Письма в ЖЭТФ, том 100, вып. 8, с. 570 – 576 © 2014 г. 25 октября

Об оптическом правиле сумм в многозонных сверхпроводниках

П. И. Арсеев, С. О. Лойко, Н. К. Федоров[1)]

Физический институт им. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 13 августа 2014 г.

В стандартной модели Бардина–Купера–Шиффера (БКШ) правило сумм дает связь между изменением интеграла от действительной части проводимости по частоте при сверхпроводящем переходе со сверхтекучей плотностью. В обычных низкотемпературных сверхпроводниках эти две величины становятся одинаковыми, если проводимость интегрируется до частоты порядка нескольких значений сверхпроводящей щели. Оптические эксперименты в купратных высокотемпературных сверхпроводниках, проведенные многими группами исследователей во всем мире, показали, что для того чтобы воспроизвести спектральный вес сверхтекучей компоненты, необходимо интегрировать до гораздо более высоких частот (порядка ширины зоны). Предложена интерпретация результатов этих экспериментов, основанная на учете сложной кристаллической структуры купратов, в которых несколько орбиталей различной симметрии выходит на уровень Ферми.

DOI: 10.7868/S0370274X14200077

Для любой системы взаимодействующих электронов выполняется правило сумм для оптической проводимости $\sigma(\omega)$, впервые полученное Р. Кубо [1]:

$$\int_0^\infty \operatorname{Re}\sigma(\omega)d\omega = \frac{\pi n e^2}{2m}\,, \qquad (1)$$

где n – полная плотность электронов, m – “голая” масса электрона.

Замечательным его свойством является то, что независимо от природы взаимодействия между электронами при любых изменениях оптической проводимости с температурой полный спектральный вес $\operatorname{Re}\sigma(\omega)$ сохраняется. При переходе в сверхпроводящее состояние в спектре возбуждений открывается щель, что приводит к уменьшению действительной части проводимости в области низких частот. Однако возникающий из-за этого недостаток спектрального веса компенсируется вкладом сверхтекучей компоненты на нулевой частоте:

$$\operatorname{Re}\sigma_{\mathrm{SC}}(\omega) = \pi e^2 D^{(s)}\delta(\omega) + \operatorname{Re}\sigma_{\mathrm{SC}}^{(\mathrm{reg})}(\omega).$$

Амплитуда этого вклада $D^{(s)}$, которую обычно выражают через сверхтекучую плотность n_s или лондоновскую глубину проникновения λ_{L}:

$$D^{(s)} = \frac{c^2}{8\pi e^2 \lambda_{\mathrm{L}}^2},$$

оказывается равной так называемой недостающей площади между кривыми проводимости в нормальном и сверхпроводящем состояниях. Эта связь выражается правилом сумм Феррела–Гловера–Тинкхама [2, 3]:

$$\frac{\pi e^2}{2}D^{(s)} = \int_{0+}^\infty [\operatorname{Re}\sigma_n(\omega) - \operatorname{Re}\sigma_{\mathrm{SC}}(\omega)]d\omega. \qquad (2)$$

В реальной системе измерения оптической проводимости проводятся в конечном интервале частот. Для твердых тел с зонной структурой возникает естественный вопрос: как модифицируется правило сумм, если интегрирование захватывает конечное число зон. В металлах, в которых одна электронная зона пересекает уровень Ферми, традиционно рассматривают следующее правило сумм [1]:

$$\int_0^{\Omega_c} \operatorname{Re}\sigma(\omega)d\omega \equiv W = \frac{\pi e^2}{2}D, \qquad (3)$$

где

$$D = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k},\alpha}\frac{\partial^2 \xi_{\mathbf{k}}}{\partial k_x^2}\left\langle n_{\mathbf{k},\alpha}\right\rangle. \qquad (4)$$

Здесь $\xi_{\mathbf{k}}$ – закон дисперсии для электрона в зоне, $n_{\mathbf{k},\alpha}$ – среднее число заполнения состояния с квазиимпульсом $\mathbf{k}$ и проекцией спина α, которое стандартным образом определяется через одночастичную функцию Грина–Келдыша:

$$\langle n_{\mathbf{k},\alpha}\rangle = -i\int G^{<}(\mathbf{k},\varepsilon)\frac{d\varepsilon}{2\pi}.$$

Верхний предел интегрирования Ω_c в (3) выбирается так, чтобы были задействованы все возможные

[1)]e-mail: fedorov@lpi.ru

переходы между состояниями внутри зоны и в то же время исключены межзонные переходы.

Видно, что в приближении квадратичного закона дисперсии зонных электронов сумма в правой части (4) становится пропорциональной отношению концентрации электронов в зоне к эффективной массе. В более общем случае неквадратичной дисперсии зонных электронов в поведении величины D начинает играть роль конкретный вид функции Грина, который определяется, в частности, взаимодействиями, имеющими место в системе. Кроме того, $G^{<}(\mathbf{k},\varepsilon)$ зависит от температуры. Если отслеживать температурную эволюцию оптического интеграла при фиксированном Ω_c, то она в данном случае не сводится к простому перераспределению спектрального веса. Полный спектральный вес внутри зоны меняется с температурой, правило сумм "нарушается". Аналогичное "нарушение" правила сумм возможно и при переходе системы из нормального состояния в сверхпроводящее [4]. Неквадратичность закона дисперсии зонных электронов и изменение средних чисел заполнения $\langle n_{\mathbf{k},\alpha}\rangle$ вследствие модификации одночастичного спектра при открытии сверхпроводящей щели могут приводить к тому, что значения D в нормальном и сверхпроводящем состояниях будут отличаться друг от друга:

$$D_n \neq D_{\mathrm{SC}}.$$

В этом случае однозонный вариант правила сумм Феррела–Гловера–Тинкхама содержит дополнительный вклад в правой части, связанный с увеличением (или уменьшением) спектрального веса [4]:

$$\frac{\pi e^2 D^{(s)}}{2} = \int\limits_{0+}^{\Omega_c} [\operatorname{Re}\sigma_n(\omega) - \operatorname{Re}\sigma_{\mathrm{SC}}(\omega)]d\omega - \\ - \frac{\pi e^2 (D_n - D_{\mathrm{SC}})}{2}. \quad (5)$$

Недостаток спектрального веса (первое слагаемое в правой части (5)), возникающий из-за открытия щели в спектре возбуждений при переходе в сверхпроводящее состояние, уже не компенсируется вкладом сверхтекучей компоненты на нулевой частоте (левая часть (5)).

Изменение полного спектрального веса данной зоны (второе слагаемое в правой части (5)), разумеется, дополняется вкладом из области частот, отвечающим межзонным переходам, так, чтобы удовлетворялось полное правило сумм (2). Таким образом, имеем:

$$\frac{\pi e^2}{2}(D_n - D_{\mathrm{SC}}) = -\int\limits_{\Omega_c}^{\infty} [\operatorname{Re}\sigma_n(\omega) - \operatorname{Re}\sigma_{\mathrm{SC}}(\omega)]d\omega. \quad (6)$$

Другой характеристикой "необычности" сверхпроводника с точки зрения правила сумм является масштаб частот, на котором оптическая проводимость в сверхпроводящем состоянии существенно отлична от проводимости в нормальном состоянии. В обычных низкотемпературных сверхпроводниках, которые хорошо описываются теорией Бардина–Купера–Шиффера (БКШ), значения оптической проводимости в нормальном и сверхпроводящем состояниях существенно отличны друг от друга лишь в диапазоне частот от 0 до нескольких Δ. При более высоких частотах они практически совпадают [2, 3]. Согласно (6) это приводит к тому, что в пренебрежении малыми величинами порядка $(\Delta/\varepsilon_{\mathrm{F}})^2$ выполняется равенство $D_n = D_{\mathrm{SC}}$, т.е. правило сумм не нарушается. Интеграл в правой части (5), который формально берется по всей ширине зоны, в действительности набирает свое значение на масштабах частот порядка нескольких Δ. Оптические эксперименты в купратных высокотемпературных сверхпроводниках (ВТСП) купратах [5–12], проведенные многими группами исследователей во всем мире, показали, что для того чтобы воспроизвести спектральный вес сверхтекучей компоненты, необходимо интегрировать до гораздо более высоких частот (порядка ширины зоны). Кроме того, для целого ряда купратов сообщается об изменениях полного зонного спектрального веса при сверхпроводящем переходе. Вместе с тем их относительная величина составляет меньше процента. Точность измерения таких малых изменений может вызывать естественные сомнения. Поэтому более определенной характеристикой, позволяющей количественно описывать степень "нарушения" правила сумм, является скорость выхода интеграла $\int\limits_0^{\omega_c} [\operatorname{Re}\sigma_n(\omega) - \operatorname{Re}\sigma_{\mathrm{SC}}(\omega)]d\omega$ с ростом частоты обрезания ω_c на асимптотическое значение, которое согласно (5) равно $\pi e^2 D^{(s)}/2[1 + (D_n - D_{\mathrm{SC}})/D^{(s)}]$. В ВТСП-купратах эта скорость мала по сравнению с обычными сверхпроводниками. В результате в (5) становится существенным весь интервал интегрирования вплоть до частот порядка ширины зоны и более [10]. Неожиданность такого результата заключается в том, что влияние сверхпроводимости эффективно распространяется на область частот, много больших Δ.

Мы покажем, что объяснение такого “необычного” поведения спектрального веса как функции частоты обрезания может заключаться в учете особенностей энергетического спектра ВТСП-купратов. В элементарной ячейке этих соединений находится несколько атомов с орбиталями различной симметрии, выходящими на уровень Ферми. Поэтому в них автоматически возникает многозонная картина с сильноанизотропной гибридизацией исходных атомных состояний. Для понимания того, какие именно свойства спектра необходимы для проявления подобного рода эффектов, мы рассмотрели двухзонную модель сверхпроводника, описывающуюся гамильтонианом

$$\begin{aligned} H = \sum_{\mathbf{k},\alpha} \xi_a(\mathbf{k}) a^+_{\mathbf{k},\alpha} a_{\mathbf{k},\alpha} + \sum_{\mathbf{k},\alpha} \xi_c(\mathbf{k}) c^+_{\mathbf{k},\alpha} c_{\mathbf{k},\alpha} + \\ + \sum_{\mathbf{k},\alpha} [t_{ac}(\mathbf{k}) a^+_{\mathbf{k},\alpha} c_{\mathbf{k},\alpha} + \text{h.c.}] - \\ - \sum_{\mathbf{k}} \left(\Delta_a a^+_{-\mathbf{k}\downarrow} a^+_{\mathbf{k}\uparrow} + \text{h.c.} \right) - \\ - \sum_{\mathbf{k}} \left(\Delta_c c^+_{-\mathbf{k}\downarrow} c^+_{\mathbf{k}\uparrow} + \text{h.c.} \right), \end{aligned} \tag{7}$$

где $a^+_{\mathbf{k},\alpha}$ и $c^+_{\mathbf{k},\alpha}$ – операторы рождения электронов в состояниях с квазиимпульсом $\mathbf{k}$ и спином α в зонах a и c, порождаемых атомными орбиталями разных типов симметрии, $\xi_a(\mathbf{k})$ и $\xi_c(\mathbf{k})$ – энергии электронов в соответствующих зонах, $t_{ac}(\mathbf{k})$ – матричный элемент одночастичной межзонной гибридизации [13]. Последние два слагаемых в (7) описывают взаимодействие между электронами в зонах. Они сразу записаны в приближении среднего поля. Введенные здесь аномальные средние Δ_a и Δ_c определяются стандартным образом:

$$\begin{aligned} \Delta_a = -U_a \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle a_{\mathbf{k}\uparrow} a_{-\mathbf{k}\downarrow} \rangle, \\ \Delta_c = -U_c \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}\uparrow} c_{-\mathbf{k}\downarrow} \rangle. \end{aligned} \tag{8}$$

Поскольку для наших целей не имеет значения конкретный механизм, обусловливающий сверхпроводящее спаривание между электронами, мы для простоты считаем, что реальное взаимодействие в обеих зонах является точечным, как в уравнениях Горькова. В результате затравочные параметры порядка в зонах a и c (8) оказываются изотропными, т.е. не зависят от импульса.

Оптическая проводимость в такой модели была рассчитана по стандартной формуле с помощью диаграммной техники для неравновесных процессов [14, 15]. Окончательное выражение для действительной части проводимости как функции частоты имеет вид

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}\sigma_{lm}(\omega) = \frac{4e^2}{\omega} \int \frac{d^3k d\varepsilon}{(2\pi)^4} (n_\varepsilon - n_{\varepsilon+\omega}) \times \\ \times \operatorname{Sp}\left[\frac{\partial \widehat{\xi}}{\partial k_l} \left(\widehat{G}''_{\varepsilon+\omega} \frac{\partial \widehat{\xi}}{\partial k_m} \widehat{G}''_\varepsilon + \widehat{F}''_{\varepsilon+\omega} \frac{\partial \widehat{\xi}}{\partial k_m} \widehat{F}''_\varepsilon \right) \right] + \\ + \pi e^2 D^{(s)}_{lm} \delta(\omega). \end{aligned} \tag{9}$$

Первое слагаемое в (9) возникает из усреднения коррелятора ток–ток и описывает парамагнитную часть отклика. Второе, диамагнитное слагаемое отлично от нуля только в сверхпроводящем состоянии:

$$D^{(s)}_{lm} = 16 \int n_\varepsilon \operatorname{Sp}\left(\frac{\partial \widehat{\xi}}{\partial k_l} \widehat{F}'_\varepsilon \frac{\partial \widehat{\xi}}{\partial k_m} \widehat{F}''_\varepsilon \right) \frac{d^3k d\varepsilon}{(2\pi)^4}. \tag{10}$$

Здесь $\widehat{\xi} = \begin{pmatrix} \xi_a & t_{ac} \\ t^*_{ac} & \xi_c \end{pmatrix}$, $\widehat{G}'_\varepsilon \equiv \operatorname{Re}\widehat{G}^A(\mathbf{k},\varepsilon)$, $\widehat{G}''_\varepsilon \equiv \operatorname{Im}\widehat{G}^A(\mathbf{k},\varepsilon)$, $\widehat{F}'_\varepsilon \equiv \operatorname{Re}\widehat{F}^A(\mathbf{k},\varepsilon)$, $\widehat{F}''_\varepsilon \equiv \operatorname{Im}\widehat{F}^A(\mathbf{k},\varepsilon)$. Опережающие нормальные ($\widehat{G}^A$) и аномальные ($\widehat{F}^A$) функции Грина определяются стандартным образом:

$$\begin{aligned} \widehat{G}^A(\mathbf{k},\varepsilon) = i \int\limits_{-\infty}^{0} d(t-t') e^{i\varepsilon(t-t')} \times \\ \times \begin{pmatrix} \langle\{\widehat{a}_{\mathbf{k},\alpha}(t) \widehat{a}^+_{\mathbf{k},\alpha}(t')\}\rangle & \langle\{\widehat{a}_{\mathbf{k},\alpha}(t) \widehat{c}^+_{\mathbf{k},\alpha}(t')\}\rangle \\ \langle\{\widehat{c}_{\mathbf{k},\alpha}(t) \widehat{a}^+_{\mathbf{k},\alpha}(t')\}\rangle & \langle\{\widehat{c}_{\mathbf{k},\alpha}(t) \widehat{c}^+_{\mathbf{k},\alpha}(t')\}\rangle \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma^y_{\alpha\beta} \widehat{F}^A(\mathbf{k},\varepsilon) = \int\limits_{-\infty}^{0} d(t-t') e^{i\varepsilon(t-t')} \times \\ \times \begin{pmatrix} \langle\{\widehat{a}_{\mathbf{k},\alpha}(t) \widehat{a}_{-\mathbf{k},\beta}(t')\}\rangle & \langle\{\widehat{a}_{\mathbf{k},\alpha}(t) \widehat{c}_{-\mathbf{k},\beta}(t')\}\rangle \\ \langle\{\widehat{c}_{\mathbf{k},\alpha}(t) \widehat{a}_{-\mathbf{k},\beta}(t')\}\rangle & \langle\{\widehat{c}_{\mathbf{k},\alpha}(t) \widehat{c}_{-\mathbf{k},\beta}(t')\}\rangle \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Как указывалось выше, степень “нарушения” правила сумм удобно характеризовать следующей величиной:

$$\delta W(\omega_c) = \int\limits_{0+}^{\omega_c} [\operatorname{Re}\sigma_n(\omega) - \operatorname{Re}\sigma_{\text{SC}}(\omega)] d\omega. \tag{11}$$

Отметим, что в пределе $\omega_c \to \Omega_c$, когда интегрирование в (11) охватывает все возможные переходы между состояниями двух зон, величина δW стремится к своему асимптотическому значению, диктуемому двухзонным правилом сумм:

$$\delta W(\omega_c) \to \delta W(\Omega_c) = \frac{\pi e^2 D^{(s)}}{2} \left(1 + \frac{D_n - D_{\text{SC}}}{D^{(s)}} \right).$$

Двухзонная модель (7) возникает для ВТСП довольно естественным образом, если из исходной многозонной картины, появляющейся при учете гибридизации d-орбиталей меди и p-орбиталей кислорода в плоскости CuO_2, оставить только существенные состояния вблизи уровня Ферми [15, 16]. В соответствии с этим, расчеты проводились для двух зон с законами дисперсии, характерными для простой квадратной решетки: $\xi_a(\mathbf{k}) = t_a(\cos k_x + \cos k_y)$ и $\xi_c(\mathbf{k}) = \varepsilon_{c0} + t_c(\cos k_x + \cos k_y)$. Поскольку указанные зоны сформированы из атомных орбиталей разной симметрии, матричный элемент гибридизации между ними является сильноанизотропной функцией квазиимпульса и имеет линии нулей в зоне Бриллюэна: $t_{ac}(\mathbf{k}) = t^0_{ac}(\cos k_x - \cos k_y)$. Сверхпроводимость обеспечивается притяжением между электронами в одной из зон. При этом в другой зоне даже может действовать отталкивание между электронами при условии, что ширина данной зоны гораздо больше. Различные знаки взаимодействия между электронами в зонах приводят к тому, что эффективные параметры порядка, возникающие в рассматриваемой модели, являются знакопеременными функциями квазиимпульса [13], что, по-видимому, имеет место в ВТСП. Химический потенциал в сверхпроводящем состоянии фиксируется в центре широкой зоны. Положение узкой зоны относительно химического потенциала задается параметром ε_{c0}. Для адекватного вычисления проводимости необходим учет какого-либо механизма рассеяния электронов. В данной модели рассматривалось упругое изотропное рассеяние электронов на немагнитных примесях в борновском приближении. Параметры порядка определялись самосогласованным образом путем решения системы уравнений на функции Грина, являющейся двухзонным аналогом уравнений Горькова. Для расчетов были выбраны следующие значения параметров двухзонной модели: $t_a = 30$, $t_c = -1$, $t^0_{ac} = 5$, $\Delta_a = -0.18$, $\Delta_c = 0.81$ (приведены в единицах $|t_c|$). Исследовались два случая, интересные с точки зрения интерпретации результатов оптических экспериментов с ВТСП при изменении уровня допирования [5–7, 9–12]: когда узкая зона находится глубоко под химическим потенциалом и когда химический потенциал попадает внутрь узкой зоны.

На рис. 1 приведены зависимости δW от ω_c, вычисленные при двух значениях параметра ε_{c0} ($\varepsilon_{c0} = -0.5$ и -5). В расчетах учитывалось, что при сверхпроводящем переходе, вообще говоря, происходит сдвиг химического потенциала в том случае, когда число электронов фиксировано (что соответствует условиям реального эксперимента). Видно, что

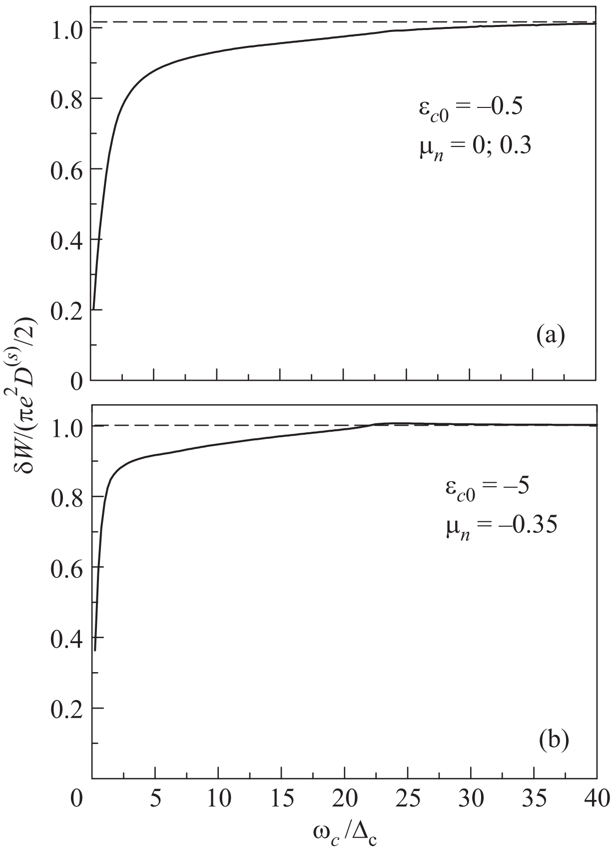

Рис. 1. Зависимость разности значений интегралов от действительной части проводимости в нормальном и сверхпроводящем состояниях δW от частоты обрезания ω_c для двух значений параметра ε_{c0}: -0.5 (a) и -5 (b). Число частиц фиксировано. Поэтому положению химического потенциала $\mu_{sc} = 0$ в сверхпроводящем состоянии соответствуют разные значения μ_n в нормальном состоянии

при больших частотах обрезания (порядка ширины зоны) нормированная разность значений спектрального веса стремится не к 1, как для теории БКШ, а к некоторому зависящему от параметров модели асимптотическому значению. Как уже указывалось выше, отличие этого значения от 1 является естественным "нарушением" правила сумм для конечного числа зон. Согласно результатам вычислений масштаб такого отличия в зависимости от параметров модели имеет порядок 1 % и меньше. Интереснее то, что скорость роста величины δW как функции ω_c в области малых частот обрезания (от 0 до нескольких Δ_c) существенно меньше, чем в модели БКШ. Если в модели БКШ спектральный вес сверхтекучей компоненты почти полностью восстанавливается при $\omega_c \simeq (4–6)\Delta_c$ [2, 3], то в рассматриваемой двухзонной модели при этих значениях ω_c восстанавливается лишь около 90 % его величины. Подобное поведение имеет место в ВТСП (см., например, [6]). “Компенсация” спектрального веса сверхтекучей компоненты (с точностью до “нарушения” правила сумм) происходит при интегрировании до гораздо больших частот обрезания, сравнимых с суммарной шириной зон. Оказывается, что скорость роста δW с увеличением частоты обрезания зависит от параметров модели. Если химический потенциал находится в узкой зоне ($\varepsilon_{c0} = -0.5$), то практически нет разницы между кривыми $\delta W(\omega_c)$, рассчитанными при фиксированном числе частиц и при фиксированном химическом потенциале (рис. 1a). Если же он находится вне узкой зоны ($\varepsilon_{c0} = -5$), то полная компенсация спектрального веса сверхтекучей компоненты происходит уже при $\omega_c \simeq 10\Delta_c$ (рис. 2). Однако в последнем случае результаты для фиксированного числа частиц (рис. 1b) и фиксированного химического потенциала (рис. 2) отличаются. Такое поведение обусловлено спецификой деформации плотности состояний при сверхпроводящем переходе, связанной с положениями особенностей ван Хова в нормальном состоянии относительно химического потенциала (см. рис. 3). Чем более симметрична зависимость плотности состояний от частоты (отсчитанной от химического потенциала), тем меньше при сверхпроводящем переходе сдвигается химический потенциал при фиксированном числе частиц, и наоборот.

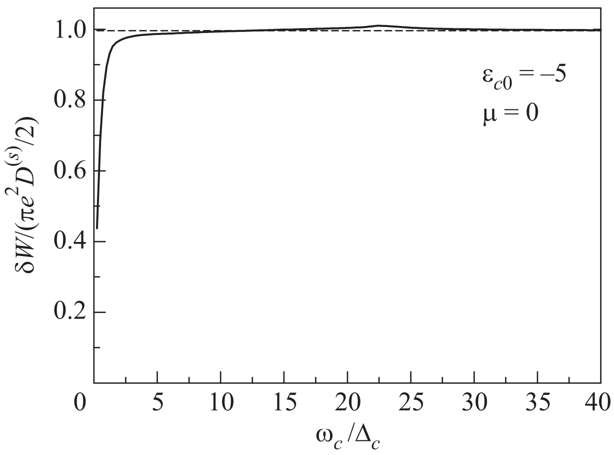

Рис. 2. Зависимость разности значений интегралов от действительной части проводимости в нормальном и сверхпроводящем состояниях δW от частоты обрезания ω_c для $\varepsilon_{c0} = -5$ при фиксированном химическом потенциале $\mu_n = \mu_{sc} = 0$

Необычно медленный (по сравнению с БКШ) выход разности значений спектральных весов в нормальном и сверхпроводящем состояниях с ростом частоты обрезания на асимптотическое значение объясняется видом спектра возбуждений. Если химический потенциал находится внутри узкой зоны ($\varepsilon_{c0} = -0.5$), то в тех областях зоны Бриллюэна, которые ответственны за возникновение особенностей ван Хова, энергии квазичастиц в зонах a и c в нормальном состоянии сравнимы с Δ_c. В этих же точках матричный элемент гибридизации $t_{ac}(\mathbf{k})$ гораздо больше (в нашем случае порядка $12\Delta_c$). Именно этой величиной (как наибольшей из всех) и определяется энергия возбуждений при заданных значениях квазиимпульса (с точностью до поправок порядка Δ_c/t_{ac}). Такое поведение спектра возбуждений, в частности, приводит к тому, что в области достаточно больших частот вблизи $|\omega| \simeq t_{ac} \simeq 12\Delta_c$, при которых в стандартной модели БКШ сверхпроводимость себя уже почти не проявляет, кривые плотности состояний в нормальном и сверхпроводящем состояниях все еще заметно отличны друг от друга (см. рис. 3a). Этим и обусловлен медленный темп стремления друг к другу зависимостей $\mathrm{Re}\,\sigma_n(\omega)$

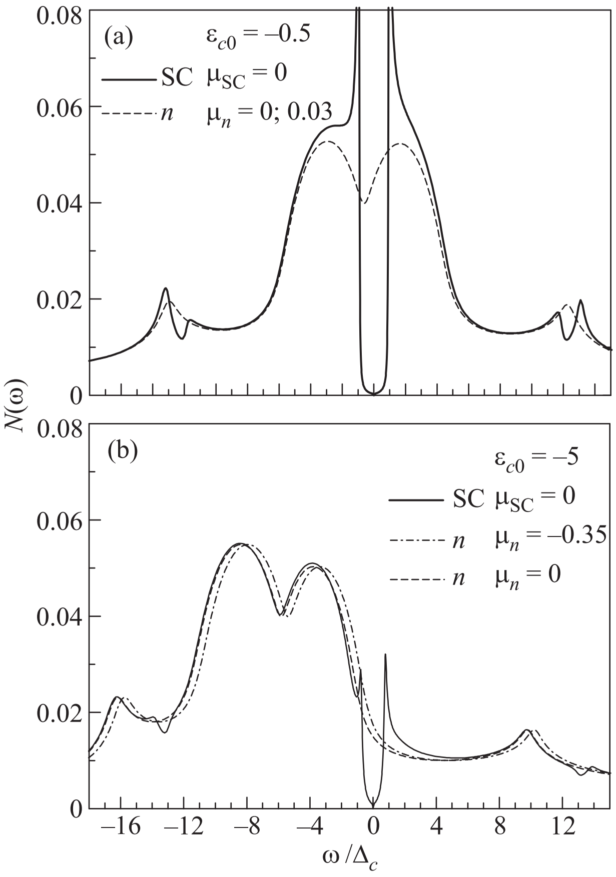

Рис. 3. Нормальная и сверхпроводящая плотности состояний для двух положений ε_{c0} центра узкой зоны относительно химического потенциала: -0.5 (a) и -5 (b)

и $\mathrm{Re}\,\sigma_{\mathrm{SC}}(\omega)$ в широком диапазоне частот. На языке правила сумм (5) это означает, что компенсация спектрального веса сверхтекучей компоненты в рассматриваемой модели происходит при интегрировании до гораздо больших частот, чем в модели БКШ. Данный эффект можно интерпретировать также в духе замечания Тинкхама [17] о том, что поведение оптической проводимости определяется зависимостью факторов когерентности от энергии электронов. В отличие от модели свободных электронов для зон проводимости, возникающих из-за гибридизации атомных орбиталей разной симметрии, имеются области спектра, достаточно далекие от поверхности Ферми, в которых факторы когерентности заметно отличаются от 0 или 1. Если химический потенциал находится вне узкой зоны ($\varepsilon_{c0} = -5$), картина меняется. Области в зоне Бриллюэна, в которых энергии квазичастиц в зонах a и c в нормальном состоянии сравнимы с Δ_c, уже не связаны с особенностями ван Хова. Поэтому их вклад не так велик, как в рассмотренном выше случае (ср. сплошную и штриховую кривые на рис. 3b). При фиксированном химическом потенциале это приводит к тому, что зависимости оптической проводимости от частоты в нормальном и сверхпроводящем состояниях становятся почти равными при частотах порядка нескольких Δ_c. Как следствие спектральный вес сверхтекучей компоненты набирается быстрее, чем при $\varepsilon_{c0} = -0.5$. Если же фиксировано число частиц, то плотности состояний в нормальном и сверхпроводящем состояниях все равно заметно отличаются друг от друга в широком диапазоне частот (сравните сплошную и штрих-пунктирную кривые на рис. 3b) за счет сдвига химического потенциала при сверхпроводящем переходе и анизотропии спектра возбуждений. Результатом этого являются и отличие величин $\mathrm{Re}\,\sigma_n(\omega)$ и $\mathrm{Re}\,\sigma_{\mathrm{SC}}(\omega)$ в широком диапазоне частот и, соответственно, на языке правила сумм (5), "медленный" набор спектрального веса сверхтекучей компоненты.

Таким образом, в двухзонной модели, эффективно описывающей зону проводимости ВТСП-купратов, было исследовано поведение интегралов от действительной части оптической проводимости по частоте в нормальном и сверхпроводящем состояниях как функции частоты обрезания. Обнаружено, что разность δW этих интегралов существенно отлична от спектрального веса сверхтекучей компоненты вплоть до частот обрезания порядка суммарной ширины зон и более. Такое поведение отличается от известных результатов для обычных БКШ-сверхпроводников и выглядит как некое "нарушение" правила сумм. Скорость роста δW с увеличением частоты обрезания зависит от параметров модели, в частности от положения химического потенциала (концентрации носителей), что согласуется с экспериментальными данными по ВТСП [5–7, 9–12]. Заметим, что дополнительный вклад в правой части правила сумм ФГТ в виде (5) возникает всегда при учете только конечного числа зон, т.е. при конечном параметре обрезания Ω_c. Появление данного вклада есть также "нарушение" правила сумм. Однако и в эксперименте, и в нашей модели эта величина мала. Поэтому основным результатом данной работы следует считать объяснение того, что медленный набор "спектрального веса проводимости" может возникать в самых обычных (изотропных s-типа) с точки зрения механизма спаривания сверхпроводниках. Все необычное поведение обусловлено тем, что в сверхпроводниках, в которых зоны вблизи уровня Ферми сформированы из гибридизованных орбиталей разной симметрии, изменение спектра и плотности состояний при переходе в сверхпроводящее состояние может происходить на масштабах, много больших Δ.

1. R. Kubo, J. Phys. Soc. Japan **12**, 570 (1957).
2. R.A. Ferrell and R.E. Glover, Phys. Rev. **109**, 1398 (1958).
3. M. Tinkham and R. A. Ferrell, Phys. Rev. Lett. **2**, 331 (1959).
4. J.E. Hirsch, Physica C **199**, 305 (1992).
5. H. Molegraaf, C. Presura, D. van der Marel, P.H. Kes, and M. Li, Science **295**, 2239 (2002).
6. A.F. Santander-Syro, R.P.S.M. Lobo, N. Bontemps, Z. Konstantinovic, Z.Z. Li, and H. Raffy, Europhys. Lett. **62**, 568 (2003).
7. A.F. Santander-Syro, R.P.S.M. Lobo, N. Bontemps, W. Lopera, D. Girata, Z. Konstantinovic, Z.Z. Li, and H. Raffy, Phys. Rev. B **70**, 134504 (2004).
8. A.V. Boris, N.N. Kovaleva, O.V. Dolgov, T. Holden, C.T. Lin, B. Keimer, and C. Bernhard, Science **304**, 708 (2004).
9. C.C. Homes, S.V. Dordevic, D.A. Bonn, R. Liang, and W.N. Hardy, Phys. Rev. B **69**, 024514 (2004).
10. G. Deutscher, A.F. Santander-Syro, and N. Bontemps, Phys. Rev. B **72**, 092504 (2005).
11. F. Carbone, A.B. Kuzmenko, H.J.A. Molegraaf, E. van Heumen, V. Lukovac, F. Marsiglio, D. van der Marel, K. Haule, G. Kotliar, H. Berger, S. Courjault, P.H. Kes, and M. Li, Phys. Rev. B **74**, 064510 (2006).
12. J. Hwang, J. Yang, T. Timusk, S.G. Sharapov, J.P. Carbotte, D.A. Bonn, R. Liang, and W.N. Hardy, Phys. Rev. B **73**, 014508 (2006).
13. P.I. Arseyev, N.K. Fedorov, and B.A. Volkov, Sol. State Commun. **100**, 581 (1996).

14. П. И. Арсеев, С. О. Лойко, Н. К. Федоров, УФН **176**, 3 (2006).
15. П. И. Арсеев, С. О. Лойко, Н. К. Федоров, Письма в ЖЭТФ **87**(6), 350 (2008).
16. С. О. Лойко, Н. К. Федоров, П. И. Арсеев, ЖЭТФ **121**, 453 (2002).
17. M. Tinkham, *Introduction to superconductivity*, II ed., McGraw-Hill (1996), §3.9.3.