевого (по взаимодействию дырок, образующих пару) приближения. В такие волновые функции дает вклад не вся область Ξ_K , а лишь ее часть, в которой $\xi_{Kk} < 0$, то есть те состояния с преобладающей положительной тяжелой компонентой эффективной массы, которым соответствует положительная кинетическая энергия движения пары.

Множитель Лагранжа определяется из условия

$$2 \sum_{k \in \Xi_K} v_{Kk}^2 = 2 \sum_{\substack{k \in \Xi_K \\ (\xi_{Kk} < 0)}} 1 \equiv \langle N_K^{(c)} \rangle, \quad (12)$$

где $\langle N_K^{(c)} \rangle$ – среднее число пар в конденсате при $\Delta_{Kk} \rightarrow 0$. Введя параметр δ_K , характеризующий асимметрию в распределении состояний с эффективными массами разного знака в пределах области Ξ_K , можно переписать в виде

$$2\delta_K \equiv \sum_{\substack{k \in \Xi_K \\ (\xi_{Kk} > 0)}} 1 - \sum_{\substack{k \in \Xi_K \\ (\xi_{Kk} < 0)}} 1 = \sum_{k \in \Xi_K} \frac{\xi_{Kk}}{\sqrt{\xi_{Kk}^2 + \Delta_{Kk}^2}}. \quad (13)$$

Параметр (13) может, в принципе, иметь любой знак, однако, как можно видеть из рис.1а, на котором показана область Ξ_K , типичная для ВКС соединений с дырочным типом допирования, при достаточно сильной анизотропии закона дисперсии дырок, наблюдаемой в ВКС купратах [6], $\delta_K > 0$. Переходя в (13) от суммирования к интегрированию по области Ξ_K и заменяя плотность состояний для относительного движения пар в пределах этой области некоторым ее усредненным значением g_K (плотность состояний $g_K(\xi)$ имеет логарифмическую особенность при $\xi = 0$, слабо влияющую на значения интегралов в пределах Ξ_K), найдем, что при $\Delta_{Kk} = 0$ множитель Лагранжа имеет вид $\mu_{K0} = \delta_K / g_K$. Для простоты, как и в [2], принято, что энергия пары (в отсутствие взаимодействия) изменяется в симметричных пределах: $|\varepsilon(k_+) + \varepsilon(k_-) - 2\varepsilon(K/2)| \leq 2\varepsilon_{K0}$, где ε_{K0} – максимальное значение кинетической энергии относительного движения дырочной пары в пределах области Ξ_K (рис.1б).

Нетривиальное решение, $\Delta_{Kk} \neq 0$, очевидно, также существует. В этом случае $v_{Kk} \neq 0$ во всей области Ξ_K , и часть этой области, в которой преобладают состояния с отрицательной эффективной массой вдоль оси k_2 (то есть появляется возможность образования связанных состояний [1]), приводит к изменению параметра Лагранжа. Чтобы получить приближенные решения уравнений (11) и (13), сделаем

радикальное упрощение, равносильное приближению BCS, положив $U(k - k') = U_K = \text{const}$ в пределах области Ξ_K . Следствием этого упрощения является то, что параметр Δ_{Kk} оказывается не зависящим от k : $\Delta_{Kk} \Rightarrow \Delta_K$. Это позволяет из (13) легко найти изменение параметра Лагранжа $\Delta\mu_K$, обусловленное возникновением конденсата пар:

$$\Delta\mu_K = \frac{\mu_{K0}}{\varepsilon_{K0}^2 - \mu_{K0}^2} \frac{\Delta_K^2}{2}. \quad (14)$$

Сделанное приближение позволяет записать решение уравнения (11) в виде

$$\Delta_K = 2\sqrt{\varepsilon_{K0}^2 - \mu_{K0}^2} \cdot \exp\left(-\frac{1}{U_K g_K}\right). \quad (15)$$

При этом учтено, что $|\Delta_K| \ll |\varepsilon_{K0} \pm \mu_{K0}|$, что формально соответствует приближению слабой связи: $U_K g_K \ll 1$.

Перепишем энергию основного состояния системы как

$$E_{K0} = - \sum_{k \in \Xi_K} \xi_{Kk} \left(1 - \frac{\xi_{Kk}}{\sqrt{\xi_{Kk}^2 + \Delta_K^2}}\right) + \frac{1}{2} \sum_{k \in \Xi_K} \frac{\Delta_K^2}{\sqrt{\xi_{Kk}^2 + \Delta_K^2}}. \quad (16)$$

При $\Delta_K \neq 0$ энергия квазичастицы отсчитывается от $\mu_K = \varepsilon(K/2) + \mu_{K0} + \Delta\mu_K$, и энергия основного состояния (16) сверхпроводящей фазы при $\mu_{K0} \ll \varepsilon_{K0}$ с точностью $\sim \Delta_K^2$ записывается как

$$E_{K0}^{(s)} \approx E_{K0}^{(n)} - \frac{1}{2} g_K \cdot (\Delta_{Km}^2 - \Delta_K^2), \quad (17)$$

где $\Delta_{Km}^2 \approx 4\mu_{K0} \varepsilon_{K0}$, а величина $E_{K0}^{(n)} = g_K \cdot \varepsilon_{K0}^2$ представляет собой энергию основного состояния нормальной фазы, когда имеет место равномерное заполнение состояний относительного движения пары по всей области Ξ_K (при этом $\langle N_K^{(n)} \rangle = 1$, что соответствует выбору коэффициентов в (12) в виде $\nu_{Kk}^2 \equiv \nu_K^2 = 2\pi^2/S\Xi_K$, где S – нормировочная площадь). Таким образом, в приближении слабой связи при условии $\Delta_K < \Delta_{Km}$ оказывается, что $E_{K0}^{(s)} < E_{K0}^{(n)}$, то есть возникновение конденсата обеспечивает выигрыш в энергии основного состояния.

Определив энергию конденсации как $E_{K0}^{(c)} = E_{K0}^{(n)} - E_{K0}^{(s)}$, можно, с помощью (16), записать ее в виде суммы по области Ξ_K . График функции $F(x)$ под соответствующей суммой (в единицах Δ_K) в зависимости от безразмерной переменной $x = \xi_{Kk}/\Delta_K$ схематически представлен на рис.3.

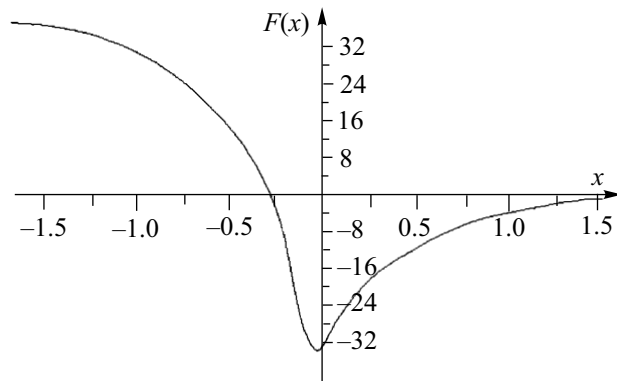


Рис.3. Энергия конденсации (в единицах Δ_K) как функция безразмерной энергии возбуждения $x = \xi_{Kk}/\Delta_K$. Графику на рисунке соответствует значение сдвига химического потенциала квазичастицы $\Delta\mu_K/\Delta_K \approx 0.4$

Этот рисунок является иллюстрацией того, каким образом при сдвиге химического потенциала $\Delta\mu_K$ в результате возникновения сверхпроводящего конденсата обеспечивается выигрыш в энергии конденсации за счет кинетической энергии пар. Выигрыш, соответствующий положительным значениям $F(x)$, достигается, как видно из рис.3, когда максимальное значение кинетической энергии пары ε_{K0} , определяющее пределы интегрирования в (16), превосходит некоторую величину, при которой погашается приводящий к проигрышу в энергии конденсации вклад отталкивательного взаимодействия (область на рис.3, в которой $F(x) < 0$).

Феноменологическая картина с выигрышем в энергии сверхпроводящего состояния за счет кинетической энергии была представлена в работе [7].

В предельном случае слабой связи Δ_K экспоненциально уменьшается при $\lambda_K^{-1} \equiv U_K g_K \rightarrow 0$, а полюс амплитуды рассеяния, определяемый [2] из условия $f(\varepsilon) + \lambda_K = 0$, смещается к точке ε_{K0} , как это показано на рис.2. При этом затухание, оставаясь отрицательным, стремится к нулю при $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_{K0}$. Как видно из рис.2, с увеличением константы связи λ_K^{-1} , начиная с некоторого ее значения λ_{Km}^{-1} , решение уравнения $f(\varepsilon) + \lambda_K = 0$ исчезает, хотя при этом параметр Δ_K в нуль не обращается, более того, с ростом λ_K^{-1} он возрастает. Однако при этом с ростом Δ_K при постоянном ε_{K0} увеличивается положительный и одновременно уменьшается отрицательный вклады в энергию основного состояния из-за “сжатия” пределов интегрирования $\pm \varepsilon_{K0}/\Delta_K$ по безразмерной переменной x . Вклад области, где $F(x) > 0$, уменьшается существенно быстрее, чем приводящий к про-

игрышу в энергии конденсации вклад от области с $F(x) < 0$, как это видно из рис.3. В результате при возрастании Δ_K достигается ситуация, при которой оказывается, что $E_{K0}^{(s)} > E_{K0}^{(n)}$. Таким образом, исчезновению неустойчивости нормального состояния при λ_{Km}^{-1} [2] соответствует исчезновение выигрыша в энергии сверхпроводящего состояния по отношению к нормальному. При стремлении λ_K^{-1} к λ_{Km}^{-1} температура сверхпроводящего перехода T_c должна стремиться к нулю. Низкая температура T_c и большая величина Δ_K в этой области изменения константы связи λ_K^{-1} являются, по-видимому, причиной большого значения отношения $2\Delta_K/T_c$ и развитых квантовых флуктуаций, наблюдающихся в недодопированных (*underdoped*) купратных сверхпроводниках [8].

Наличие седловой точки вблизи уровня Ферми позволило объяснить наблюдаемый в высокотемпературных сверхпроводниках пик в неупругом нейтронном рассеянии [9].

Один из авторов (Ю. В. Копаев) выражает благодарность за поддержку Федеральной программе “Интеграция” (проекты # A0133, A0155).

1. В. И. Белявский, В. В. Капаев, Ю. В. Копаев, *ЖЭТФ* **118**, 941 (2000).
2. В. И. Белявский, Ю. В. Копаев, *Письма в ЖЭТФ* **72**, 734 (2000).
3. Z.-X. Shen, W. E. Spicer, D. M. King et al., *Science* **267**, 343 (1995).
4. P. Fulde and R. A. Ferrell, *Phys. Rev.* **135**, A550 (1964).
5. А. И. Ларкин, Ю. Н. Овчинников, *ЖЭТФ* **47**, 1136 (1964).
6. M. Chiao, R. W. Hill, C. Lupien et al., *Phys. Rev.* **B62**, 3554 (2000).
7. M. R. Norman, M. Randeria, B. Janko, and J. C. Campuzano, *Phys. Rev.* **B61**, 14742 (2000).
8. W. Zheng, *Phys. Rev.* **B62**, 4042 (2000).
9. A. A. Abrikosov, *Phys. Rev.* **B57**, 8656 (1998).