СВЕРХПРОВОДЯЩАЯ ЩЕЛЬ В СИСТЕМАХ С МОДУЛИРОВАННЫМ ПАРНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

А. Е. Кожекин

В приближении слабой связи исследовано поведение электронного спектра, плотности состояний, температуры сверхпроводящего перехода в системах с модулированным в пространстве (на масштабе порядка межатомного расстояния) межэлектронным взаимодействием. Для двумерных систем, в которых Ферми-поверхность близка к границе ячейки обратной решетки ($\mathbf{G} \approx 2\,\mathbf{k}_F$), эта модуляция может привести к существенным отличиям от результатов теории БКШ. В частности, возможно наличие нескольких сингулярностей в плотности состояний, аномальные значения отношения $2\Delta/T_c$ (которое может лежать во всем интервале от 0 до ∞).

1. В последние годы большой интерес вызывает вопрос о влиянии модуляции межэлектронного взаимодействия на сверхпроводящие свойства различных систем: сверхрешеток с периодом, много меньшим корреляционной длины [1-5], тяжелофермионных сверхпроводящих соединений [6] и т. д. В настоящей работе подход, разработанный для сверхрешеток в работах [1-5], обобщается для случая, когда период модуляции порядка постоянной решетки. Такие неоднородности безусловно присутствуют во всех сверхпроводниках, однако для большинства систем они не приводят к качественному отличию от результатов БКШ. Иная ситуация имеет место для рассмотренных в настоящей работе двумерных систем, в которых Ферми-поверхность близка к границе ячейки обратной решетки ($\mathbf{k}_F = \mathbf{G}/2$, где $\mathbf{k}_F$ — импульс Ферми, $\mathbf{G}$ — вектор обратной решетки). В таких системах модуляция межэлектронного взаимодействия может привести к существенному изменению спектра квазичастичных возбуждений, плотности состояний, величины щели, отношения $2\Delta/T_c$ и т. д. Эти отличия от БКШ определяются тем, что щель в спектре элементарных возбуждений $\tilde{\Delta}$, параметр порядка в теории Гинзбурга—Ландау $|\psi|^2$ и функция $\Delta(r)$ в уравнениях Боголюбова, вообще говоря, различны. Функция $\Delta(r)$ является интегральным ядром [7], которое и определяет физические величины.

Такая двумерная модель может быть использована как первый шаг для описания свойств слоистых металлооксидных ВТСП соединений, в которых физической причиной модуляции взаимодействия является наличие сильного отталкивания между квазичастицами на атомах меди в $Cu-O_2$ плоскости. Все рассмотрение ведется в рамках приближения слабой связи. Хотя применимость столь простого приближения требует некоторого дополнительного обоснования, можно ожидать, что этот подход поможет качественному пониманию некоторых удивительных свойств новых материалов, таких, например, как туннельные характеристики, аномальные значения отношения $2\Delta/T_c$.

2. Будем предполагать, что двумерный гамильтониан системы представляет собой сумму стандартного взаимодействия БКШ — $V_{\text{БКШ}}$ и δ-образного отталкивания в узлах некоторой двумерной решетки R_n: $Wa^2\delta\times$

$\times(r-R_n)$ (a^2 — площадь элементарной ячейки — нормировочный коэффициент).

Стандартным образом диагонализация полного гамильтониана проводится (в приближении среднего поля) с помощью уравнений Боголюбова [7, 8]

$$\begin{aligned} \varepsilon u(r) - \hat{\xi} u(r) &= \Delta(r) v(r), \\ \varepsilon v(r) + \hat{\xi} v(r) &= \Delta^*(r) u(r), \end{aligned} \tag{1}$$

где $\hat{\xi}$ — оператор энергии невзаимодействующих (другом с другом) электронов; u, v — функции Боголюбова; ε — искомые собственные значения. Уравнение самосогласования [7] имеет вид

$$\Delta(r) = [1 - \alpha\Sigma a^2\delta(r - R_n)]\, v_{\text{БКШ}} \langle\psi_\beta(r)\,\psi_{-\beta}(r)\rangle, \tag{2}$$

где $\alpha = W/V_{\text{БКШ}}$, а величина $\langle\psi_\beta(r)\,\psi_{-\beta}(r)\rangle$ является (с точностью до константы) параметром порядка. Так как последний определен на масштабах, много больших атомных, то мы можем пренебречь в нем зависимостью от координаты r, связанной с модуляцией взаимодействия.

Предположим в соответствии с вышесказанным, что фигурирующая в (2) комбинация $\Delta = V_{\text{БКШ}}\langle\psi_\beta(r)\,\psi_{-\beta}(r)\rangle$ не зависит от координат. Данное приближение является общепринятым [1-5], и, как показано в работе [5], в случае, когда модуляция одноэлектронных свойств (модуляция $\hat{\xi}$) невелика (а именно этот случай нас будет интересовать), данное приближение вполне удовлетворительно. Тогда из (2) следует

$$\Delta(r) = \Delta[1 - \alpha\Sigma a^2\delta(r - R_n)]. \tag{3}$$

Кроме модуляции сверхпроводящих свойств, будем учитывать взаимодействие электронов с ионным остовом

$$\hat{\xi} = \hat{\xi}_0 + U\sum_n a^2\delta(r - R_n), \tag{4}$$

где $\hat{\xi}_0$ — оператор кинетической энергии свободных электронов («затравочный спектр»); U — новый параметр модели — потенциал взаимодействия электронов с ионным остовом. Как будет видно из дальнейшего, учет прямого взаимодействия электронов с решеткой окажется существенным из-за «диэлектризации» спектра на границе зоны Бриллюэна.

Проведем Фурье-преобразование уравнений (1), (3), (4). Разложим величины u и v в интеграл Фурье [2, 3], оставляя в разложении только первых два члена (двухволновое приближение, которое является фактически разложением по U/ξ ($\mathbf{G}-\mathbf{k}$); Δ/ξ ($\mathbf{G}-\mathbf{k}$), где $\mathbf{G}$ — вектор обратной решетки). Функцию Δ (r) разложим в ряд Фурье. Из (3) имеем

$$\Delta_G = \Delta(\delta_{G0} - \alpha). \tag{5}$$

Как обычно, считаем величину Δ действительной.

Будем считать задачу изотропной, т. е. предполагать сферической (двумерной) как Ферми-поверхность, так и элементарную ячейку двумерной обратной решетки (модель Пенна [9]), а затравочный спектр невозмущенных электронов (вблизи поверхности Ферми) линейным. Здесь необходимо отметить, что при учете электрон-ионного взаимодействия мы обязательно получим расщепление спектра на две подзоны. Поэтому необходимо учесть неполноту заполнения зоны, т. е. влияние легирования на систему. В соответствии со сказанным выше запишем

$$\xi_0(\mathbf{k}) = (\mathbf{v}_F\mathbf{q}),\ \ \xi_0(\mathbf{G}-\mathbf{k}) = A - (\mathbf{v}_F\mathbf{q}), \tag{6}$$

где, по определению,

$$A = \xi_0(G - k_F) - \xi_0(k_F). \tag{7}$$

Кроме того, мы ввели обозначения $q=k-k_F$, v_F — затравочная скорость Ферми. В сделанных предположениях легко найти собственные значения системы (1). В результате определяем спектр квазичастичных возбуждений

$$\varepsilon_q^2 = [(v_F q) - A/2]^2 + [A/2 + U]^2 + U^2 + \Delta_0^2 + \Delta_1^2 \pm$$
$$\pm \{[(v_F q) - A/2]^2 [4\Delta_1^2 + (A + 2U)^2] + [2\Delta_0\Delta_1 + U(A + 2U)]^2\}^{1/2}. \qquad (8)$$

Закон дисперсии квазичастиц (спектр) (8) для $\alpha > 1/2$, U/Δ, $A/\Delta \leqslant 1$ изображен на рис. 1 (q — импульс, отсчитанный от поверхности Ферми).

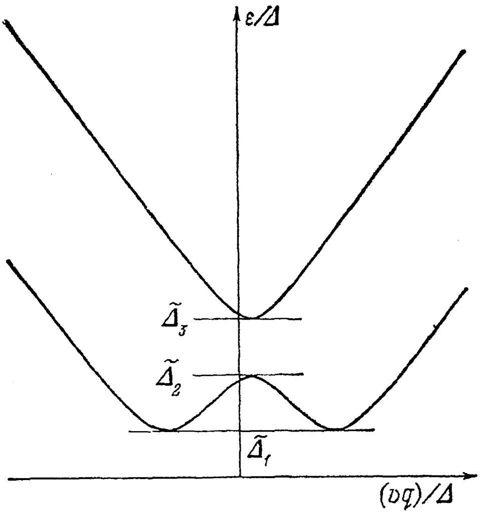

Рис. 1. Спектр квазичастичных возбуждений для $\alpha > 1/2$; U/Δ, $A/\Delta \leqslant 1$.

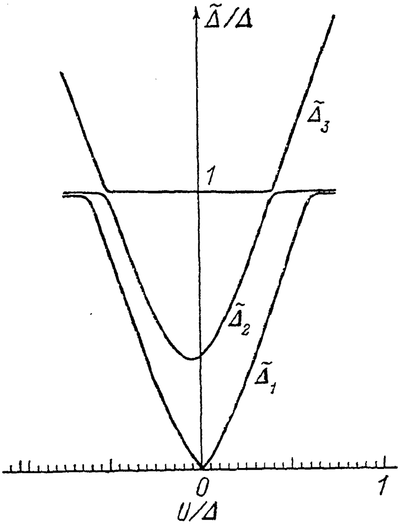

Рис. 2. Зависимость положений особенностей в плотности состояний (щелей $\tilde{\Delta}_1$, $\tilde{\Delta}_2$, $\tilde{\Delta}_3$) от параметра U/Δ.

Таким образом, в данном случае мы имеем три сингулярности ($\tilde{\Delta}_1$, $\tilde{\Delta}_2$, $\tilde{\Delta}_3$) в плотности состояний. Заметим, что поведение плотности состояний в нашем случае существенно отличается от поведения, предсказываемого теорией БКШ.

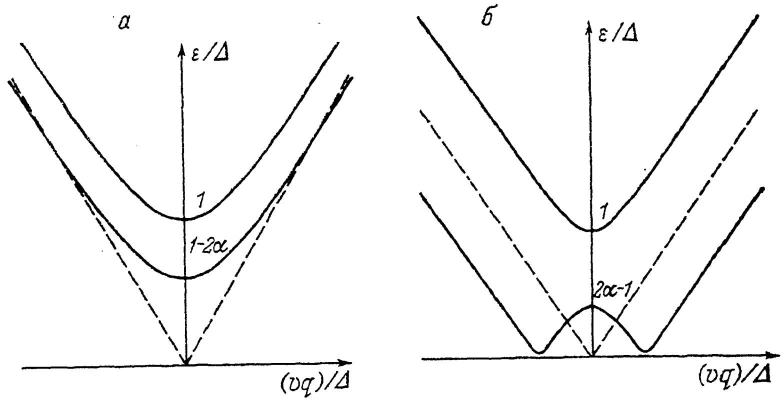

Рис. 3. Спектр квазичастичных возбуждений в случае $U=A=0$ для $\alpha < 1/2$ (*а*), $1/2 < \alpha < 1$ (*б*).

Зависимость $\tilde{\Delta}_1$, $\tilde{\Delta}_2$, $\tilde{\Delta}_3$ от U изображена на рис. 2 для $\alpha > 1/2$, $A/\Delta \leqslant 1$. Видно, что в противоположном интересуемому нас случае $U/\Delta \gg 1$ мы получаем обычную картину БКШ.

3. Для большинства систем условия U/Δ, $A/\Delta \leqslant 1$ не выполняются из-за наличия диэлектрического расщепления спектра на волновых

векторах, равных $G/2$. Однако если периоды электрон-ионного и межэлектронного взаимодействий не совпадают, например в случае двухатомной решетки, тогда электроны рассеиваются на обоих типах атомов, а вклад в сверхпроводящее взаимодействие дает лишь один. В этом случае в рамках двухволнового приближения можно пренебречь вкладом от электрон-ионного рассеяния. Рассмотрим наиболее интересный (отличающийся от БКШ) случай $U=A=0$ — случай полного «нестинга» [10].

Спектр квазичастичных возбуждений (8) при этом превратится в

$$\varepsilon_q^2=(v_Fq)^2+\Delta_0^2+\Delta_1^2\pm 2\Delta_1\sqrt{(v_Fq)^2+\Delta_0^2}\,. \tag{9}$$

Схематически закон дисперсии (9) изображен (при различных значениях параметра α) на рис. 3, *а*, *б* (штриховая линия — спектр нормальной системы).

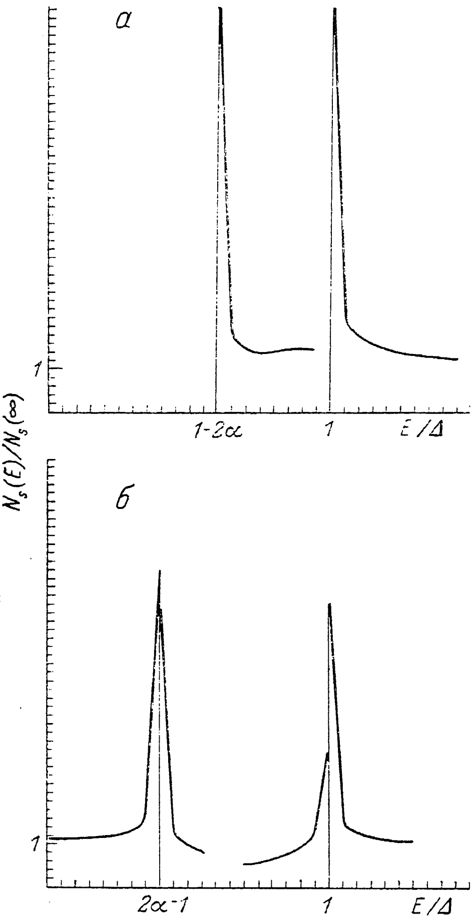

Рис. 4. Плотность состояний в случае $U=A=0$ для $\alpha<1/2$ (*а*), $1/2<\alpha<1$ (*б*).

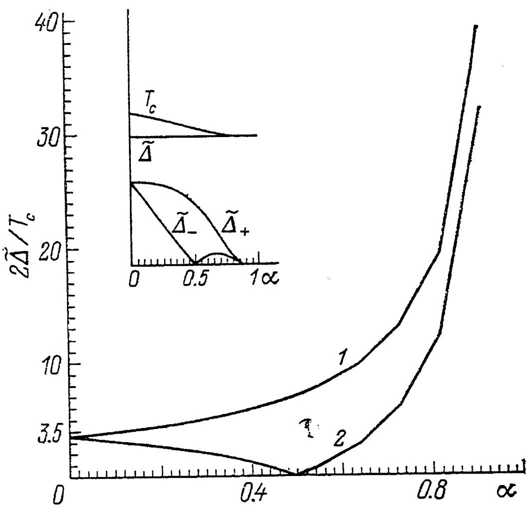

Рис. 5. Зависимость отношения $2\Delta/T_c$ от параметра модуляции взаимодействия α $2\tilde{\Delta}_+/T_c$ (*1*), $2\tilde{\Delta}_-/T_c$ (*2*).

На вставке показаны соответствующие зависимости величин T_c и Δ.

Из уравнения (9) плотность состояний можно получить аналитически [8]

$$\frac{N(E)}{N(0)}=\frac{1}{2}\sum_{\lambda}\left|\frac{\partial\xi_\lambda}{\partial\varepsilon}\right|=\frac{1}{2}\left\{\left|\frac{\varepsilon+\Delta_1}{((\varepsilon+\Delta_1)^2-\Delta_0^2)^{1/2}}\right|+\left|\frac{\varepsilon-\Delta_1}{((\varepsilon-\Delta_1)^2-\Delta_0^2)^{1/2}}\right|\right\}.$$

Соответствующая зависимость приведена на рис. 4, *а*, *б*. $N(0)$ — плотность состояний на поверхности Ферми нормального металла.

Из приведенных выше результатов следует, что в случае $1>\alpha>1/2$ поведение плотности состояний и щели качественно отличается от предсказаний модели БКШ.

В данном случае ($U=A=0$) легко разрешить уравнение самосогласования (2). Используя выражения (3) и (9), после довольно громоздких, но очевидных преобразований можно найти решения u и v системы (1). При этом, как следует из (9), получаются два решения, соответствующие двум ветвям спектра. Подставив эти решения в уравнение самосогласования (2), легко вычислить температуру сверхпроводящего перехода. Важным является то обстоятельство, уравнение (2) разрешимо только при условии, что координатная зависимость самосогласованного парного потенциала $\Delta(r)$ определяется формулой (3), что и подтверждает сделанные в начале работы предположения.

Вычисленная температура сверхпроводящего перехода, как и следовало ожидать [4], равна

$$T_c = 1.14\omega_d \exp[-1/\lambda(1-\alpha)], \tag{10}$$

где ω_d — частота Дебая, а введенный нами параметр α играет ту же роль, что и отношение λ/μ^* (где λ — константа электрон-фононного взаимодействия; μ — так называемый кулоновский псевдопотенциал: параметр, описывающий кулоновское отталкивание) в обычной [8] теории БКШ. Эффективное взаимодействие есть просто усредненное по объему взаимодействие, как и в случае сверхрешеток [3-5].

Найдем теперь величину отношения $2\tilde{\Delta}/T_c$, где $\tilde{\Delta}$ — значение энергии в точке сингулярности в плотности состояний (именно эта величина измерима в туннельных экспериментах). В нашем случае, как следует из рис. 5, мы имеем две «щели». Для большего и меньшего значений щели имеем

$$\frac{2\tilde{\Delta}_+}{T} = \frac{3.5}{1-\alpha} > 3.5,$$

$$\frac{2\tilde{\Delta}_-}{T_c} = 3.5\frac{|1-2\alpha|}{1-\alpha} \begin{cases} < 3.5 \text{ для } \alpha < 2/3, \\ > 3.5 \text{ для } 1 > \alpha > 2/3. \end{cases} \tag{11}$$

Таким образом, мы видим, что теперь величина $2\tilde{\Delta}/T_c$ не является универсальной величиной. Кроме того, сложность поведения плотности состояний может привести к различиям в результатах оптических и туннельных экспериментов.

Выше мы исследовали вопрос о сверхпроводимости систем с модулированным в пространстве взаимодействием. Было показано, что если $\mathbf{G}$ отличается от $2\mathbf{k}_F$ (где $\mathbf{G}$ — вектор обратной решетки, описывающий модуляцию сверхпроводящего взаимодействия), то картина сверхпроводимости в нашей модели совпадает с предсказаниями теории БКШ. В то же время для двухкомпонентных систем условие $\mathbf{G}=2\mathbf{k}_F$ может выполняться, что, как показано в данной работе, приводит к весьма нетривиальным сверхпроводящим свойствам.

Автор благодарит Е. Г. Максимова, О. В. Долгова и Ю. В. Копаева за обсуждение результатов работы и ценные замечания, а Д. И. Хомского за полезную критику первоначального варианта статьи.

Список литературы

[1] Tanaka Y., Tsukada M. // Phys. Rev. B. 1984. V. 40. P. 4482—4493.
[2] Cleary R. // Can. J. Phys. 1986. V. 64. P. 1486—1491.
[3] Kobes R. L., Whitehead J. P., Yuan B. J. // Physics Letters A. 1988. V. 132. P. 182—186.
[4] Киржниц Д. А., Максимов Е. Г. // ФММ. 1966. Т. 22. С. 520—528.
[5] Баранов М. В., Буздин А. И., Булаевский Л. Н. // ЖЭТФ. 1986. Т. 91. Р. 1063—1073.
[6] Imada M. // Preprint. 1986. N 1667.
[7] Oliveira L. N., Gross E. K., Kohn W. // Phys. Rev. Lett. 1988. V. 60. P. 2430—2433.
[8] Де Жен П. Сверхпроводимость металлов и сплавов. М.: Мир, 1968. 280 с.
[9] D. R. Penn / Phys. Rev. 1962. V. 128. P. 2093—2097.
[10] Копаев Ю. В. // Труды ФИАН. 1975. Т. 86. С. 3—100.

Физический институт им. П. Н. Лебедева
АН СССР
Москва

Поступило в Редакцию
20 декабря 1990 г.