

Возможный механизм сверхпроводимости в высокотемпературных сверхпроводниках

И. И. Амелин

Мордовский государственный университет, 430000 Саранск, Россия

Поступила в редакцию 19 декабря 2002 г.

В приближении Шубина–Вонсовского определена температура образования ($T^* \sim 135$ К) локальных электронных пар в CuO_2 -плоскостях кристалла $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$. С учетом данной оценки получено значение кулоновского псевдопотенциала $\mu^* \approx -0.15$. При наличии сильной электрон-фононной связи ($\lambda \sim 0.5$) и электронной корреляции в электронном спаривании оценка критической температуры $T_c \approx 99$ К по порядку величины соответствует экспериментальному значению. Вычислено отношение $2\Delta/kT_c \approx 4.13$, которое подтверждает наличие эффекта сильного спаривания электронов.

PACS: 74.20.Kk, 74.80.Dm

В [1] предсказано образование волн зарядовой плотности (ВЗП) в анионной подсистеме CuO_2 -плоскостей высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП), связанное с выполнением условий Шубина–Вонсовского. Эксперименты убедительно подтвердили наличие данного явления [2]. При наличии ВЗП с участием колебаний атомов в [3] рассмотрены возможные причины образования локальных электронных пар (ЛЭП). Температура T^* образования ЛЭП зависит от числа дырок $t_1 < 1$ и $t < 1$ в p - и d -состояниях ионов O и Cu плоскостей CuO_2 и оценивается величиной $T^* \leq 155$ К. При незначительном увеличении числа дырок t_1 и уменьшении дырок t температура T^* имеет колоколообразную форму и соответствует экспериментальной зависимости $T_c(\delta)$ кристалла $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$. На основе данной модели сверхпроводимости в [4] предложен путь создания ВТСП с высокой критической температурой T_c , в которых возможно наличие параметров $t_1 = 1$ и $t = 1$ соответственно большие T^* и T_c . По-видимому, данные условия реализуются в интерфейсе CuO–Cu. В данном приближении грубая оценка температуры дает значение $T^* \sim 10^4$ К [5]. При концентрации в интерфейсном слое $n \sim 1.6 \cdot 10^{20}$ см⁻³ и эффективной массе носителей $m^* \sim m_e$ температура начала бозе-эйнштейновской конденсации может иметь значение $T_c \sim 1000$ К. Полученная оценка температуры T_c по порядку величины соответствует экспериментальному значению [6]. Таким образом, для получения комнатотемпературной сверхпроводимости (КТСП) вещества должны иметь, по всей вероятности, слоистую структуру типа ...–Cu–CuO–Cu–CuO–...

Многие экспериментальные факты, в том числе и эксперименты по измерению изотопического эффек-

та в ВТСП, говорят о том, что образование СП состояния связано с электрон-фононным взаимодействием (ЭФВ). Кроме того, в образовании СП состояния должны принимать участие и электрон-электронные взаимодействия. Из рассмотрения обычных формул БКШ для T_c или их обобщений в случае сильной электрон-фононной связи следует [7]:

$$T_c = \omega_{ph} \exp \left\{ -\frac{1 + \lambda}{\lambda - \mu^*} \right\}, \quad (1)$$

где $\mu^* = \mu / (1 + \mu \cdot \ln(B/\omega_{ph}))$ – кулоновский псевдопотенциал, B – полуширина зоны, ω_{ph} – энергия колебаний атомов. Если мы имеем кулоновское взаимодействие электронов U и $N(0)$ – плотность состояний на спин на поверхности Ферми, то $\mu = U \cdot N(0)$.

По нашему мнению, образование СП состояния в ВТСП и в системах M_3C_{60} имеет одну и ту же природу. В [8] приводятся значения параметра $N(0) \approx 10$ –14/эВ·спин для систем M_3C_{60} в узкой зоне с $B \approx 0.25$ эВ, полученные из измерений парамагнитной восприимчивости. В ВТСП CuO_2 -плоскости имеют также узкую p -подзону с параметром $B \sim 0.4$ эВ [3], в которой плотность состояний может иметь значение $N(0) \approx 10$ /эВ·спин. Скачок теплоемкости $\Delta C/T_c$ в этих классах веществ имеет одно и то же значение – 75 (Rb_3C_{60}), 68 (K_3C_{60}) [8] и 67 мДж/К²·моль (YBCO-123) [9]. Такой большой скачок теплоемкости, отнесенный к молю, равен $\Delta C \approx 0.72R$ ($R = N_A k$). Столь большой скачок теплоемкости иногда интерпретируется как подтверждение механизма бозе-конденсации электронных пар, существующих выше T_c , то есть $\Delta C = N \cdot k$, где N – число этих пар порядка полного числа частиц, k – постоянная Больцмана [9]. С нашей точки зрения, большой ска-

чок теплоемкости указывает на сильную связь и связан со значительной перестройкой электронной системы с плотностью $n \approx 10^{21} \text{ см}^{-3}$ и эффективной массой носителей $m \sim 1-2m_e$. Поскольку в данных системах наблюдается изотопический сдвиг, то очевидно, что при образовании СП состояния необходимо учитывать и колебания атомов. В [10] дается температура Дебая $\Theta_D = 2230 \text{ К}$ (0.19 эВ) для веществ, состоящих из атомов С. Типичные энергии ω_{ph} колебаний атомов С в молекуле C_{60} составляют 0.034–0.195 эВ [8]. Поскольку атом О имеет также небольшую массу, сравнимую по порядку величины с массой атома С, то средняя энергия колебаний анионов О в ВТСП, по-видимому, будет иметь значение $\omega_{ph} \sim 10^3 \text{ К}$ (0.086 эВ).

В [9] дается оценка параметра $\lambda \approx 0.4-0.8$ и экспериментальное значение соотношения $2\Delta/kT_c \approx 5$ кристалла YBCO. Из экспериментальных исследований [11] следует, что электронное спаривание за счет ЭФВ дополняется электронной корреляцией, которую необходимо учитывать при объяснении СП состояния ВТСП. Для $YBa_2Cu_3O_7$ получена оценка параметра $\lambda \approx 0.6$ с учетом электронной корреляции при $\Theta_D \approx 400 \text{ К}$. В обычных СП с широкими зонами параметры λ и Θ_D имеют значения порядка $\lambda \sim 0.4-1.0$ и $\Theta_D \sim 400 \text{ К}$ [12]. В ВТСП и M_3C_{60} при наличии узких зон проводимости с учетом большой энергии колебаний легких атомов О и С порядка $\omega_{ph} \sim 10^3 \text{ К}$ (и соответственно больших значений энергии ЭФВ и $N(0) \sim 10/\text{эВ} \cdot \text{спин}$) вполне реальна оценка параметра $\lambda \approx 0.4-0.5$. Возьмем для кристалла YBCO параметр электрон-фононной связи $\lambda \approx 0.5$. Без учета ЭФВ для YBCO энергия образования ЛЭП имеет значение $T^* \approx 135 \text{ К}$ (0.012 эВ) [3]. Поскольку речь идет об энергии спаривания электронов, то данная энергия соответствует энергии притяжения, тогда $U = -T^*$ и $\mu \approx -T^*N(0) \approx -0.12$. При вычислении псевдопотенциала получается значение $\mu^* \approx -0.15$. Подставляя параметры в (1), получаем оценку $T_c \approx 99 \text{ К}$, которая близка к экспериментальному значению. В заключение можно отметить, что параметр T^* по порядку величины соответствует T_c , то есть $T_c \sim T^*$. Поскольку в кристалле $YBa_2Cu_3O_{6+\delta}$ $T^*(\delta)$ имеет колоколообразную форму [3], то, получая $T_c(\delta)$ с помощью (1), будем иметь соответствие с экспериментальной зависимостью $T_c(\delta)$.

Изотопический эффект дает важную информацию о механизме сверхпроводимости. В теории БКШ для систем с одним типом ионов массы M температура перехода ведет себя как $T_c \sim M^{-\alpha}$ где $\alpha = 0.5$. Из данного соотношения следует, что у веществ, состоящих из атомов небольшой массы, температура T_c

была бы значительной. Предположим, что СП состояние в ВТСП связано только с ЭФВ. В этом случае подстановка параметров λ и $\mu^* = 0$ в (1) дает значение $T_c \approx 50 \text{ К}$.

Авторами [13] исследована система A_xC_{60} , где $A = Bg_3CH$, в которой критическая температура имеет значение $T_c = 117 \text{ К}$. В [8] дан обзор экспериментальных и теоретических работ по исследованию фуллеридов M_xC_{60} . Получены оценки параметров, необходимые для вычисления T_c . В основном получаются примерно те же значения параметров ω_{ph} и λ , что и для ВТСП, за исключением параметра B , который для M_3C_{60} имеет значение $B = 0.25 \text{ эВ}$. В приближении Шубина–Вонсовского предварительные оценки температуры T^* для систем M_3C_{60} и A_xC_{60} имеют значения 21 К и 105 К, соответственно. Этим значениям соответствует кулоновский псевдопотенциал $\mu^* = -0.02$ и $\mu^* = -0.1$. Подставляя значения параметров μ^* , $\lambda = 0.5$ и B в (1), получим для M_3C_{60} и A_xC_{60} температуру $T_c = 56 \text{ К}$ и 82 К. По-видимому, для системы M_3C_{60} параметр λ имеет несколько меньшее значение. При $\lambda = 0.4$ и $\mu^* = 0$ температура $T_c \approx 30 \text{ К}$ соответствует экспериментальному значению, то есть в M_3C_{60} при образовании СП состояния ЭФВ будет определяющим. В [8] отмечается, что в системах M_3C_{60} параметр $N(0)$ зависит от расстояния d между двумя атомами С ближайших соседних молекул C_{60} как $N(0) \sim d^a$ при $a = 2.7$. Это связано с тем, что при увеличении d параметр B уменьшается, что приводит к увеличению $N(0)$ и λ . В кристалле A_xC_{60} , как показывают исследования кристаллической решетки [13], параметр d увеличен по сравнению с d в M_3C_{60} . Возьмем $N(0) \approx 15/\text{эВ} \cdot \text{спин}$ и $\lambda \approx 0.6$, это дает $\mu^* = -0.15$ и, соответственно, температуру $T_c \approx 122 \text{ К}$.

В [8] отмечается, что в ВТСП и системах M_xC_{60} соотношение $2\Delta/T_c$, где Δ – значение сверхпроводящей щели, больше числа 3.53, которое получается из теории БКШ. Это говорит о том, что в данных веществах присутствуют эффекты сильного спаривания электронов. В [8] дается формула для определения данного соотношения в случае сильной связи:

$$\frac{2\Delta}{kT_c} = 3.53 \left[1 + 12.5 \left(\frac{T_c}{\omega_{ln}} \right)^2 \ln \left(\frac{\omega_{ln}}{2T_c} \right) \right], \quad (2)$$

где ω_{ln} – логарифмически средняя фононная частота. После подстановки ω_{ln} и T_c для YBCO получаем $2\Delta/kT_c \approx 4.1$. Для YBCO экспериментальное значение $2\Delta/kT_c \approx 5$ [9].

В настоящее время идет дискуссия о механизмах сверхпроводимости в ВТСП. В частности, в некоторых работах СП состояние связывают с анти-

ферромагнитными флуктуациями в токнесущих CuO_2 -плоскостях. В этом случае состояние иона Cu должно быть близко к состоянию Cu^{2+} [9]. Но по данным спектроскопических исследований дырки размещаются скорее на атомах кислорода, валентность которого становится ближе к -1 [14]. Сверхобмен магнитных моментов ионов Cu^{2+} через заполненные p -орбитали кислорода приводит к с антиферромагнитному основному состоянию. Если же на какой-либо p -орбитали кислорода располагается только один электрон, тогда сверхобмен будет способствовать ферромагнитному упорядочению моментов ионов Cu^{2+} , то есть вблизи дырки, локализованной на кислороде, возникает область с тенденцией к ферромагнитному упорядочению. Из этого видно, что внесение дырок на кислородные орбитали сопровождается усилением конкурирующего магнитного взаимодействия, которое, начиная с некоторой критической концентрации дырок, резко подавляет неелевское антиферромагнитное состояние. В результате этого температура Нееля падает и система локальных магнитных моментов Cu^{2+} переходит в немагнитное состояние. Кроме того, при допировании кристалла YBCO в CuO_2 -плоскостях происходит стремление ионов Cu к состоянию Cu^{1+} [3, 15]. Эксперименты по измерению магнитного момента и температуры Нееля в YBCO подтверждают данную точку зрения [16].

Анализируя вышеизложенное, можно отметить, что предлагаемая модель образования СП состояния в ВТСП объясняет следующие экспериментальные факты:

- 1) наличие бозе-частиц и псевдощели при $T > T_c$, которое подтверждается экспериментальными исследованиями ВТСП [17]. В [18] образование псевдощели объясняется за счет локального спаривания квазичастиц без фазовой когерентности между парами;
- 2) большой скачок теплоемкости при переходе в СП состояние;
- 3) значение критической температуры T_c ;
- 4) колоколообразную зависимость $T_c(\delta)$ кристалла $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$ при увеличении δ ;
- 5) увеличение T_c от большого давления, кото-

рое является следствием увеличения межцентровых электрон-электронных взаимодействий;

6) резкое падение T_c при наличии кислородных вакансий и при замещении ионов Si на ионы Zn в CuO_2 -плоскостях вследствие изменения межцентровых электрон-электронных взаимодействий;

7) значение величины $2\Delta/kT_c$;

8) значение температуры $T_c = 10^3$ К в интерфейсе Cu-CuO .

-
1. И. И. Амелин, СФХТ **4**, 1073 (1991).
 2. А. И. Головашкин, А. П. Русаков, УФН **170**, 192 (2000).
 3. И. И. Амелин, Письма в ЖЭТФ **70**, 24 (1999).
 4. И. И. Амелин, ЖФХ **73**, 2274 (1999).
 5. И. И. Амелин, Письма в ЖЭТФ **76**, 219 (2002).
 6. В. В. Осипов, И. В. Кочев, С. В. Наумов, ЖЭТФ **120**, 1246 (2001).
 7. *Проблема высокотемпературной сверхпроводимости*, под редакцией В. Л. Гинзбурга и Д. А. Киржница, М.: Наука, 1977, с. 110.
 8. O. Gunnarsson, Rev. Mod. Phys. **69**, 575 (1997).
 9. Н. М. Плакида, *Высокотемпературные сверхпроводники*, М.: Межд. прогр. образ., 1996, с. 195.
 10. Ч. Киттель, *Введение в физику твердого тела*, М.: Наука, 1978, с. 229.
 11. A. L. Solovjov, V. M. Dmitriev, H.-U. Habermeier et al., Phys. Rev. **B55**, 8551 (1997).
 12. Е. Г. Максимов, Д. Ю. Саврасов, С. Ю. Саврасов, УФН **167**, 353 (1997).
 13. J. H. Schön, Ch. Kloc, and B. Batlogg, Science **293**, 2432 (2001).
 14. G. S. Grader, P. K. Gallagher, and A. T. Fiory, Phys. Rev. **B38**, 844 (1988).
 15. И. И. Амелин, ФНТ **22**, 539 (1996).
 16. J. Rossat-Mignod, L. P. Regnault, C. Vettier et al., Physica **C185-189**, 86 (1991); **B180-181**, 383 (1992); L. P. Regnault, P. Bourges, P. Barlet et al., Physica **C235-240**, 59 (1994).
 17. В. Ф. Гантмахер, Р. А. Емельченко, И. Г. Науменко и др., Письма в ЖЭТФ **72**, 33 (2000).
 18. R. Emery and P. Kivelson, Nature **374**, 434 (1995).