

Электронные пары для ВТСП

А. Ф. Андреев¹⁾

Институт физических проблем им. П. Л. Капицы РАН 119334 Москва, Россия

Поступила в редакцию 5 декабря 2003 г.

Предложена простая физическая картина сверхпроводимости предельно допированных плоскостей CuO_2 , обладающая наблюдаемыми чертами ВТСП: высокой критической температурой, $d_{x^2-y^2}$ симметрией параметра порядка, сосуществованием одноэлектронной поверхности Ферми и БЭ-конденсата заранее сформированных пар электронов.

PACS: 74.20.-z

Наиболее характерными чертами высокотемпературных сверхпроводников, кроме высокой температуры перехода, являются необычная d -симметрия параметра порядка (см. [1]) и своеобразное сосуществование хорошо выраженной одноэлектронной поверхности Ферми с явлением псевдощели [2], которое связывают с наличием заранее сформированных (то есть сформированных еще в нормальном состоянии) пар электронов, в частности, биполярных [3–7].

В настоящей работе показано, что существует простая физическая картина сверхпроводимости предельно допированных плоскостей CuO_2 (вблизи максимальной совместимой со сверхпроводимостью степени дырочного допирования), которая обладает перечисленными выше характерными чертами ВТСП.

Парные квазичастицы. Ключевым моментом является существование в кристаллах своеобразных “парных” квазичастиц в условиях применимости приближения сильной связи, то есть когда энергия взаимодействия электронов на межатомном расстоянии значительно превышает амплитуду туннелирования электрона в близкие узлы решетки. Такого типа квазичастицы ранее рассматривались [8] в квантовых кристаллах гелия и недавно Александровым и Корниловичем [6] как модель биполярных в ВТСП (см. также [9]).

Рассмотрим два электрона, локализованных на соседних (1 и 2 на рисунке) атомах меди (точнее, в элементарных ячейках, содержащих данные атомы), образующих в плоскости CuO_2 квадратную решетку. Туннелирование электрона из 2 в 4 или 6 не меняет энергию системы в силу симметрии кристаллической решетки. То же самое имеет место при туннелировании электрона из 1 в 3 или 5. Благодаря переходам такого типа пара электронов может двигаться как целое по всей плоскости, поскольку после пере-

хода $2 \rightarrow 4$ возможен переход $1 \rightarrow 7$ или $1 \rightarrow 3$ и т.д. Поскольку переходы не меняют энергии системы, движение является полностью когерентным. Пара электронов ведет себя как делокализованная бозевская квазичастица.

Для вычисления спектра квазичастиц рассмотрим локализованные состояния пары

$$|\mathbf{r}, \mathbf{r}', \alpha\beta\rangle = c_{\mathbf{r}\alpha}^+ c_{\mathbf{r}'\beta}^+ |0\rangle, \quad (1)$$

где $c_{\mathbf{r}\alpha}^+$ – операторы рождения электрона в точке \mathbf{r} с проекцией спина $\alpha = \uparrow, \downarrow$, а $|0\rangle$ – вакуум электронов.

Эффективный туннельный гамильтониан H_{eff} определяется теми матричными элементами оператора

$$H = t \sum_{\mathbf{r}\mathbf{r}'\alpha} c_{\mathbf{r}'\alpha}^+ c_{\mathbf{r}\alpha}, \quad (2)$$

которые соответствуют переходам одного из электронов на атомы меди, являющиеся следующими за ближайшими соседями первоначального атома, причем так, чтобы энергия системы двух электронов не изменилась. Здесь t – амплитуда туннелирования, которая, как известно (см. [1], стр. 1004), положительна.

Пусть \mathbf{a}_n ($n = x, y$) – периоды квадратной решетки, направленные из точки 1 в точку 2, и из точки 1 в точку 4, соответственно. Имеем

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}} |\mathbf{r}, \mathbf{r} + \mathbf{a}_x, \alpha\beta\rangle &= t(|\mathbf{r} + \mathbf{a}_x + \mathbf{a}_y, \mathbf{r} + \mathbf{a}_x, \alpha\beta\rangle + \\ &+ |\mathbf{r} + \mathbf{a}_x - \mathbf{a}_y, \mathbf{r} + \mathbf{a}_x, \alpha\beta\rangle + \\ &+ |\mathbf{r}, \mathbf{r} + \mathbf{a}_y, \alpha\beta\rangle + |\mathbf{r}, \mathbf{r} - \mathbf{a}_y, \alpha\beta\rangle) = \\ &= t(-|\mathbf{r} + \mathbf{a}_x, \mathbf{r} + \mathbf{a}_x + \mathbf{a}_y, \beta\alpha\rangle + \\ &+ |\mathbf{r} + \mathbf{a}_x - \mathbf{a}_y, \mathbf{r} + \mathbf{a}_x, \alpha\beta\rangle + \\ &+ |\mathbf{r}, \mathbf{r} + \mathbf{a}_y, \alpha\beta\rangle - |\mathbf{r} - \mathbf{a}_y, \mathbf{r}, \beta\alpha\rangle), \end{aligned} \quad (3)$$

где мы использовали антисимметрию величин (1) по аргументам (\mathbf{r}, α) и (\mathbf{r}', β) . Аналогично

¹⁾e-mail: andreev@kapitza.ras.ru

$$H_{\text{eff}} |\mathbf{r}, \mathbf{r} + \mathbf{a}_y, \alpha\beta\rangle = t(-|\mathbf{r} + \mathbf{a}_y, \mathbf{r} + \mathbf{a}_x + \mathbf{a}_y, \beta\alpha\rangle + |\mathbf{r} - \mathbf{a}_x + \mathbf{a}_y, \mathbf{r} + \mathbf{a}_y, \alpha\beta\rangle + |\mathbf{r}, \mathbf{r} + \mathbf{a}_x, \alpha\beta\rangle - |\mathbf{r} - \mathbf{a}_x, \mathbf{r}, \beta\alpha\rangle). \quad (4)$$

Полный набор локализованных состояний пары электронов определяется векторами состояний

$$|\mathbf{r}, n, \alpha\beta\rangle \equiv |\mathbf{r}, \mathbf{r} + \mathbf{a}_n, \alpha\beta\rangle, \quad (5)$$

где \mathbf{r} нумерует элементарные ячейки квадратной решетки.

Задача, очевидно, распадается на две независимые задачи отдельно для синглетных и триплетных пар, характеризующихся, соответственно, антисимметричными и симметричными по спиновым индексам α, β величинами (5). Полагая, что искомые стационарные состояния пары являются суперпозициями локализованных состояний

$$\sum_{\mathbf{r}, n} \psi_{\alpha\beta}^{(n)} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} |\mathbf{r}, n, \alpha\beta\rangle \quad (6)$$

с не зависящими от \mathbf{r} коэффициентами $\psi_{\alpha\beta}^{(n)}$, что соответствует определенному квазиимпульсу \mathbf{k} , находим

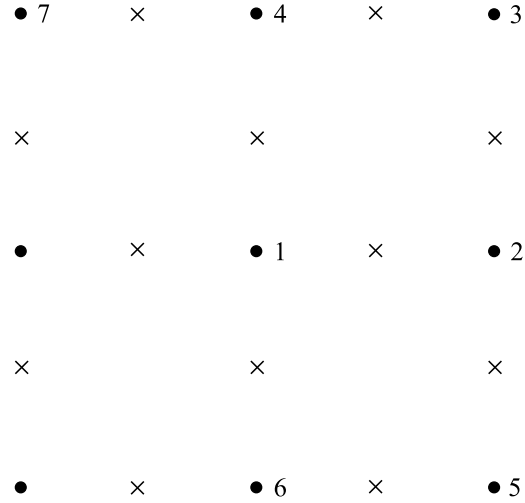
$$\begin{aligned} \epsilon(\mathbf{k})\psi^{(x)} &= t\psi^{(y)}(1 \pm e^{-i\kappa_x})(1 \pm e^{i\kappa_y}), \\ \epsilon(\mathbf{k})\psi^{(y)} &= t\psi^{(x)}(1 \pm e^{i\kappa_x})(1 \pm e^{-i\kappa_y}), \end{aligned} \quad (7)$$

где верхний или нижний знаки относятся, соответственно, к синглетному или триплетному состояниям. Условие существования нетривиального решения $\psi^{(x)}, \psi^{(y)}$ системы (7) определяет энергию $\epsilon(\mathbf{k})$ парной квазичастицы, отсчитанную от энергии ϵ_0 исходного локализованного состояния, $\kappa_x = \mathbf{k}\mathbf{a}_x, \kappa_y = \mathbf{k}\mathbf{a}_y$. Мы опустили в формулах (7) всюду одинаковые спиновые индексы $\alpha\beta$.

Минимальное значение $\epsilon_m = -4t$ энергии синглетной пары достигается при $\kappa_x = \kappa_y = 0$. Такое же минимальное значение энергии триплетной пары достигается при ненулевом значении квазиимпульса $\kappa_x = \kappa_y = \pi$. Это вырождение снимается при учете парного обмена электронов в исходной локализованной паре. Этот обмен, как известно, имеет антиферромагнитный характер, и, следовательно, минимальной энергией обладают синглетные пары.

Таким образом, в плоскости CuO_2 могут существовать уединенные бозевские квазичастицы, характеризующиеся двойным электрическим зарядом и имеющие в основном состоянии нулевые значения импульса и спина. Эффективная масса квазичастиц, как легко видеть из (7), равна $m = \hbar^2/ta^2$, где $a = |\mathbf{a}_x| = |\mathbf{a}_y|$. Кроме того, квазичастицы обладают специфическим квантовым числом $n = x, y$, определяющим ориентацию двухэлектронной “гантели”.

В основном состоянии, как это видно при подстановке $\epsilon = \epsilon_m$ в (7), имеем $\psi^{(x)} = -\psi^{(y)}$. Поскольку ориентации $n = x$ и $n = y$ переходят друг в друга при повороте решетки на угол $\pi/2$ и при отражении в диагональной плоскости, проходящей через точки 1 и 3 на рисунке, волновая функция $\psi \equiv \psi^{(x)} = -\psi^{(y)}$ ква-



Плоскость CuO_2 : • – атомы Cu, × – атомы O

зичастиц в основном состоянии преобразуется по одномерному представлению группы симметрии плоскости CuO_2 , обычно обозначаемому $d_{x^2-y^2}$ (см. [1]).

Сверхпроводимость. Предположим далее, что все другие двух-, трех- и т.д. электронные конфигурации, локализованные на расстояниях порядка межатомного расстояния, энергетически невыгодны по сравнению с рассмотренной парной конфигурацией. Кроме того, предположим, что на больших расстояниях, таких, что энергия взаимодействия электронов порядка амплитуд одноэлектронного туннелирования, электроны отталкиваются. В этих условиях существенную роль играют лишь одноэлектронные ферми-квазичастицы и рассмотренные выше парные бозе-квазичастицы. Проведенный Александровым и Корниловичем [6] анализ показывает, что сформулированные выше условия являются, по-видимому, реалистичными.

Наконец, предположим, что минимальная энергия парной квазичастицы $\epsilon_0 + \epsilon_m$ такова, что $(1/2)(\epsilon_0 + \epsilon_m)$ находится внутри одноэлектронной энергетической зоны. В этом случае при $T = 0$ при увеличении числа электронов (при уменьшении степени дырочного допирования) до тех пор, пока $(1/2)(\epsilon_0 + \epsilon_m) > \epsilon_F$, имеются лишь одноэлектронные квазичастицы, и система ведет себя как обычная ферми-жидкость. Минимальная совместимая с состоянием

нормальной ферми-жидкости степень дырочного допирования определяется условием $(1/2)(\epsilon_0 + \epsilon_m) = \epsilon_F$. Соответствующую плотность электронов n обозначим n_c . При дальнейшем уменьшении степени дырочного допирования все добавочные электроны $n - n_c$ (мы всюду рассматриваем случай достаточно малых $n - n_c$, когда концентрация пар мала, и можно пренебречь их взаимодействием) будут переходить в бозе-энштейновский конденсат (БЭ-конденсат) парных квазичастиц. Система становится сверхпроводником. Параметром порядка сверхпроводника является волновая функция $\psi \equiv \psi^{(x)}$ основного состояния бозонов, нормированная условием $|\psi|^2 = (n - n_c)/2$, ψ преобразуется по представлению $d_{x^2-y^2}$ группы симметрии плоскости CuO_2 .

Свойства сверхпроводника. Важно отметить следующее. В основном состоянии системы (то есть при полном заполнении всех состояний фермионов с энергией, меньшей ϵ_F) неопределенность энергии бозонной квазичастицы с малой энергией возбуждения $\epsilon = k^2/2m$, обусловленная ее столкновениями с одноэлектронными квазичастицами Ландау, пропорциональна ϵ^2 . Как в обычной теории ферми-жидкости, это связано, во-первых, с тем, что мала плотность фермионов, соответствующих окрестности порядка ϵ вблизи ϵ_F , с которыми в силу сохранения энергии возможны столкновения рассматриваемого бозона. Во-вторых, мал статистический вес конечных состояний, в которые возможны переходы фермионов. Вероятность распада бозона на два фермиона в единицу времени также мала по сравнению с ϵ из-за ограничений, накладываемых сохранением энергии и импульса. Таким образом, предлагаемая картина сверхпроводимости вблизи максимальной степени дырочного допирования остается справедливой при учете взаимодействия бозонов с фермионами даже при не малой плотности последних. Критическая концентрация электронов n_c определяется условием равенства химического потенциала электронов половине минимальной энергии бозонов. Последняя в общем случае является функционалом от функции распределения одноэлектронных квазичастиц Ландау.

При вычислении температуры сверхпроводящего перехода функцию распределения фермионов можно считать соответствующей $T = 0$, так как пропорциональные T^2 температурные поправки к термодинамическим функциям ферми-жидкости значительно меньше поправок, учитываемых ниже.

Плотность надконденсатных бозонов при конечной температуре $T < T_c$ равна

$$N' = \int \frac{2\pi k dk}{(2\pi\hbar)^2} \frac{1}{e^{\epsilon/T} - 1} = \frac{mT}{2\pi\hbar^2} \ln \frac{T}{\tau}. \quad (8)$$

Интеграл в (8) расходится при малых ϵ , и он обрезан при $\epsilon \sim \tau$, где τ – малая амплитуда туннелирования пары электронов в направлении, перпендикулярном плоскости CuO_2 .

Избыточное число электронов $n - n_c$ в системе равно удвоенной сумме N' и числа бозонов в конденсате N_0 . Отсюда находим зависимость критической температуры от степени допирования при малых $n - n_c$:

$$n - n_c = \frac{mT_c}{\pi\hbar^2} \ln \frac{T_c}{\tau} \quad (9)$$

и число пар в конденсате

$$N_0 = \frac{n - n_c}{2} \left(1 - \frac{T \ln T/\tau}{T_c \ln T_c/\tau} \right), \quad (10)$$

определяющее модуль параметра порядка $|\psi|^2 = N_0$ при конечных температурах. Определяемая формулой (9) критическая температура весьма высока. С точностью до логарифма, на границе области применимости, то есть при $n - n_c \sim a^{-2}$, она порядка амплитуды t одноэлектронного туннелирования. Возможность критической температуры такого порядка отмечалась в цитированной выше работе Александрова и Корниловича [6].

Взаимодействие фермионов с БЭ-конденсатом (эффективное электрон-электронное взаимодействие), описываемым параметром порядка ψ , порождает эффективный потенциал $\Delta_{\mathbf{k}}$, действующий на фермионы так же, как в обычных сверхпроводниках:

$$H_{int} = \sum_{\mathbf{k}} (\Delta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^+ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^+ + \text{h.c.}). \quad (11)$$

В силу симметрии ψ имеем

$$\Delta_{\mathbf{k}} = V(\hat{k}_x^2 - \hat{k}_y^2)\psi, \quad (12)$$

где $\hat{\mathbf{k}} = \mathbf{k}/|\mathbf{k}|$, V – инвариантная константа взаимодействия.

Благодаря такому взаимодействию фермионы в рассматриваемом сверхпроводящем состоянии приобретают черты, характерные для обычного сверхпроводника с симметрией $d_{x^2-y^2}$.

Полное число пар при $T < T_c$ не зависит от температуры и равно $(n - n_c)/2$. При повышении температуры в нормальном состоянии, $T > T_c$, число пар сначала убывает пропорционально $\ln T_c/(T - T_c)$ при $\tau \ll T - T_c \ll T_c$, а затем возрастает при $T_c \ll T \ll t$ пропорционально T .

Работа была поддержана грантами INTAS # 01-686, CRDF # RP1-2411-MO-02, Leverhulme Trust

S-00261-Н, Российского фонда фундаментальных исследований, грант # 03-02-16401 и президентской программой поддержки ведущих научных школ.

1. C. C. Tsuei and J. R. Kirtley, *Rev. Mod. Phys.* **72**, 969 (2000).
2. T. Timusk and B. Statt, *Rep. Prog. Phys.* **62**, 61 (1999).
3. A. S. Alexandrov, *Phys. Rev.* **B48**, 10571 (1993).
4. V. Emery and S. Kivelson, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3253 (1995); *Nature* **374**, 434 (1995).
5. V. B. Geshkenbein, L. B. Ioffe, and A. I. Larkin, *Phys. Rev.* **B55**, 3173 (1997).
6. A. S. Alexandrov and P. E. Kornilovitch, *J. Superconductivity* **15**, 403 (2002).
7. T. Domanski and J. Ranninger, *Physica* **C387**, 77 (2003).
8. A. F. Andreev, *Quantum Crystals*, in: *Progress in Low Temperature Physics*, Vol. VIII, Ed. D. F. Brewer, North Holland, 1982, § 4.4.
9. K. P. Sinha, *Ind. J. Phys.* **35**, 434 (1961).