

АНИЗОТРОПИЯ ЩЕЛИ В ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКАХ КАК РЕЗУЛЬТАТ *s*-ВОЛНОВОГО КУПЕРОВСКОГО СПАРИВАНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ НА МНОГОСВЯЗНОЙ ПОВЕРХНОСТИ ФЕРМИ СО СПОНТАННЫМ НАРУШЕНИЕМ СИММЕТРИИ

Э.А.Пашицкий

Институт физики НАН Украины
262650 Киев, Украина

Поступила в редакцию 13 декабря 1994 г.

Показано, что наблюдаемая в высокотемпературном сверхпроводнике $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ анизотропия щели типа "бабочка" в плоскости слоев CuO_2 обусловлена не *d*-волновым куперовским спариванием, а анизотропным *s*-волновым спариванием электронов на многосвязной (многодолинной) поверхности Ферми с плоскими (конгруэнтными) участками и спонтанным нарушением симметрии электронного спектра в результате структурной неустойчивости Пайерлса с образованием диэлектрической щели в направлении одной из диагоналей зоны Бриллюэна. Выказывается предположение, что наблюдавшийся в монокристаллах $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ сдвиг фаз джозефсоновских токов вдоль осей **a** и **b** может быть связан с разными знаками параметров щели в слоях CuO_2 и цепочках CuO , что может имитировать *d*-спаривание.

1. Недавно сообщалось [1] о наблюдении анизотропии сверхпроводящего (СП) параметра щели, а также нормальной плотности состояний (ПС), в плоскости двумерных (2D) купратных слоев CuO_2 в монокристалле $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ при измерении спектров энергетических потерь фотоэлектронов (EELS-метод). Согласно [1], анизотропная СП щель $\Delta(\mathbf{k})$, будучи центрирована в Γ -точке зоны Бриллюэна (ЗБ), максимальна в направлениях *M*-точек и имеет минимумы разной глубины в направлениях *X*- и *Y*-точек ЗБ, так что выполняются неравенства $\Delta_{\Gamma-M} > \Delta_{\Gamma-X} \gg \Delta_{\Gamma-Y} > 0$.

Отсюда следует, что зависимость СП щели от угла θ в плоскости *a* – *b* имеет форму "бабочки" с осью симметрии второго порядка, а не "розетки" с разными знаками "лепестков" и с нулями щели в направлении диагоналей ЗБ (см. рис.1), как это следует из модели магнного механизма сверхпроводимости с синглетным *d*-волновым куперовским спариванием носителей тока в 2D-слоях CuO_2 за счет обмена виртуальными возбуждениями спиновой плотности (парамагнонами) в почти антиферромагнитной ферми-жидкости [2-4]. Следует заметить, что впервые идея магнного механизма сверхпроводимости в ферро- и антиферромагнетиках с триплетным *p*-волновым куперовским спариванием была высказана в [5-7]. С другой стороны, как было недавно показано в [8], преобладающее *d*-спаривание в 2D-системах может возникать при любом механизме межэлектронного взаимодействия с отталкиванием на одном узле и притяжением на соседних узлах решетки.

Как показали измерения фотоэлектронных спектров с помощью EELS-метода при *T* выше критической температуры перехода в СП состояние T_C [1], аналогичный вид анизотропии (типа "бабочка") характерен для электронной ПС на уровне Ферми $\nu(E_F)$, то есть в нормальном состоянии $\nu_{\Gamma-M} > \nu_{\Gamma-X} \gg \nu_{\Gamma-Y} > 0$. Это позволило параметризовать анизотропную

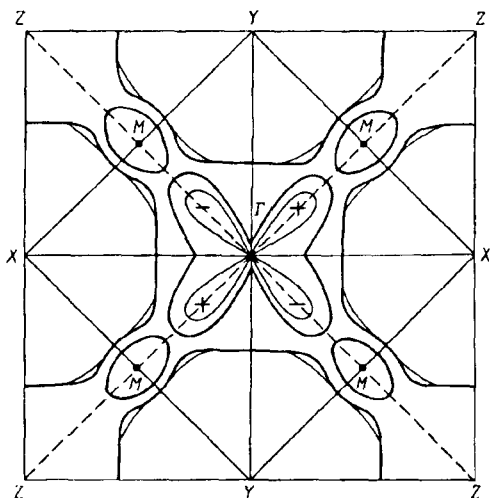


Рис.1

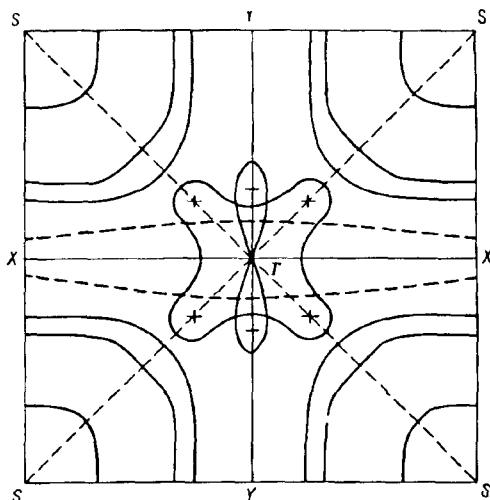


Рис.2

Рис.1. Сечение многосвязной цилиндрической ПФ монокристалла $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$, согласно [9,10], внутри расширенной "кислородной" ЗБ, повернутой на угол $\pi/4$ относительно первой ЗБ, и угловая зависимость СП параметра щели типа "бабочка" для анизотропного s -спаривания, а также "розетка" для d -спаривания [2-4] в Γ -точке.

Рис.2. Сечение многосвязной цилиндрической ПФ монокристалла $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$, согласно [22], в системе 2D-слоев CuO_2 (сплошные линии) и уплотненные листы ПФ в системе 1D-цепочек CuO (штриховые кривые). В центре ЗБ показаны предполагаемые угловые зависимости СП параметров щели в 2D слоях CuO_2 ("розетка" с положительными "лепестками") и в 1D-цепочках CuO (отрицательные "лепестки")

СП щель с помощью экспоненциальной формулы типа БКШ [1]:

$$\Delta(\theta) = \tilde{\omega} \exp\{-1/\nu(\theta)\tilde{g}\}, \quad (1)$$

где $\tilde{\omega}$ и \tilde{g} – подгоночные параметры взаимодействия.

В то же время, в [9] с помощью метода фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES-метод) была восстановлена форма цилиндрической многосвязной (многодолинной) поверхности Ферми (ПФ) монокристалла $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$, которая обладает осью симметрии четвертого порядка и практически полностью совпадает с формой ПФ, теоретически рассчитанной в [10] (рис.1). Характерной особенностью такой ПФ являются уплотненные участки в направлениях $\Gamma-X$ и $\Gamma-Y$, совмещающиеся при сдвиге на вектор "нестинга" Q , и области с аномально слабой дисперсией ("плоские зоны") в окрестности M -точек, которые в [9,11] интерпретируются как линии седловых точек в электронном спектре.

В настоящей работе показано, что наблюдавшаяся в [1] анизотропия как СП параметра щели, так и нормальной ПС в монокристаллах $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ является результатом анизотропного s -волнового спаривания электронов на многосвязной ПФ, с одной стороны, и спонтанного нарушения симметрии исходного спектра за счет структурной (пайерлсовской) неустойчивости с возникновением диэлектрической щели и сверхрешетки в направлении одной из диагоналей ЗБ за счет уплотненных участков ПФ, с другой.

В работе высказывается предположение о том, что наблюдавшийся в ряде экспериментов [12-14] сдвиг фаз на π джозефсоновских токов вдоль осей a и b в монокристаллах $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ может быть связан не с d -спариванием, а с разными знаками анизотропных параметров щели в 2D-слоях CuO_2 и в упорядоченных одномерных (1D) цепочках CuO при s -волновом типе спаривания носителей тока.

2. Как следует из экспериментальных данных [9] и численных расчетов [10], в пределах первой ЗБ слоистого монокристалла $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ существуют два типа долин: 4 эквивалентные долины в углах ЗБ (вблизи точек X и Y) и 4 долины в окрестности M -точек (рис.1). Первый тип относительно широких долин (шириной $W > 1\text{эВ}$) имеет чисто "кислородное" происхождение и обусловлен прямым перекрытием p -орбиталей ионов кислорода O^{2-} в плоскости слоев CuO_2 (в направлении диагоналей примитивной ячейки). Долины второго типа обусловлены гибридизацией d -орбиталей ионов Cu^{2+} с p -орбиталями ионов O^{2-} (вдоль связей $Cu-O$) и, согласно [9,15], являются аномально узкими (бездисперсионными) в окрестности M -точек ЗБ.

Заметим, что сосуществование перекрывающихся по энергии, но слабо гибридизующихся в импульсном пространстве широких и узких зон (долин) является необходимым и достаточным условием для плазмонного механизма сверхпроводимости [16], обусловленного куперовским спариванием основных носителей тока за счет обмена низкочастотными виртуальными возбуждениями зарядовой плотности (акустическими плазмонами).

Согласно [9,10], многодолинная ПФ монокристаллов типа $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ имеет в плоскости $a-b$ ось симметрии четвертого порядка. Это противоречит экспериментальным данным [1], согласно которым СП щель и нормальная ПС имеют оси симметрии второго порядка. Однако при этом следует учитывать, что "кислородные" долины вблизи X - и Y -точек имеют уплощенные участки ПФ, совмещающиеся при сдвиге на вектор Q . Такой эффект "нестинга" может приводить к структурной неустойчивости Пайерлса и к образованию диэлектрической щели вдоль одной из диагоналей ЗБ (в направлении $\Gamma-X$ или $\Gamma-Y$) со спонтанным нарушением исходной симметрии спектра.

3. Для описания сверхпроводника с анизотропной многосвязной ПФ, обладающей "нестингом" в некоторых направлениях импульса Ферми, как и в [17] при рассмотрении магнитных свойств фаз Лавеса и Шевреля, воспользуемся моделью Билбро-Макмиллана-Накаямы [18,19]. Обозначим через Σ_1 и Δ_1 диэлектрическую и СП щели на уплощенных (конгруэнтных) участках ПФ в "кислородных" долинах (вблизи X - или Y -точек), а через Δ_2 - СП щель на ПФ "меднокислородных" долин (вблизи M -точек).¹⁾ Система уравнений для Σ_1 , Δ_1 и Δ_2 с учетом виртуальных электронных переходов между разными листами ПФ в приближении БКШ имеет вид

$$\Sigma_1 [1 - \frac{1}{2} \nu_1 (\bar{V} - 3\bar{U}) I(\bar{\Sigma}_1)] = \bar{W}; \quad (2)$$

$$\Delta_1 = -\frac{1}{2} \nu_1 (V_1 + \bar{U}) \Delta_1 \bar{I}(\bar{\Sigma}_1) - \nu_2 U \Delta_2 \bar{I}(\Delta_2); \quad (3)$$

$$\Delta_2 = -\nu_2 V_2 \Delta_2 \bar{I}(\Delta_2) - \nu_1 U \Delta_1 \bar{I}(\bar{\Sigma}_1), \quad (4)$$

¹⁾ Имеются в виду средние значения параметров щелей $\Delta(\theta)$ и $\Sigma(\theta)$ на соответствующих участках ПФ

где V_1 и V_2 – матричные элементы внутримолекулярного электрон-электронного взаимодействия, U и \tilde{U} – матричные элементы, описывающие двухчастичные электронные переходы между разными типами долин и между совмещающимися плоскими участками ПФ "кислородных" долин, \tilde{V} и \tilde{W} – матричные элементы, описывающие прямое (кулоновское) взаимодействие и одночастичные переходы между диэлектризирующимися уплощенными участками ПФ, ν_1 и ν_2 – средние значения ПС на конгруэнтных и неконгруэнтных участках ПФ, $\tilde{\Sigma}_1 = \sqrt{\Sigma_1^2 + \Delta_1^2}$, а интеграл I в (2) равен

$$I(\tilde{\Sigma}_1) = \int_0^{\tilde{E}} \frac{d\xi}{\sqrt{\xi^2 + \tilde{\Sigma}_1^2}} \operatorname{th} \frac{\sqrt{\xi^2 + \tilde{\Sigma}_1^2}}{2T}, \quad (5)$$

где \tilde{E} – энергия обрезания кулоновского взаимодействия (порядка энергии Ферми E_F). Интеграл \tilde{I} отличается от I заменой верхнего предела \tilde{E} на энергию эффективного межэлектронного притяжения $\tilde{\omega} \ll \tilde{E}$, обусловленного обменом виртуальными бозонами (фононами, плазмонами, экситонами и др.).

В отличие от [17,18], будем предполагать, что в достаточно чистом монокристалле вероятности одно- и двухчастичных междолинных переходов малы, и состояния разных долин слабо перемешаны. В случае преобладающего притяжения вблизи ПФ в области энергий $\xi \leq \tilde{\omega}$, когда $V_{1,2} < 0$, $U < 0$ и $\tilde{U} < 0$ (но $\tilde{V} > 0$ и $\tilde{W} > 0$ в области $\xi \leq \tilde{E}$), при условии $|V_{1,2}| \gg |U|$, $|\tilde{U}|$ и $\tilde{V} \gg \tilde{W}$ из (2) при $T \rightarrow 0$ получаем трансцендентное уравнение для определения Σ_1 (при $\Sigma_1 \gg \Delta_1$):

$$1 = \frac{1}{2} \nu_1 (\tilde{V} + 3|\tilde{U}|) \ln[(\tilde{E} + \sqrt{\tilde{E}^2 + \Sigma_1^2})/\Sigma_1]. \quad (6)$$

Если предположить, что $\Delta_2 \ll \tilde{\omega}$ (но $\Sigma_1 > \tilde{\omega}$), то из (3) находим

$$\Delta_1 = \frac{\nu_2 |U| \Delta_2 \ln(2\tilde{\omega}/\Delta_2)}{1 - \frac{1}{2} \nu_1 (|V_1| + |\tilde{U}|) \ln[(\tilde{\omega} + \sqrt{\tilde{\omega}^2 + \Sigma_1^2})/\Sigma_1]}. \quad (7)$$

Сопоставляя (6) и (7), легко видеть, что при $|V_1| < \tilde{V}$ знаменатель в (7) положителен и возрастает при увеличении Σ_1 , то есть СП щель Δ_1 на диэлектризирующихся участках ПФ (в направлении $\Gamma-Y$) уменьшается с ростом Σ_1 вплоть до минимального значения (при $\Sigma_1 \gg \tilde{\omega}$):

$$\Delta_1^{\min} = \nu_2 |U| \Delta_2 \ln(2\tilde{\omega}/\Delta_2). \quad (8)$$

Поскольку $|\tilde{U}| \ll |V_2|$, то из уравнений (4) и (7) следует, что $\Delta_1^{\min} \ll \Delta_2$ – СП щели на недиэлектризирующихся участках ПФ (вблизи M -точек).

В то же время, из уравнений (3) и (4) при условии $\Sigma_1 = 0$ и $\nu_1 |V_1| < \nu_2 |V_2|$ следует, что $\Delta_2 > \Delta_1$ – СП щели на уплощенных участках ПФ в отсутствие диэлектрической щели (в направлении $\Gamma-X$). Таким образом, для вполне реалистических соотношений между параметрами рассмотренная анизотропная модель s -волнового куперовского спаривания приводит к таким же соотношениям между значениями СП щели в разных симметричных направлениях ЗБ, как и в экспериментах [1]:

$$\Delta_2 \equiv \Delta_{\Gamma-M} > \Delta_1 \equiv \Delta_{\Gamma-X} \gg \Delta_1^{\min} \equiv \Delta_{\Gamma-Y} > 0, \quad (9)$$

то есть позволяет объяснить наблюдающуюся угловую зависимость СП щели типа "бабочка" (рис.1) с учетом спонтанного нарушения симметрии электронного спектра за счет пайерлсовской неустойчивости. Эта модель описывает также аналогичную зависимость от θ нормальной ПС при $T > T_C$, но $T < T_p$ – критической температуры структурного перехода ($T_p \gg T_C$) при учете провала ПС на диэлектризованных участках ПФ²⁾ и при условии $\nu_2 > \nu_1$, что подтверждает эмпирическую формулу (1). Наконец, наблюдавшаяся в [1] зависимость степени анизотропии СП щели от концентрации допированных дырок в рамках данной модели качественно может быть связана с зависимостью формы и размера ПФ в различных долинах от степени их заполнения, то есть от положения уровня Ферми E_F (ср. с [8]).

4. В монокристаллах $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ при $\delta \ll 1$ спонтанное нарушение симметрии спектра происходит благодаря упорядочению 1D-цепочек CuO вдоль одной из связей Cu-O (ось b). При этом наблюдается заметная анизотропия проводимости в плоскости $a-b$ (проводимость вдоль оси b больше, чем вдоль оси a). Это свидетельствует о том, что диэлектрическая щель на уплощенных участках ПФ в системе 1D-цепочек не образуется (возможно, за счет достаточно сильной гофрировки ПФ). В то же время, как показывают численные расчеты зонного спектра для $YBa_2Cu_3O_7$ [22] и эксперименты по фотоэлектронной спектроскопии [23] и эффекту де Гааза–Ван Альфена [24], цилиндрические участки ПФ, соответствующие квазидвумерному спектру электронов (дырок) в купратных слоях CuO_2 (рис.2), не имеют ярко выраженного "нестинга". В этом случае можно воспользоваться системой уравнений (3) и (4) при $\Sigma_1 = 0$ и $\vec{U} = \vec{W} = 0$, считая, что величины с индексом 1 относятся к 1D-цепочкам CuO, а величины с индексом 2 – к 2D-слоям CuO_2 . Анизотропная СП щель $\Delta_1(\theta)$ максимальна вдоль направления $\Gamma-Y$ (то есть в направлении нормалей к плоским листам ПФ) и равна нулю в перпендикулярном направлении $\Gamma-X$, а СП щель $\Delta_2(\theta)$ максимальна в направлении углов 3Б, где в окрестности s-точек расположены 4 долины с высокой ПС, и минимальна в направлениях $\Gamma-X$ и $\Gamma-Y$, где ПФ открыта (рис.2).

Если предположить, что наиболее сильное межэлектронное притяжение сосредоточено в парах купратных слоев CuO_2 благодаря взаимодействию с дипольно-активными оптическими колебаниями ионов O^{2-} и с коллективными низкочастотными возбуждениями зарядовой плотности почти локализованных "тяжелых" носителей заряда в аномально узких 2D зонах (см. [16]), расположенных в окрестности s-точек [25], тогда как в цепочках CuO преобладает кулоновское отталкивание, так что $V_2 < 0$, а $V_1 > 0$ и $U > 0$ ³⁾, то из (3) и (4) находим (при $|V_2| \gg U$ и $T \rightarrow 0$)

$$\Delta_1 = -\frac{\nu_2 U \Delta_2 \ln(2\tilde{\omega}/\Delta_2)}{1 + \nu_1 V_1 \ln(2\tilde{\omega}/|\Delta_1|)}, \quad \Delta_2 = 2\tilde{\omega} \exp\left\{-\frac{1}{\nu_2 |V_2|}\right\}. \quad (10)$$

Отсюда следует, что знаки параметров Δ_1 и Δ_2 противоположны (например, $\Delta_1 < 0$ при $\Delta_2 > 0$). Если при этом максимальное (по абсолютной величине) значение индуцированной междолинными переходами СП щели Δ_1 в направлении $\Gamma-Y$ больше, чем минимальное значение анизотропной СП щели Δ_2

²⁾ Конечная ПС внутри диэлектрической щели $\Sigma_1(\theta)$ может быть связана с дефектами несоизмеримой сверхрешетки (в частности, с доменными стенками) [20,21].

³⁾ При этом U определяет вероятность одноэлектронных переходов между 1D-цепочками и 2D-слоями.

в этом направлении (см. рис.2), то общий знак параметра порядка вдоль оси b будет совпадать со знаком Δ_1 ($\Delta_1 + \Delta_2^{\min} < 0$). Но поскольку вдоль направления $\Gamma - X$ индуцированная щель в 1D-цепочках $\Delta_1 = 0$, знак СП параметра порядка вдоль оси a совпадает со знаком щели Δ_2 в 2D-слоях ($\Delta_2^{\min} > 0$). Такое изменение знака СП параметра щели при повороте на угол $\pi/2$ (от оси a к b) может имитировать d -волновое спаривание [2-4,8] в туннельных экспериментах на монокристаллах $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ [12-14], давая сдвиг фазы на π в джозефсоновских токах.

Результаты проведенных недавно (26) численных расчетов СП параметра порядка в $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ на анизотропной и многосвязной ПФ подтверждают предложенную в данной работе модель анизотропной структуры щелей в 2D-слоях и 1D-цепочках. Анизотропия модуля СП щели в $BiSrCaCuO$ (а также в $TlBaCaCuO$ и $HgBaCaCuO$) может имитировать d -волновые спаривания в тех экспериментах, где не важна фаза параметра порядка (например, в рамановском рассеянии света). С другой стороны, численные расчеты (27) из "первых принципов" d -спаривания за счет обмена антиферромагнитными магнонами приводят к весьма низким значениям $T_c \sim 1K$, что обусловлено преобладающим отталкиванием во всем объеме ЗБ.

В заключение выражаю благодарность А.Л.Касаткину, В.М.Локтеву и В.И.Пентегову за полезные дискуссии и обсуждение результатов. Работа выполнена в рамках программы, поддержанной грантом UB1000 Международного научного фонда Сороса.

1. Jian Ma, R.J.Kelley, C.Quitmann et al., Proc. TN-PS 296, 297 and 298 on the 4-th Intern. Conf. M2S-HTSC, Grenoble (France) July 1994, p.268.
2. A.J.Millis, H.Monien, and D.Pines, Phys. Rev. B42, 167 (1990).
3. P.Monthoux, A.V.Balatsky, and D.Pines, Phys. Rev. Lett. 67, 3448 (1991); Phys. Rev. B46, 14803 (1992).
4. P.Monthoux and D.Pines, Phys. Rev. Lett. 69, 961 (1992); Phys. Rev. B47, 6069 (1993).
5. А.И.Ахиезер, И.Я.Померанчук, ЖЭТФ 36, 856 (1959).
6. А.И.Ахиезер, И.А.Ахиезер, ЖЭТФ 43, 2208 (1962).
7. И.Я.Привороцкий, ЖЭТФ 43, 2255 (1962).
8. Э.В.Горбар, В.М.Локтев, В.С.Николаев, СФХТ 7, 1 (1994).
9. D.S.Dessau, Z.-X.Shen, D.M.King et al., Phys. Rev. Lett. 71, 2718 (1993).
10. H.Krakauer and W.E.Pickett, Phys. Rev. Lett. 60, 1665 (1988).
11. A.A.Abricosov, Physica C222, 191 (1994).
12. D.A.Wollman, D.J.Van Harlinger, W.C.Lee et al., Phys. Rev. Lett. 71, 2134 (1993).
13. C.C.Tsuei, J.R.Kirtley, C.C.Chi et al., Phys. Rev. Lett. 73, 593 (1994).
14. I.Iguchi and Z.Wan, Phys. Rev. B49, 12388 (1994).
15. A.A.Abricosov, J.C.Campusano, and V.Gofron. Physica C214, 73 (1993).
16. Э.А.Пашицкий, ЖЭТФ 55, 2387 (1968); 103, 867 (1993).
17. А.М.Габович, Э.А.Пашицкий, А.С.Шпигель, Письма в ЖЭТФ 28, 302 (1978); ЖЭТФ 77, 1157 (1979).
18. G.Bilbro and W.L.McMillan, Phys. Rev. B14, 1887 (1976).
19. I.Nakayama, J. Phys. Soc. Japan 43, 1533 (1977).
20. W.L.McMillan, Phys. Rev. B12, 1187 (1975); B14, 1496 (1976).
21. Л.Н.Булаевский, Д.И.Хомский, ЖЭТФ 74, 1863 (1978).
22. O.K.Andersen, A.I.Liechtenstein, O.Rodriguez et al., Physica C 185-189, 147 (1991).
23. C.G.Olson et al., Phys. Chem. Solids 52, 1419 (1991).
24. C.W.Fowler, B.L.Freeman, W.L.Hults et al., Phys. Rev. Lett. 68, 534 (1992).
25. Y.Ishii and J.Ruvalds. Phys. Rev. B48, 3455 (1993).
26. G.L.Zhao and J.Callaway, Phys. Rev. B50, 9511 (1994).
27. N.Shimahara, J. Phys. Soc. of Japan, 63, 1861 (1994).