

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЗАРЯДА В ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКАХ

*Ф.В.Кусмарцев⁺⁺, Д.И.Хомский ^{**}*

⁺⁺*Институт теоретической физики им. Л.Д.Ландау АН СССР
142432, Черноголовка, Московской обл.*

^{**}*Физический институт им. П.Н.Лебедева АН СССР
117924, Москва*

^{*}*Institut für Theoretische Physik der Universität zu Köln
D-5000 Köln 41, Germany*

Поступила в редакцию 3 июля 1991 г.

Показано, что в сверхпроводнике с двумя группами электронов (например, дырки в CuO_2 -плоскостях и в "резервуаре" в ВТСП) существует эффект перераспределения заряда при переходе одной из подсистем в сверхпроводящее состояние: концентрация "активных" носителей увеличивается при $T < T_c$. Этот эффект может объяснить ряд структурных аномалий в ВТСП, вызывает изменение температурной зависимости свойств сверхпроводника, может привести к ряду эффектов на контакте ВТСП с нормальными металлами и сверхпроводниками.

В большинстве высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) существуют две различные группы электронов: носители в "активных" CuO_2 -плоскостях и "резервуар" - цепочки в 123-ВТСП, BiO и TiO плоскости в Bi и Ti -ВТСП. Относительное распределение заряда между этими подсистемами определяется многими факторами (см., напр., ¹⁾) и сказывается как на нормальных, так и на сверхпроводящих свойствах. Мы хотим отметить, что оно может также зависеть от температуры для данного конкретного соединения, и, в частности, не только распределение заряда и плотность дырок в CuO_2 -плоскостях n_h влияет на T_c ²⁾, но и, обратно, переход в сверхпроводящее состояние вызывает перераспределение заряда, приводя, в частности, к увеличению n_h при $T < T_c$. Этот эффект может объяснить целый ряд структурных и иных аномалий, наблюдаемых в ВТСП, и может иметь ряд важных следствий.

Мы поясним здесь этот эффект на примере модели, в которой сверхпроводимость в ВТСП описывается как бозе-конденсация локальных пар в CuO_2 -плоскостях. Возможно, эта картина не очень реалистична, но тем не менее есть ряд аргументов в пользу такого описания ^{3,4)}: малые значения ξ , аномально большие значения $2\Delta_0/T_c$, большой скачок теплоемкости. Модель локальных пар - бозонов, или смеси бозонов и фермионов широко рассматривается в литературе ⁵, иногда под названием ε -канальной теории сверхпроводимости ⁶. (Эффект перераспределения заряда при более стандартном описании ВТСП в модели БКШ рассмотрен в ⁷⁾).

В простейшей форме можно моделировать интересующую нас ситуацию системой идеальных бозонов со спектром $\epsilon_b = \delta + \frac{p}{2m_b}$ (пары в CuO_2 плоскостях) и системой свободных фермионов $\epsilon_f = \frac{p}{2m_f}$ (дырки в резервуаре)¹⁾. Взаимодействием фермионов и бозонов мы здесь пренебрегаем, учитывая только статистический эффект - возможность перехода дырок из резервуара в CuO_2 -плоскости, где они образуют пары. (Учет взаимодействия не меняет качественных выводов).

¹⁾ Бозонная система считается трехмерной, чтобы избежать усложнений, связанных с бозе-конденсацией в двумерном случае: фактически для этого достаточно слабой дисперсии по оси c . Систему фермионов для простоты считаем двумерной.

$$n_f + 2n_b = n = \text{const} \quad (1)$$

определяет общий химический потенциал системы. Здесь n_f и n_b - концентрации фермионов и бозонов, даваемые интегралами от соответствующих ферми- и бозе-функций распределения с химпотенциалами μ и $\mu_b = 2\mu$ соответственно (так что химпотенциал на одну дырку есть μ). Если $n_b \neq 0$, при некоторой температуре T_c произойдет бозе-конденсация. При $T \leq T_c$ химпараметр фиксируется на дне бозонной зоны, $\mu_b = \delta$. Эта фиксация химпараметра и приводит к основному эффекту, упомянутому выше: к росту $n_h = 2n_b$ при понижении температуры ниже T_c . Это видно непосредственно из изменения числа фермионов n_f при $T < T_c$, когда $\mu = \delta/2$. При этом условии получаем:

$$n_f(T) = TC_\varnothing \ln[\exp(\delta/2T) + 1], \quad (2)$$

где $C_\varnothing = \frac{m_b}{2\pi}$. Из (2) видно, что с ростом T n_f растет, и, соответственно, $n_h = 2n_b = n - n_f$ падает (см. также ⁶). Качественно эффект в этой модели связан со следующим обстоятельством: в однокомпонентной ферми-системе при росте температуры $\mu(T)$ падает, $\mu(T) = \mu_\varnothing - T \exp(-\mu_\varnothing/T)$; это изменение и гарантирует сохранение полного числа фермионов. В нашем же случае вследствие бозе-конденсации $\mu(T)$ при $T < T_c$ фиксировано, вследствие чего n_f с ростом T растет и, соответственно, n_b падает. (Эффект этот становится еще сильнее в модели БКШ, где ниже T_c μ не просто постоянна, но даже уменьшается ⁷).

Само значение T_c дается обычной формулой:

$$T_c = \frac{3,31h^2 n_b^{2/3}}{m_b}, \quad (3)$$

где в нашем случае, однако, n_b зависит от температуры через соотношения (1), (2), так что соотношение (3) - это фактически самосогласованное уравнение на T_c .

В то время как в сверхпроводящей фазе эффект перераспределения заряда всегда одного знака: концентрация "активной" компоненты (здесь это бозоны, или дырки в CuO₂-плоскости) при $T < T_C$ растет - в нормальной фазе, при $T > T_0$ перераспределение заряда также возможно причем любого знака, в зависимости от того, каких частиц было больше при низких температурах (ясно, что при достаточно высокой температуре заполнение разных состояний будет выравниваться). Примеры различного возможного поведения приведены на рис. где численно рассмотрен случай зон конечной ширины.

Эффект перераспределения заряда с температурой, полученной выше и, как показано, чувствительный к переходу системы в сверхпроводящее состояние, может привести к целому ряду следствий. Прежде всего, рост n_h (увеличение положительного заряда в CuO₂-плоскости за счет резервуара) должен проявиться в структурных свойствах. Например, можно ожидать уменьшения расстояния от Cu(2) до "апексного" кислорода, лежащего по оси *c*. Соответствующий эффект был обнаружен в Bi-2212 и Bi-2223 ⁸, и, с меньшей надежностью, в 123-ВТСП (см. ^{9,10}, но и противоречащий результат ¹¹). Эффект, рассмотренный выше, может естественно объяснить сдвиг "апексного" кислорода, хотя возможен и другой механизм этого явления - перераспределение "своей" *d*-дырки на Cu(2) из $d_{x^2-y^2}$ в d_{z^2} -состояние ¹².

С перераспределением заряда ниже T_c могут также быть связаны другие наблюдаемые в ВТСП аномалии: увеличение искажения самой CuO₂-плоскости

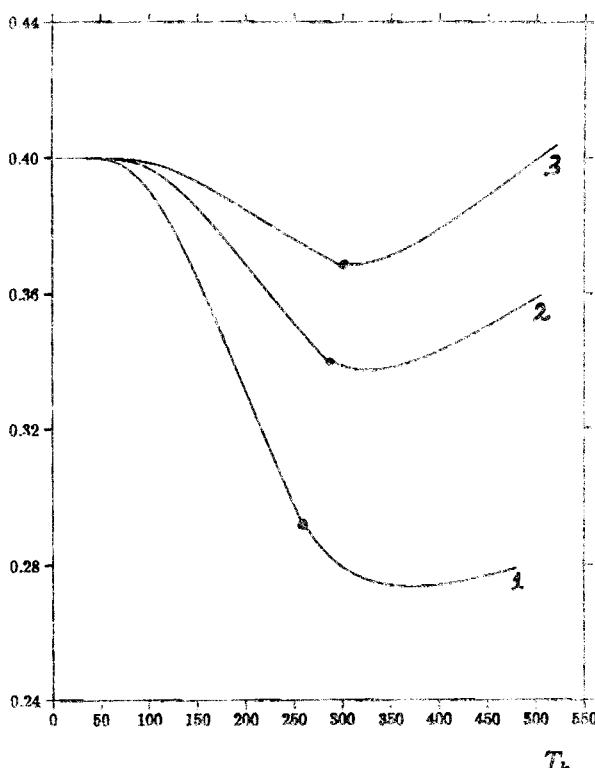


Рис. 1. Изменение концентрации дырок $n_h = 2n_d$ в CuO_2 -плоскости при следующих значениях параметров: ширина фермионной зоны $D = 1000\text{K}$, ширина базонной зоны $d = 2000\text{K}$. Кривые 1, 2, 3 соответствуют значениям сдвигов зон $\delta = 600\text{ K}, 800\text{ K}$ и 900 K соответственно. Точками отмечены T_c при этих значениях параметров

¹³, особенности в тепловом расширении ¹⁴, в сдвиге частот ЯКР ¹⁵. Рост концентрации носителей в CuO_2 -плоскости ниже T_c может модифицировать температурный ход различных термодинамических величин, в частности, сделать более крутым ход $\Delta(T)$ вблизи T_c и увеличить значение $2\Delta_0/T_c$ ⁷. Эти выводы находятся в качественном соответствии с экспериментом (см. ¹⁶).

Ряд интересных и важных эффектов может возникнуть вследствие перераспределения заряда и изменения хода химптенциала ниже T_c в контактах ВТСП с нормальными металлами и полупроводниками. Это может быть существенно в туннелировании, вызывая, в частности, асимметрию $I - V$ -характеристик, в термоэлектрических эффектах и т. д. Соответствующая модификация свойств поверхностного слоя полупроводника в контакте с ВТСП может служить чувствительным методом исследования этого эффекта, и, возможно, окажется важной при попытках создания гибридных электронных устройств на основе пленочных контактов ВТСП - полупроводник.

В заключение отметим, что сходные эффекты, по крайней мере на контактах, могут также сопровождать другие фазовые переходы с образованием щели в электронном спектре - например, переходы диэлектрик - металл. Понижение энергии занятых электронных состояний в подобных системах и соответствующее уменьшение химптенциала может привести к перетеканию на них заряда из контакта с обычными металлами, а в случае наличия в них двух электронных подсистем, как в ВТСП - и к внутреннему перераспределению заряда.

2. Uemura Y.P., et al. Phys. Rev. Lett., 1989, 62, , 2317
3. de Jongh L.J. Physica C, 1989, 161, 681.
4. Sobyanin A.A. Physica C, 1988, 153 ~ 155, 1203.
5. Micnas R., Ranninger J., Robaszkiewicz S. Rev. Mod. Phys., 1990, 62, 113.
6. Freedberg R., Lee T.D. Phys. Lett.. 1989, A138, 423; Phys. Rev., 1989, B40, 6745; Freedberg R., Lee T.D., Ren H.C. Phys. Lett., 1991, A152, 417, 423.
7. Khomskii D.I., Kusmartsev F.V. Preprint, Köln, 1991.
8. Röhler J., Larisch A. In Electronic Properties of High- T_c Superconductors and Related Compounds, Eds. H.Kusmany, M.Mehring and J.Fink, Springer Series in Solid-State Sciences, 99, 152, Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, 1990.
9. Francois M. et al. Solid State Comm., 1988, 66, 1117.
10. Conradson S.D., Raistrick I.D. Science, 1989, 243, 1340.
11. Kwei G.H. et al. Physica C, 1990, 169, 217.
12. Khomskii D.I. Physica B. (in press).
13. Toby B.H. et al. Phys. Rev. Lett., 1990, 64, 2414.
14. Meingast C. et al. Preprint, Karlsruhe, 1991.
15. Brinkmann D. In Electronic Properties of High- T_c Superconductors and Related Compounds, Eds. H.Kusmany, M.Mehring and J.Fink, Springer Series in Solid-State Sciences, 99, 195, Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, 1990.
16. Batlogg B. Physica B, 1991, 169, 7.