

На правах рукописи

Лойко Станислав Олегович

**О ВЛИЯНИИ СИММЕТРИИ ЭЛЕКТРОННОГО СПЕКТРА
НА СВОЙСТВА СВЕРХПРОВОДНИКОВ В РАМКАХ
МНОГОЗОННЫХ МОДЕЛЕЙ**

01.04.07 - физика конденсированного состояния

Автореферат

диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Москва
2007

Работа выполнена в Отделении теоретической физики им. И.Е.Тамма
Физического института им. П.Н.Лебедева РАН

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
Волков Борис Андреевич

Научный консультант: кандидат физико-математических наук,
Федоров Николай Кимович

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук
Барабанов Александр Федорович
(Институт физики высоких давлений РАН)

доктор физико-математических наук
Маслова Наталья Сергеевна
(Московский государственный университет
им. М.В.Ломоносова)

Ведущая организация: Институт спектроскопии РАН

Защита диссертации состоится 26 февраля 2007 г. в 12 часов на засе-
дании Диссертационного совета К002.023.02 в Физическом институте
им. П.Н.Лебедева РАН по адресу: 119991, Москва, Ленинский пр., 53.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Физического института
им. П.Н.Лебедева РАН.

Автореферат разослан « » января 2007 г.

Учёный секретарь
диссертационного совета,
д.ф.-м.н.

В.А.Чуенков

Общая характеристика работы

Актуальность темы.

В настоящее время одной из основных проблем в физике твердого тела является построение теории высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП). Дело в том, что, несмотря на значительное количество работ, экспериментальных и теоретических, проведенных со времени открытия явления в 1987 году, до сих пор отсутствует единый взгляд на природу взаимодействия между электронами, приводящего к спариванию. С вопросом о механизме взаимодействия тесно связана проблема симметрии сверхпроводящего параметра порядка. Известно, что стандартная модель Бардина-Купера-Шриффера, которая хорошо работает в большинстве обычных сверхпроводников, не объясняет свойства ВТСП-соединений. Параметр порядка, возникающий в этой модели, является изотропным, т.е. обладает симметрией s -типа. Большинство экспериментальных данных в высокотемпературных сверхпроводниках свидетельствует о сильной анизотропии параметра порядка. Поэтому были предложены другие модели, в которых также образуются пары, но параметр порядка обладает симметрией d -типа и, как следствие, меняет знак на поверхности Ферми. Однако, оказалось, что интерпретация экспериментальных данных, основанная на предположении о d -симметрии параметра порядка, также наталкивается на определенные трудности. О некоторых из них речь пойдет в дальнейшем.

Изучение влияния рассеяния электронов на дефектах на свойства ВТСП-соединений представляет большой интерес в связи с проблемой симметрии параметра порядка. Хорошо известно, что немагнитные примеси в рамках стандартной однозонной модели БКШ не влияют на критическую температуру сверхпроводников. В случае же d -симметрии параметра порядка рассеяние электронов на немагнитных примесях приводит к эффекту, аналогичному разрушению пар магнитными примесями в обычных сверхпроводниках с s -симметрией параметра порядка. В частности, критическая температура резко понижается с ростом концентрации примесей и при некоторой критической концентрации сверхпроводимость исчезает. Оказывается, что такая картина не имеет места в высокотемпературных сверхпроводниках, что подтверждается, например, экспериментальными данными для $YBaCuO$ [1]. В результате интерпретация экспериментальных данных в рамках однозонной модели с d -симметрией параметра порядка сталкивается с очевидными проблемами. В то же время с увеличением концентрации дефектов наблюдается уменьшение критической температуры, что свиде-

тельствует об анизотропии параметра порядка в ВТСП-соединениях.

Важную роль в исследовании сверхпроводящего состояния играют также туннельные эксперименты. Теоретический анализ показывает, что щелевая структура в вольт-амперных характеристиках (ВАХ) контактов сверхпроводник-диэлектрик-сверхпроводник (*SIS*) заметно размыта в случае сверхпроводников с *d*-симметрией параметра порядка для квазичастичного туннелирования в направлении, перпендикулярном *CuO₂*-плоскости. С другой стороны, для стандартной модели БКШ при температурах, близких к нулю, квазичастичный ток незначительно меняется в области напряжений от нуля до $\frac{2\Delta}{e}$ и затем резко возрастает, выходя при больших напряжениях на асимптотику, соответствующую омической зависимости, имеющей место при $T > T_c$. Можно было бы предположить, что такое резкое качественное различие между ВАХ *s*- и *d*-сверхпроводников является хорошим способом экспериментальной проверки симметрии спаривания в ВТСП. Однако оказалось, что в различных туннельных экспериментах проявляются черты, характерные как для изотропного параметра порядка *s*-типа, так и для *d*-типа (см. [2],[3] и приведенные там ссылки). Кроме того, наблюдается нетривиальное поведение туннельных характеристик вне щелевой области, которое также трудно объяснить в рамках простых однозонных моделей.

Аналогичная картина имеет место и в исследовании оптических свойств ВТСП в далеком инфракрасном диапазоне. Измерения спектров пропускания и отражения в широком интервале частот дают информацию о комплексном показателе преломления, а с ним и о действительной и мнимой части диэлектрической проницаемости или проводимости как функции частоты. Результаты оптических экспериментов в ВТСП свидетельствуют о наличии конечного поглощения в области малых частот (остаточное поглощение) (см. обзор [4] и приведенные там ссылки), что на первый взгляд является свидетельством в пользу *d*-симметрии параметра порядка. Однако, количественное сопоставление теоретических и экспериментальных данных указывает на то, что такое описание не может считаться удовлетворительным. Это связано с ограничением на возможную величину остаточной проводимости из-за сильного влияния примесей на сверхпроводимость в случае *d*-симметрии параметра порядка.

Следует отметить, что экспериментальные данные обычно сравниваются с результатами однозонной модели типа БКШ с простым изотропным спектром зоны, а специфика ВТСП проявляется в выборе экзотического спаривающего взаимодействия между электронами. При этом реальный спектр ВТСП-соединений обычно не учитывается. Не претендуя на серьезное тео-

ретическое описание высокотемпературных сверхпроводников, в данной работе хотелось бы продемонстрировать, что в этих соединениях существенную роль играет анизотропия реального спектра, связанная с более сложным видом функций Блоха из-за наличия нескольких атомов в элементарной ячейке.

Целью работы является теоретическое исследование ряда свойств сверхпроводящего состояния в рамках многозонной модели сверхпроводника, являющейся обобщением стандартной модели БКШ на случай сложной кристаллической структуры. К числу рассматриваемых вопросов относятся:

1. Влияние рассеяния электронов на немагнитных и магнитных дефектах на критическую температуру сверхпроводящего перехода в двухзонном сверхпроводнике.

2. Поведение действительной и мнимой частей оптической проводимости двухзонного сверхпроводника как функций частоты внешнего электромагнитного поля.

3. Влияние симметрии электронных состояний ВТСП-соединений на вольт-амперные характеристики *SIS*-контактов.

Научная новизна работы.

В диссертационной работе получены следующие результаты:

1. Вычислены зависимости критической температуры двухзонного сверхпроводника от концентрации немагнитных и магнитных примесей с учетом различных возможных соотношений между параметрами, определяющими рассеяние электронов на примесях.

2. В рамках описания электронной системы сверхпроводника в приближении сильной связи получено выражение для оператора плотности тока в двухзонной модели. Исследована зависимость поведения оптической проводимости как функции частоты от уровня допирования.

3. Рассчитаны вольт-амперные характеристики *SIS*-контактов в многозонной модели ВТСП для различных значений параметров модели. Предложено теоретическое объяснение экспериментально наблюдаемого *s*-подобного поведения ВАХ *SIN*- и *SIS*- контактов типа *BiSrCaCuO*.

Практическая ценность работы.

Используемый в работе подход позволяет непротиворечиво объяснить экспериментальные данные в области высокотемпературной сверхпроводимости. Данный подход может быть развит и применен для теоретического исследования целого ряда свойств сверхпроводников со сложной кристаллической структурой.

Основные положения, выносимые на защиту.

1. Обоснование существенной роли анизотропии спектра ВТСП-соединений, связанной с тем, что функции Блоха имеют сложный вид из-за наличия нескольких атомов в элементарной ячейке.

2. Утверждение о том, что рассеяние электронов на немагнитных примесях оказывает слабое влияние на критическую температуру двухзонного сверхпроводника с анизотропными эффективными параметрами порядка.

3. Возможность слабого влияния магнитных примесей на критическую температуру в случае преобладания межзонного рассеяния электронов на примесях над внутризонным.

4. Вывод выражения для проводимости двухзонного сверхпроводника на произвольной частоте внешнего электромагнитного поля.

5. Доказательство возможности сильного изменения вида вольт-амперных характеристик SIN - и SIS - контактов в зависимости от уровня допирования (от s - до d - типа).

Апробация работы.

Изложенные в диссертации результаты докладывались на семинарах Отделения теоретической физики ФИАН, на VII Школе-семинаре молодых ученых "Проблемы физики твердого тела и высоких давлений"(г. Сочи, сентябрь 2002 г.) и на IX Международной Конференции молодых ученых "Проблемы физики твердого тела и высоких давлений"(г. Сочи, сентябрь 2006 г.).

Публикации.

По теме диссертации опубликованы 3 статьи, список которых приведен в конце автореферата.

Структура и объем работы.

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и двух приложений. Работа содержит 83 страницы, 12 рисунков и список цитируемой литературы, включающий 92 наименования.

Краткое содержание работы

Во **Введении** приведен обзор литературы, обоснована актуальность темы и сформулированы основные задачи диссертации.

Первая глава посвящена описанию двухзонной модели сверхпроводника [5], обобщающей стандартную модель БКШ на случай наличия в элементарной ячейке двух различных атомов. Показано, что эффективные параметры порядка, возникающие в данной модели, могут зависеть от ква-

зиимпульса даже при изотропном взаимодействии между электронами в каждой из зон. Эта зависимость обусловлена, главным образом, свойствами матричного элемента одночастичной межзонной гибридизации, который при условии различной симметрии затравочных орбиталей, из которых образуются зоны, обращается в нуль вдоль определенных линий в зоне Бриллюэна. Если, кроме того, знаки взаимодействий в зонах различны, эффективные параметры порядка становятся знакопеременными функциями квазиимпульса, проявляя тем самым особенности, характерные для симметрии d -типа.

Во **второй главе** в рамках двухзонной модели исследуется влияние рассеяния электронов на примесях на критическую температуру T_c сверхпроводящего перехода.

В разделе 2.1 приведен краткий обзор экспериментальных и теоретических результатов, связанных с влиянием примесей на свойства сверхпроводников.

Раздел 2.2 посвящен описанию характера взаимодействия электронов с атомами немагнитных и магнитных примесей. Предполагается, что атомы примесей хаотически расположены по кристаллу и среднее расстояние между ними велико по сравнению с межатомными расстояниями. Спины магнитных примесей ориентированы произвольно относительно решетки и всякая корреляция между ними отсутствует. В процессе рассеяния ориентация спина примеси остается неизменной.

В разделе 2.3 получена система уравнений для нормальных и аномальных мацубаровских функций Грина. Учет рассеяния электронов на примесях, по аналогии с результатами Абрикосова и Горькова для однозонной модели, приводит к перенормировкам частоты, параметров порядка каждой из зон, матричного элемента гибридизации и к появлению межзонной аномальной собственно-энергетической части.

В разделе 2.4 приведена зонная картина (см. Рис.1), а также значения параметров зонной структуры, используемые в дальнейшем для численных расчетов. В соответствии с условиями существования сверхпроводимости в данной модели при наличии отталкивания в одной из зон, ширина этой зоны предполагается большей по сравнению с шириной другой зоны, в которой действует притяжение между электронами, приводящее к спариванию. Эффективные параметры порядка в этом случае меняют знак как функции квазиимпульса в зоне Бриллюэна. Предполагается, что химический потенциал находится в середине широкой зоны, а положение узкой зоны относительно химического потенциала задается параметром ϵ_{c0} . В от-

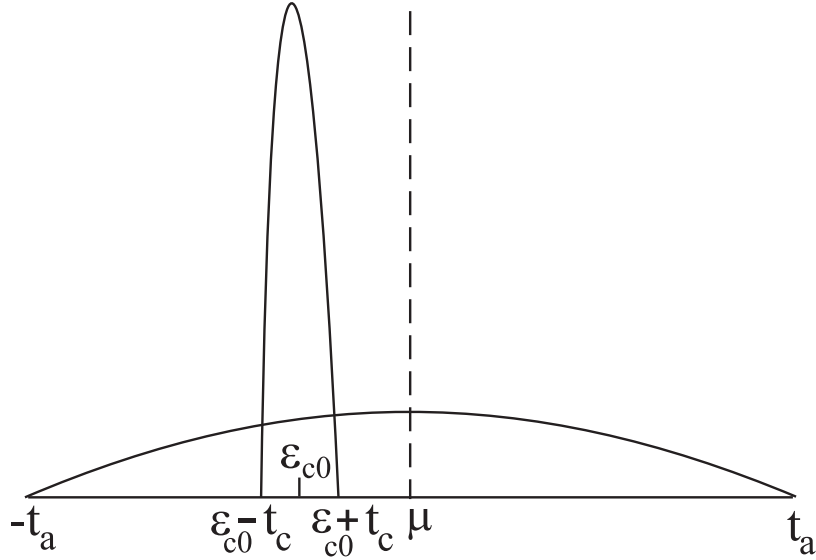


Рис. 1: Схематическое изображение зонной картины рассматриваемой модели

личии от однозонных моделей, в которых рассеяние на примесях приводит к переходам электронов внутри единственной зоны, в многозонных моделях становятся возможными также переходы из одной зоны в другую. При этом следует учитывать различные случаи, в зависимости от расположения атома примеси в элементарной ячейке. Возможна ситуация, когда как внутризонное, так и межзонное рассеяние на примесях имеют одинаковую по порядку величину, то есть матричные элементы потенциала примеси $u_{aa} \propto u_{cc} \propto u_{ac}$. Однако, например, для примесей замещения, может преобладать рассеяние на примесях электронов одной из затравочных зон, в то время, как межзонное рассеяние по симметричным соображениям окажется заметно слабее. Ниже показано, что поведение критической температуры с ростом концентрации примесей сильно зависит от выбора того или иного случая.

В разделах 2.5 и 2.6 приведены результаты вычислений зависимостей критической температуры от концентрации немагнитных и магнитных примесей в зависимости от положения центра узкой зоны относительно химического потенциала.

На Рис.2А представлены зависимости T_c от параметра $n^{(n)}u^2$ (где $n^{(n)}$ — концентрация немагнитных примесей, $u = u_{aa}, u_{cc}, u_{ac}$) для случая, когда химический потенциал находится внутри узкой зоны ($\varepsilon_{c0} = 0$). Как видно из рисунка, наиболее сильное влияние на критическую температуру оказывает рассеяние в узкой зоне (кривая *a*). Включение межзонного рассеяния (кривая *c*) практически не влияет на результат. Это также подтверждается тем, что учет межзонного рассеяния совместно с рассеянием в широкой

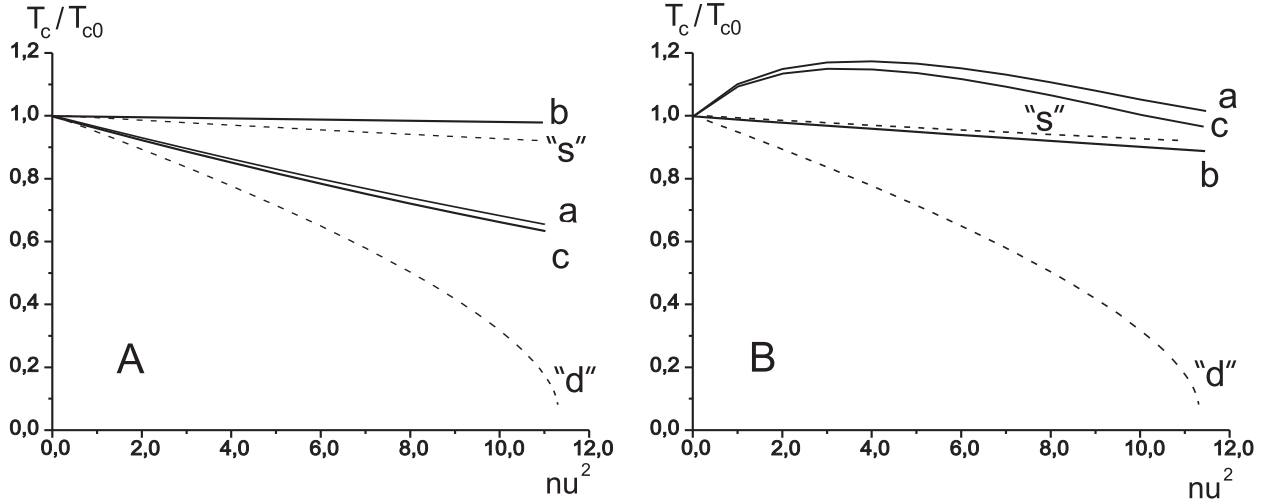


Рис. 2: Зависимости критической температуры сверхпроводящего перехода T_c от параметра nu^2 , соответствующего рассеянию электронов на немагнитных примесях, вычисленные для А) $\varepsilon_{c0} = 0$, В) $\varepsilon_{c0} = -3$ и а) $u = u_{cc}$, $u_{ac} = u_{aa} = 0$; б) $u = u_{aa}$, $u_{ac} = 0.5u_{aa}$, $u_{cc} = 0$; в) $u = u_{cc}$, $u_{ac} = 0.5u_{cc}$; "s" – в рамках однозонной модели с s -симметрией параметра порядка; "d" – в рамках однозонной модели с d -симметрией параметра порядка.

зоне (кривая b) слабо влияет на критическую температуру. Соответствующая кривая почти совпадает с рассчитанной в однозонной модели с s -симметрией параметра порядка.

Если центр узкой зоны находится вдали от химического потенциала ($\varepsilon_{c0} = -3$ в единицах четверти ширины узкой зоны), то поведение T_c с ростом концентрации примесей меняется (Рис.2В). В этом случае межзонное рассеяние понижает, а внутризонное рассеяние в узкой зоне повышает критическую температуру в области малых значений параметра $n^{(n)}u_{cc}^2$. Рост критической температуры при малом увеличении концентрации примесей объясняется тем, что повышается плотность электронных состояний вблизи химического потенциала из-за уширения пика, возникающего из особенности ван Хова затравочной узкой зоны. Этот эффект в данной области параметров преобладает над разрушением сверхпроводимости, вызванным рассеянием на примесях.

Из Рис.2 следует, что, хотя параметр порядка в рассматриваемой модели и меняет знак, в отличие от однозонной модели с d -симметрией параметра порядка, сверхпроводимость подавляется примесями значительно слабее, причем не существует конечной концентрации немагнитных примесей, для которой сверхпроводимость в системе полностью исчезает. Внутризонное рассеяние в широкой зоне и межзонное рассеяние практически не влияют на критическую температуру.

На Рис.3 представлены зависимости T_c от концентрации магнитных при-

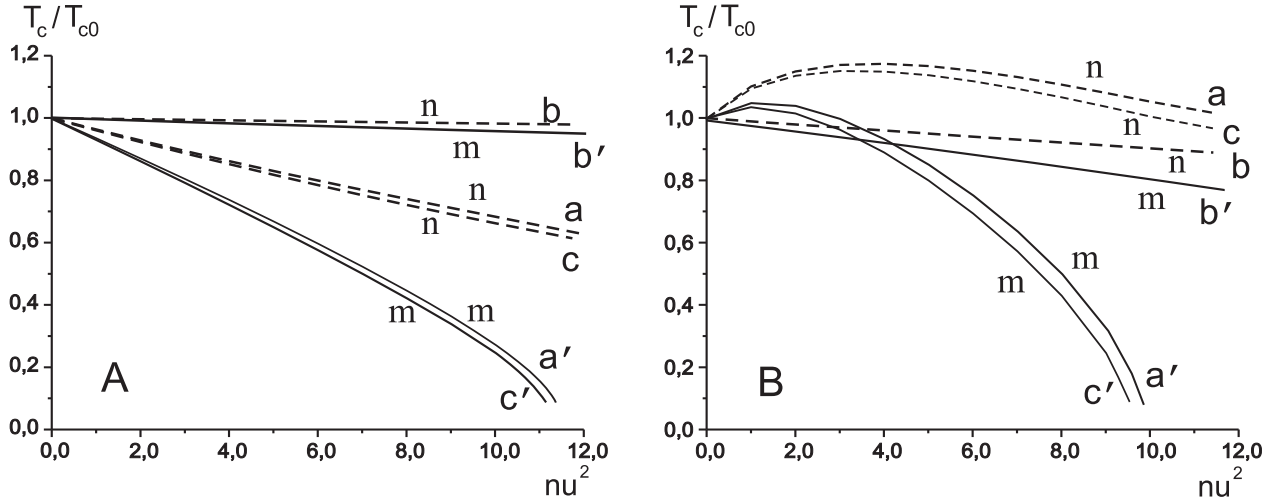


Рис. 3: Зависимости критической температуры сверхпроводящего перехода T_c от параметра ν^2 , соответствующего рассеянию электронов на немагнитных (n) и магнитных (m) примесях, рассчитанные при А) $\varepsilon_{c0} = 0$, В) $\varepsilon_{c0} = -3$ и а) $u = u_{cc}^n, u_{ac}^n = u_{aa}^n = 0$; б) $u = u_{aa}^n, u_{ac}^n = 0.5u_{aa}^n, u_{cc}^n = 0$; в) $u = u_{cc}^n, u_{ac}^n = 0.5u_{cc}^n, u_{aa}^n = 0$; а') $u = u_{cc}^m, u_{ac}^m = u_{aa}^m = 0$; б') $u = u_{aa}^m, u_{ac}^m = 0.5u_{aa}^m, u_{cc}^m = 0$; в') $u = u_{cc}^m, u_{ac}^m = 0.5u_{cc}^m, u_{aa}^m = 0$.

месей. Для сравнения здесь приведены также кривые $T_c(\nu^2)$ для случая рассеяния на немагнитных примесях. Как видно из Рис.3, самое сильное подавление сверхпроводимости обусловлено внутризонным рассеянием в узкой зоне (кривые a' и c'). Из сравнения кривых b' и c' видно, что необычно слабое влияние на T_c оказывает межзонное рассеяние на магнитных примесях. Это, а также то, что внутризонное рассеяние в широкой зоне практически не влияет на критическую температуру, можно объяснить малой плотностью электронных состояний в широкой зоне в области вблизи химического потенциала и тем, что сверхпроводимость обусловлена притяжением между электронами в узкой зоне.

В разделе 2.7 представлены выводы ко второй главе.

В **третьей главе** изучается поведение оптической проводимости двухзонного сверхпроводника как функции частоты при $T = 0$.

В разделе 3.1 приведен краткий обзор исследований, связанных с оптическими измерениями (в далеком инфракрасном и микроволновом диапазонах частот) в высокотемпературных сверхпроводниках.

В разделе 3.2 в рамках диаграммной техники Келдыша для неравновесных процессов получено выражение для проводимости двухзонного сверхпроводника на произвольной частоте внешнего электромагнитного поля.

Действительная часть проводимости имеет вид:

$$\begin{aligned} \text{Re } \sigma_{lm}(\omega) &= \frac{4e^2}{\omega} \int (n_\varepsilon - n_{\varepsilon+\omega}) \text{Sp} \left\{ \frac{\partial \hat{\xi}}{\partial k_l} \left(\hat{G}_{\varepsilon+\omega}'' \frac{\partial \hat{\xi}}{\partial k_m} \hat{G}_\varepsilon'' + \hat{F}_{\varepsilon+\omega}'' \frac{\partial \hat{\xi}}{\partial k_m} \hat{F}_\varepsilon'' \right) \right\} \times \\ &\times \frac{d^3 k d\varepsilon}{(2\pi)^4} + \pi e^2 D_{lm}^{(s)} \delta(\omega), \end{aligned} \quad (1)$$

мнимая—

$$\begin{aligned} \text{Im } \sigma_{lm}(\omega) &= \frac{4e^2}{\omega} \int \text{Sp} \left\{ \frac{\partial \hat{\xi}}{\partial k_l} \left[n_\varepsilon \left(\hat{G}'_{\varepsilon+\omega} \frac{\partial \hat{\xi}}{\partial k_m} \hat{G}''_\varepsilon + \hat{F}'_{\varepsilon+\omega} \frac{\partial \hat{\xi}}{\partial k_m} \hat{F}''_\varepsilon \right) \right. \right. \\ &+ \left. \left. n_{\varepsilon+\omega} \left(\hat{G}'_\varepsilon \frac{\partial \hat{\xi}}{\partial k_m} \hat{G}''_{\varepsilon+\omega} + \hat{F}'_\varepsilon \frac{\partial \hat{\xi}}{\partial k_m} \hat{F}''_{\varepsilon+\omega} \right) \right] \right\} \frac{d^3 k d\varepsilon}{(2\pi)^4} \\ &+ \frac{8e^2}{\omega} \int n_\varepsilon \text{Sp} \left\{ \frac{\partial^2 \hat{\xi}}{\partial k_l \partial k_m} \hat{G}''_\varepsilon \right\} \frac{d^3 k d\varepsilon}{(2\pi)^4}, \end{aligned} \quad (2)$$

где $n_\varepsilon = (\exp(\varepsilon/T) + 1)^{-1}$ — распределение Ферми, $\hat{\xi} = \begin{pmatrix} \xi_a & W \\ W^* & \xi_c \end{pmatrix}$ — матрица энергий электрона (ξ_a и ξ_c — энергии электронов в зонах a и c , соответственно, W — матричный элемент одночастичной межзонной гибридизации). Здесь также введены обозначения $\hat{G}'_\varepsilon \equiv \text{Re} \hat{G}^A(\mathbf{k}, \varepsilon)$, $\hat{G}''_\varepsilon \equiv \text{Im} \hat{G}^A(\mathbf{k}, \varepsilon)$, $\hat{F}'_\varepsilon \equiv \text{Re} \hat{F}^A(\mathbf{k}, \varepsilon)$, $\hat{F}''_\varepsilon \equiv \text{Im} \hat{F}^A(\mathbf{k}, \varepsilon)$, где $\hat{G}^A = \begin{pmatrix} G_a^A & G_{ac}^A \\ G_{ca}^A & G_c^A \end{pmatrix}$ и $\hat{F}^A = \begin{pmatrix} F_a^A & F_{ac}^A \\ F_{ca}^A & F_c^A \end{pmatrix}$ — матричные опережающие, соответственно, нормальные и аномальные функции Грина в отсутствие внешнего поля (a и c — индексы зон). Из (1) видно, что в действительной части проводимости имеется характерный для сверхпроводящего состояния δ -функциональный вклад, амплитуда которого определяется величиной

$$\begin{aligned} D_{lm}^{(s)} &\equiv \text{Re} Q_{lm}(\omega = 0) + D_{lm} = \\ &= 8 \int n_\varepsilon \text{Sp} \left\{ \frac{\partial \hat{\xi}}{\partial k_l} \left(\hat{G}'_\varepsilon \frac{\partial \hat{\xi}}{\partial k_m} \hat{G}''_\varepsilon + \hat{F}'_\varepsilon \frac{\partial \hat{\xi}}{\partial k_m} \hat{F}''_\varepsilon \right) + \frac{\partial^2 \hat{\xi}}{\partial k_l \partial k_m} \hat{G}''_\varepsilon \right\} \frac{d^3 k d\varepsilon}{(2\pi)^4} \\ &= 16 \int n_\varepsilon \text{Sp} \left\{ \frac{\partial \hat{\xi}}{\partial k_l} \hat{F}'_\varepsilon \frac{\partial \hat{\xi}}{\partial k_m} \hat{F}''_\varepsilon \right\} \frac{d^3 k d\varepsilon}{(2\pi)^4}. \end{aligned} \quad (3)$$

Он обычно связывается с откликом сверхпроводящего конденсата на статическое магнитное поле и, по существу, определяет глубину проникновения поля в сверхпроводник. Из последнего равенства очевидно, что этот вклад, как и следовало ожидать, исчезает в нормальном состоянии, т.к. в этом случае аномальные функции \hat{F}_ε обращаются в нуль. Действительная

часть проводимости, определяемая формулой (1), удовлетворяет следующему правилу сумм:

$$\int_0^{\infty} \text{Re } \sigma_{lm}(\omega) d\omega = \frac{\pi e^2}{2} D_{lm} \quad (4)$$

где величина D_{lm} , соответствующая вкладу в ток от диамагнитного члена, равна

$$D_{lm} = 8 \int n_{\varepsilon} \text{Sp} \left\{ \frac{\partial^2 \hat{\xi}}{\partial k_l \partial k_m} \hat{G}_{\varepsilon}'' \right\} \frac{d^3 k d\varepsilon}{(2\pi)^4}.$$

В разделе 3.3 приведены значения параметров двухзонной модели, используемые для численных расчетов. Соответствующая зонная картина аналогична рассмотренной в разделе 2.4.

В разделе 3.4 приведены результаты вычислений зависимости оптической проводимости от частоты при $T = 0$ для разных положений центра узкой зоны ε_{c0} относительно химического потенциала. На Рис.4а показана

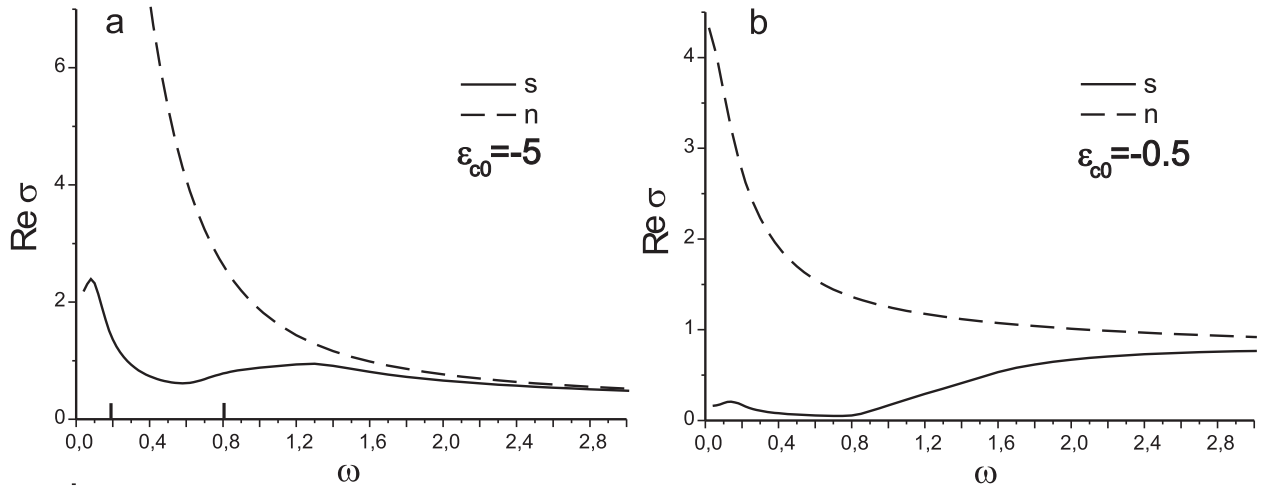


Рис. 4: Зависимость действительной части проводимости от частоты внешнего электромагнитного поля ω для двух значений параметра ε_{c0} : $\varepsilon_{c0} = -5$ (а), $\varepsilon_{c0} = -0.5$ (б). Сплошная кривая соответствует сверхпроводящему состоянию, пунктирная – нормальному. На горизонтальной оси отмечены частоты, равные используемым при расчетах в данной работе значениям параметров порядка в широкой ($|\Delta_a| = 0.18$) и узкой ($\Delta_c = 0.81$) зонах.

действительная часть проводимости $\text{Re}\sigma$ как функция частоты ω в случае, когда химический потенциал находится вне узкой зоны ($\varepsilon_{c0} = -5$). Отметим, что, в отличие от аналогичной зависимости для модели БКШ, здесь имеется конечное поглощение при всех частотах, в том числе и в диапазоне $0 < \omega < \Delta_c$ (Δ_c – параметр порядка в узкой зоне), что характерно

для однозонных моделей с сильноанизотропным параметром порядка, например, d -типа $\Delta(\mathbf{k}) = \Delta_0(\cos k_x - \cos k_y)$. Такое поведение действительной части проводимости связано с отсутствием щели в спектре элементарных возбуждений сверхпроводника. При этом, как и в модели с d -симметрией параметра порядка, $\text{Re}\sigma$ сначала убывает с ростом частоты, а затем при некоторой ω (здесь $\omega \sim \Delta_c$) начинает увеличиваться и в дальнейшем выходит на асимптотику для нормального состояния. Небольшой максимум вблизи $\omega = 0$ связан с наличием отличного от нуля параметра порядка Δ_a в широкой зоне.

Ситуация несколько меняется, если химический потенциал сдвигается внутрь узкой зоны. Как видно из Рис.4b, в этом случае ($\varepsilon_{c0} = -0.5$) действительная часть проводимости хотя и отлична от нуля при частотах $0 < \omega < \Delta_c$, но сильно подавлена по сравнению с рассмотренным выше случаем. Такого рода зависимость $\text{Re}\sigma(\omega)$ близка по характеру к имеющей место в однозонной модели с s -симметрией параметра порядка. Сравнение Рис.4а и 4b показывает, что величина $\text{Re}\sigma$ уменьшается с приближением ε_{c0} к 0, причем не только в сверхпроводящем, но и в нормальном состоянии.

Графическая интерпретация правила сумм (4) состоит в том, что площадь под кривой $\text{Re}\sigma(\omega)$ должна быть равна величине $\pi e^2 D/2$ вне зависимости от того, находится ли система в сверхпроводящем или в нормальном состоянии. Однако, из Рис.4а и 4b видно, что площадь под сплошной кривой меньше, чем под пунктирной. Тем не менее, правило сумм (4) не нарушается, поскольку в сверхпроводящем состоянии существует еще δ -функциональный вклад в проводимость (см. (1)), учет которого в интеграле (4) приводит к компенсации "недостающей" площади.

С наличием этого вклада в $\text{Re}\sigma$ связано и то, что мнимая часть проводимости в сверхпроводящем состоянии, изображенная на Рис. 5а и 5b сплошными линиями, обратно пропорциональна частоте при малых значениях последней (см. формулы(1,2)). Коэффициент пропорциональности согласно (2,3) равен $e^2 D^{(s)}$ и, очевидно, обращается в нуль при переходе в нормальное состояние, для которого в соответствии с формулой Друде при малых частотах $\text{Im}\sigma$ линейно зависит от ω (пунктирные линии на Рис.5а и 5b).

Зависимость $\text{Re}\sigma(\omega)$, изображенная на Рис.4а сплошной линией, качественно согласуется с экспериментальными результатами, полученными в ВТСП-соединениях [4]. Кроме того, изменение поведения оптической проводимости как функции частоты с параметром ε_{c0} соответствует экспери-

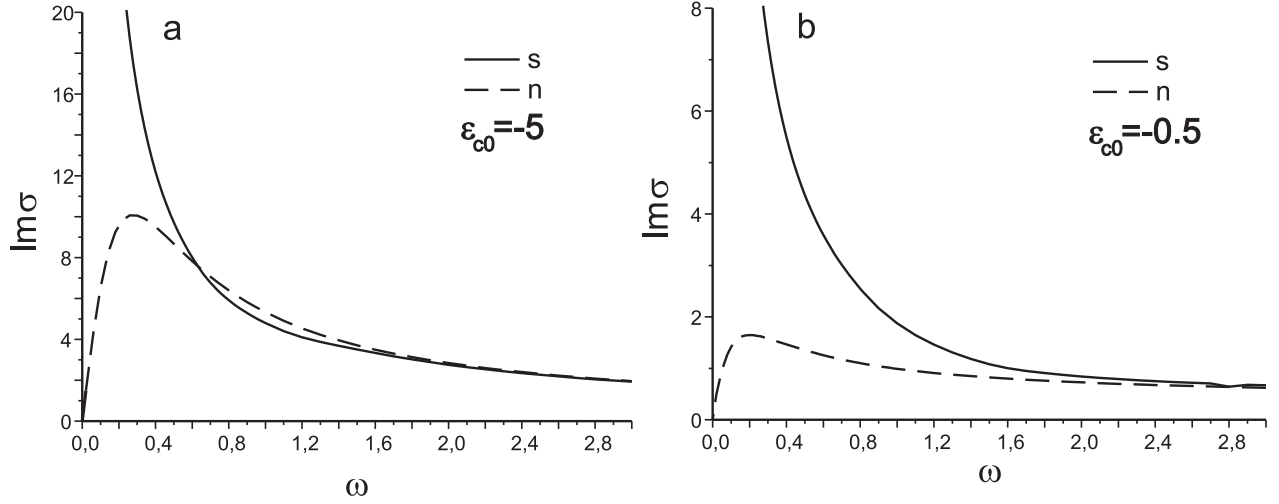


Рис. 5: Зависимость мнимой части проводимости от частоты внешнего электромагнитного поля ω для двух значений параметра ε_{c0} : $\varepsilon_{c0} = -5$ (a), $\varepsilon_{c0} = -0.5$ (b).

ментально наблюдаемой зависимости свойств сверхпроводящего состояния от уровня допирования [6].

В разделе 3.5 приведены выводы к данной главе.

Четвертая глава посвящена исследованию влияния симметрии электронных состояний на вольт-амперные характеристики *SIS*-контактов.

В разделе 4.1 приведен краткий обзор результатов туннельных измерений для высокотемпературных сверхпроводников, а также ряда теоретических подходов, предлагавшихся для их объяснения.

В разделе 4.2 рассматривается многозонная модель электронной системы *CuO₂*-плоскости, в которой учитываются переходы электронов между $d_{x^2-y^2}$ -, d_{z^2} - орбиталями меди и p_x -, p_y - орбиталями кислорода. Гамильтониан модели имеет вид:

$$\begin{aligned}
H &= \varepsilon_{z^2} \sum_{i,\sigma} c_{i,\sigma}^+ c_{i,\sigma} + \varepsilon_d \sum_{i,\sigma} d_{i,\sigma}^+ d_{i,\sigma} \\
&+ \varepsilon_p \sum_{i,\sigma} (p_x^+(i,\sigma) p_x(i,\sigma) + p_y^+(i,\sigma) p_y(i,\sigma)) + \\
&+ \sum_{i,j,\sigma} (t_{z^2-p_x}^{i,j} c_{i,\sigma}^+ p_x(j,\sigma) + h.c.) + \sum_{i,j,\sigma} (t_{z^2-p_y}^{i,j} c_{i,\sigma}^+ p_y(j,\sigma) + h.c.) + \\
&+ \sum_{i,j,\sigma} (t_{d-p_x}^{i,j} d_{i,\sigma}^+ p_x(j,\sigma) + h.c.) + \sum_{i,j,\sigma} (t_{d-p_y}^{i,j} d_{i,\sigma}^+ p_y(j,\sigma) + h.c.) + \\
&+ U_{z^2} \sum_i c_{i\downarrow}^+ c_{i\downarrow} c_{i\uparrow}^+ c_{i\uparrow} + U_d \sum_i d_{i\downarrow}^+ d_{i\downarrow} d_{i\uparrow}^+ d_{i\uparrow} \quad , \quad (5)
\end{aligned}$$

где $c_{i,\sigma}^+$ и $d_{i,\sigma}^+$ – операторы рождения электронов со спином σ на d_{z^2} - и

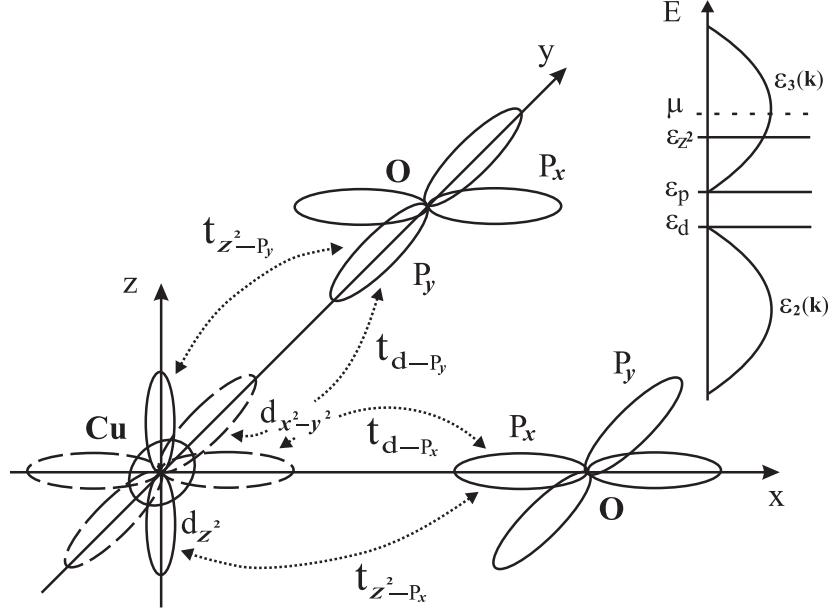


Рис. 6: Схематическое изображение атомных орбиталей в CuO_2 -плоскости и переходов между ними, включенных в гамильтониан (5). На вставке показано схематическое расположение уровней и соответствующих зон, получаемых в результате процедуры частичной диагонализации (5).

$d_{x^2-y^2}$ - орбиталей i -ого узла меди ; $p_x^+(i, \sigma)$ и $p_y^+(i, \sigma)$ – операторы рождения электронов со спином σ на p_x - и p_y - орбиталей i -ого узла кислорода (Рис.6). ε_p , ε_d и ε_{z^2} – энергии, соответственно, p - уровней кислорода, $d_{x^2-y^2}$ - и d_{z^2} - уровней меди, отсчитываемые от химического потенциала ($\mu = 0$). $t_{z^2-p_x}^{i,j} = t_{z^2-p_y}^{i,j} \equiv t_{z^2-p}$ и $t_{d-p_x}^{i,j} = -t_{d-p_y}^{i,j} \equiv t_{d-p}$ – матричные элементы одночастичных переходов между d_{z^2} -, $d_{x^2-y^2}$ - орбиталей меди и p -орбиталей кислорода. Для простоты предполагается, что сверхпроводимость обусловлена изотропным притяжением электронов $U_{z^2} < 0$ на d_{z^2} -орбитали. Следует отметить, что более сложный учет изотропного сверхпроводящего взаимодействия не привел бы к существенным отличиям от рассматриваемого случая. Предполагается также наличие изотропного эффективного электрон-электронного взаимодействия U_d на $d_{x^2-y^2}$ -орбитали меди.

Путем диагонализации части гамильтониана (5), описывающей переходы электронов между $d_{x^2-y^2}$ -орбиталей меди и p -орбиталей кислорода, исходную многозонную модель можно свести к двухзонной, которая была рассмотрена в предыдущих главах. При этом были выбраны следующие соотношения между параметрами $\varepsilon_d < \varepsilon_p$, $\varepsilon_p - \varepsilon_d \ll t_{d-p}$, $t_{z^2-p} \ll |\varepsilon_d|, |\varepsilon_p|$. В таком случае широкая зона $\varepsilon_3(\mathbf{k})$ порождается $d_{x^2-y^2}$ -уровнями меди и p -уровнями кислорода, а узкая зона $\varepsilon_{z^2}(\mathbf{k})$ – d_{z^2} -уровнем меди (см. вставку

на Рис.6).

В разделе 4.3 решена система уравнений для функций Грина z^2 -зоны и получен спектр возбуждений рассматриваемой модели. Он состоит из двух ветвей, законы дисперсии которых имеют вид:

$$E_{\pm}^2(\mathbf{k}) = [\varepsilon_{z^2}^2(\mathbf{k}) + \Delta_{z^2}^2 + \varepsilon_3^2(\mathbf{k}) + \Delta_3^2(\mathbf{k}) + 2W_3^2(\mathbf{k})] / 2 \pm \{[\varepsilon_{z^2}^2(\mathbf{k}) + \Delta_{z^2}^2 - \varepsilon_3^2(\mathbf{k}) - \Delta_3^2(\mathbf{k})]^2 + 4W_3^2(\mathbf{k})[(\Delta_{z^2} - \Delta_3(\mathbf{k}))^2 + (\varepsilon_{z^2}(\mathbf{k}) + \varepsilon_3(\mathbf{k}))^2]\}^{1/2} / 2, \quad (6)$$

где $\Delta_3(\mathbf{k})$ и Δ_{z^2} – параметры порядка в широкой и узкой зонах, соответственно, $W_3(\mathbf{k})$ – матричный элемент межзонной гибридизации. Возникающий в данной модели эффективный параметр порядка в z^2 -зоне

$$\tilde{\Delta}_{z^2}(\mathbf{k}) = \frac{\Delta_3(\mathbf{k})W_3^2(\mathbf{k})}{\varepsilon_3^2(\mathbf{k}) + \Delta_3^2(\mathbf{k})} + \Delta_{z^2} \quad (7)$$

является сильноанизотропным, благодаря свойствам матричного элемента $W_3(\mathbf{k})$, который из-за различия между типами симметрии затравочных орбиталей имеет нули вдоль диагоналей зоны Бриллюэна. Если между электронами на $d_{x^2-y^2}$ -орбитали меди действует отталкивание, т.е. $U_d > 0$, то $\Delta_3(\mathbf{k}) < 0$ при всех \mathbf{k} , в то время как $\Delta_{z^2} > 0$. В этом случае эффективный параметр порядка $\tilde{\Delta}_{z^2}(\mathbf{k})$ (7) меняет знак как функция квазиимпульса, а энергия возбуждений на нижней ветви спектра, $E_-(\mathbf{k})$, обращается в нуль в точках, находящихся на линиях в \mathbf{k} -пространстве, на которых $\tilde{\Delta}_{z^2}(\mathbf{k})$ равен нулю.

В разделе 4.4 обсуждаются условия туннелирования в разломных контактах типа BSCCO. С учетом кристаллической структуры этих соединений предполагается, что туннелирование вдоль оси c идет в основном через d_{z^2} -орбитали меди CuO_2 -плоскости (и апикальный кислород, не включенный в явном виде в рассматриваемую модель). Матричный элемент туннелирования считается независимым от импульса ($T_{\mathbf{k}\mathbf{p}} = T = const$), в силу случайности образования связей между d_{z^2} -орбиталями по обе стороны контакта. Таким образом, процесс туннелирования между двумя сверхпроводниками (слоями CuO_2) рассматривается как проходящий через совокупность точечных контактов. Выражение для зависимости квазичастичного туннельного тока от приложенного к контакту напряжения в этом случае принимает стандартный вид:

$$I(V) = 4e|T|^2 \int_{-\infty}^{\infty} [n(\omega) - n(\omega - eV)]N(\omega)N(\omega - eV)d\omega, \quad (8)$$

где $n(\omega)$ – фермиевская функция распределения, $N(\omega)$ – плотность состояний квазичастиц в z^2 -зоне, определяемая следующей формулой

$$N(\omega) = -\frac{1}{\pi} \int \text{Im} G_{z^2}^R(\omega, \mathbf{k}) \frac{d^3 k}{(2\pi)^3}. \quad (9)$$

Существенный момент настоящего подхода состоит в том, что $N(\omega)$ не является средней плотностью состояний в зоне проводимости (как в однозонной модели БКШ), а представляет собой парциальную плотность в z^2 -зоне.

В разделе 4.5 приведены используемые при дальнейших вычислениях значения параметров модели.

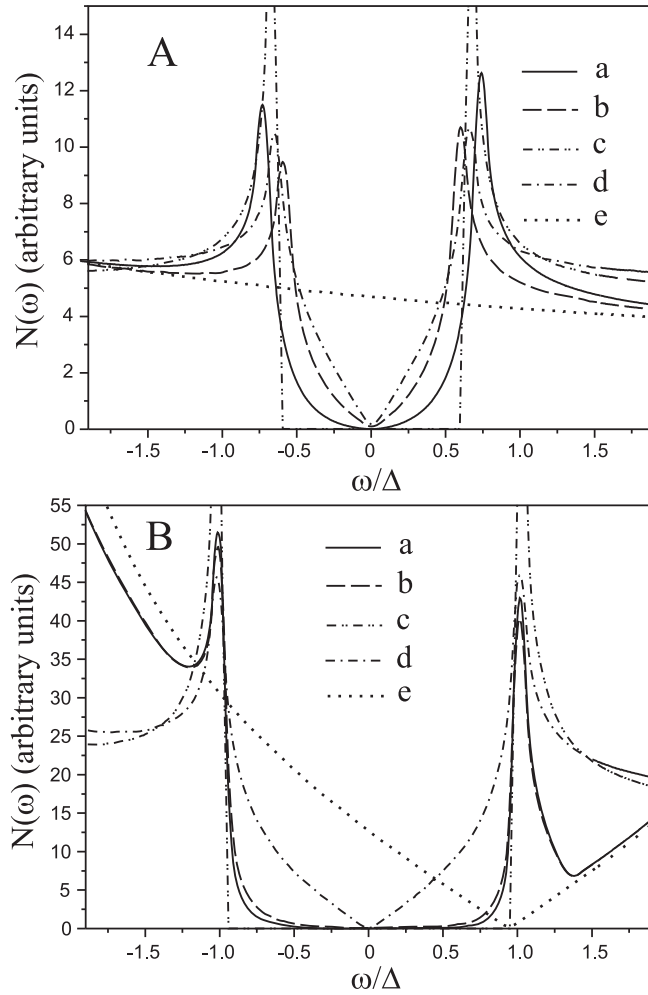


Рис. 7: Плотность состояний в нормальном и сверхпроводящем случаях в z^2 -зоне: А) $\varepsilon_{z^2} = -10$, В) $\varepsilon_{z^2} = 0$. Приведены зависимости: а) без учета взаимодействия на $d_{x^2-y^2}$ -орбитали ($U_d = 0$); б) с учетом отталкивания на $d_{x^2-y^2}$ -орбитали ($U_d > 0$); в) в модели с s -симметрией параметра порядка; д) в модели с d -симметрией параметра порядка; е) нормальная плотность состояний.

В разделах 4.6 и 4.7 исследовалось поведение плотности состояний $N(\omega)$ и (dI/dV) -характеристик SIS -контактов в зависимости от величины взаимодействия между электронами на $d_{x^2-y^2}$ -орбитали меди и положения центра (ε_{z^2}) затравочной z^2 -зоны относительно химического потенциала.

На Рис.7А показаны кривые $N(\omega)$, рассчитанные для сверхпроводящего состояния в случае, когда химический потенциал находится вне z^2 -зоны ($\varepsilon_{z^2} = -10$ в единицах Δ_{z^2}). Как видно из рисунка, если имеет место отталкивание между электронами на $d_{x^2-y^2}$ -орбитали, плотность квазичастиц подобна рассчитанной в модели с d -симметрией параметра порядка, в частности, вблизи $\omega = 0$ она линейно зависит от ω . Если нет взаимодействия на $d_{x^2-y^2}$ -орбитали, расстояние между сверхпроводящими пиками и их высота увеличиваются. Аналитические оценки показывают, что при очень малых частотах $N(\omega) \propto \omega^{3/2}$. Если центр затравочной z^2 -зоны лежит близко к химическому потенциалу (Рис.7В), различие кривых $N(\omega)$ (а) и (б) (без учета и с учетом отталкивания) исчезает, что связано с преобладанием влияния особенностей ван Хова на масштабах энергий порядка Δ_{z^2} . В обоих случаях поведение плотности квазичастиц становится s -подобным. Рассчитанная плотность состояний демонстрирует асимметрию пиков, связанную с расположением особенностей ван Хова в нормальной плотности состояний. Ближайшая к химическому потенциалу особенность ван Хова увеличивает высоту соответствующего пика плотности состояний в сверхпроводящем состоянии.

На Рис.8 представлены $\left(\frac{dI}{dV}\right)$ -характеристики SIS контакта, рассчитанные с помощью формулы (8) по найденным зависимостям $N(\omega)$ для двух положений уровня ε_{z^2} относительно химического потенциала: $\varepsilon_{z^2} = -10$, $\varepsilon_{z^2} = 0$, что может модельно соответствовать различным семействам высокотемпературных сверхпроводников.

Общей особенностью этих характеристик является то, что при учете отталкивания сверхпроводящий пик появляется при меньших напряжениях, он является менее высоким, но при малых напряжениях кривая лежит выше, чем без учета взаимодействия на $d_{x^2-y^2}$ -орбитали меди.

Если центр затравочной z^2 -зоны находится вдали от химического потенциала ($\varepsilon_{z^2} = -10$), то $\left(\frac{dI}{dV}\right)$ -характеристики подобны рассчитанным в модели с d -симметрией параметра порядка (Рис.8А). По мере приближения уровня ε_{z^2} к химическому потенциалу кривые демонстрируют стремление к зависимостям, полученным в модели с s -симметрией параметра порядка

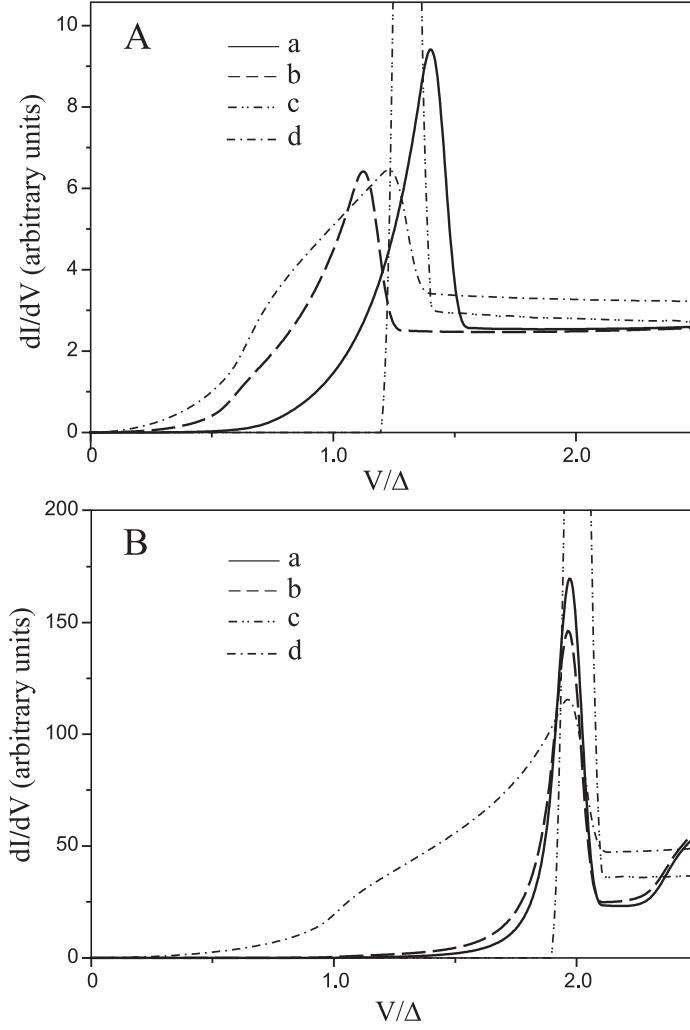


Рис. 8: $\left(\frac{dI}{dV}\right)$ -характеристики при: А) $\varepsilon_{z^2} = -10$, В) $\varepsilon_{z^2} = 0$. Приведены зависимости: а) без учета взаимодействия на $d_{x^2-y^2}$ -орбитали ($U_d = 0$); б) с учетом отгалкивания на $d_{x^2-y^2}$ -орбитали ($U_d > 0$); в) в модели с s -симметрией параметра порядка; д) в модели с d -симметрией параметра порядка.

(Рис.8В). При малых напряжениях $V < \Delta_{z^2}$ вольт-амперная характеристика SIS -контакта сильно подавлена. При этом, как и зависимости $N(\omega)$, $\left(\frac{dI}{dV}\right)$ -характеристики демонстрируют чрезвычайно узкие сверхпроводящие пики. Этот результат соответствует ряду экспериментальных данных для соединений типа BSCCO, например, для оптимально допированного [2] и передопированного [7] $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$.

В разделе 4.8 представлены выводы к данной главе.

В **Заключении** перечислены основные результаты диссертационной работы.

В **Приложении А** получено выражение для оператора плотности тока в двухзонной модели.

В **Приложении В** приведен вывод правила сумм (4) для действительной части проводимости.

Основные результаты работы

1. В рамках двухзонной модели сверхпроводника, являющейся обобщением стандартной модели БКШ на случай сложной кристаллической структуры, исследована зависимость критической температуры от концентрации немагнитных и магнитных примесей. Учитывалось наличие как внутризонного, так и межзонного рассеяния электронов на примесях. Показано, что, несмотря на сильную анизотропию эффективных параметров порядка данной модели, имеет место слабое влияние немагнитных примесей на сверхпроводимость. Обнаружено, что при определенных значениях параметров модели возможен рост критической температуры с увеличением концентрации немагнитных примесей в области малых значений.

2. Показано, что внутризонное рассеяние на магнитных примесях в соответствии со стандартной теорией приводит к подавлению сверхпроводимости. Для случая же, когда внутризонное рассеяние пренебрежимо мало и преобладает межзонное рассеяние, обнаружено необычно слабое влияние магнитных примесей на критическую температуру.

3. На основе диаграммной техники для неравновесных процессов найдено выражение для проводимости двухзонного сверхпроводника на произвольной частоте внешнего электромагнитного поля. Рассчитанные зависимости оптической проводимости от частоты при $T = 0$ для разных значений параметров модели проявляют качественные черты, наблюдаемые экспериментально в высокотемпературных сверхпроводниках. Проведен анализ полученных зависимостей, исходя из оптического правила сумм. Показано, что поведение оптической проводимости как функции частоты заметно зависит от уровня допирования.

4. В рамках многозонной модели ВТСП рассчитаны плотность электронных состояний и вольт-амперные характеристики *SIS*-контактов. Показано, что при наличии сильноанизотропного (в том числе *d*-типа) эффективного параметра порядка в плоскости CuO_2 и существовании точек нулей в спектре возбуждений сверхпроводника, простой учет реальной зонной структуры ВТСП-соединений в достаточно широком диапазоне изменения параметров модели приводит к экспериментально наблюдаемому *s*-

подобному поведению вольт-амперных характеристик SNS - и SIS - контактов. Сравнение кривых, рассчитанных при различных значениях параметров рассматриваемой модели, свидетельствует о возможности сильного изменения вида вольт-амперных характеристик (от s - до d - типа простых моделей БКШ) в зависимости от строения электронных зон высокотемпературных сверхпроводников без изменения свойств сверхпроводящего взаимодействия.

Основные результаты диссертации опубликованы в следующих работах:

- [1] С. О. Лойко, Н. К. Федоров, П. И. Арсеев, "Влияние симметрии электронных состояний ВТСП на вольт-амперные характеристики *SIS*-контактов" , ЖЭТФ **121**, 453 (2002).
- [2] P. I. Arseev, N. K. Fedorov , S. O. Loiko, "Impurities in two band model of superconductor order parameter anisotropy" , Solid State Commun. **124**, 257 (2002).
- [3] П. И. Арсеев, С. О. Лойко, Н. К. Федоров, "Теория калибровочно-инвариантного отклика сверхпроводников на электромагнитное поле" , УФН **176**, 3 (2006).

Список цитируемой литературы

- [1] J. Giapintzakis, D. M. Ginsberg, M. A. Kirk et al., Phys. Rev. **B 50**, 15967 (1994).
- [2] Ya. G. Ponomarev, Chong Soon Khi, Kim Ki Uk et al., Physica C **315**, 85 (1999).
- [3] Z. Yusof, J. F. Zasadzinski, L. Coffey et al., Phys. Rev. **B 58**, 514 (1998).
- [4] D. N. Basov, T. Timusk, Rev. Mod. Phys. **77**, 721 (2005).
- [5] P. I. Arseyev, N. K. Fedorov , B. A. Volkov, Sol. St. Commun. **100**, 581 (1996).
- [6] A. V. Pronin, A. Pimenov, A. Loidl et al., Phys. Rev. **B 68**, 054511 (2003).
- [7] M. Suzuki, T. Watanabe, A. Matsuda, Phys. Rev. Lett. **82**, 5361 (1999).