

# КУЛОНОВСКОЕ СПАРИВАНИЕ ОДНОИМЕННО ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ С ОТРИЦАТЕЛЬНОЙ ЭФФЕКТИВНОЙ МАССОЙ В ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКАХ

*В. И. Белявский*

*Воронежский государственный педагогический университет  
394043, Воронеж, Россия*

*В. В. Копеев\*, Ю. В. Копеев*

*Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук  
117924, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 18 мая 2000 г.

Возникновение квазистационарных состояний пар одноименно заряженных квазичастиц оказывается возможным благодаря тому, что электронная структура соединений, обнаруживающих высокотемпературную сверхпроводимость, имеет ряд существенных особенностей: квазидвумерный характер электронного спектра, ярко выраженный нестинг изоэнергетических линий и наличие логарифмической особенности плотности состояний в непосредственной окрестности уровня Ферми. Таким образом, реализуется ситуация, когда в прилегающей к уровню Ферми обширной области зоны Бриллюэна главные значения тензора обратных эффективных масс имеют противоположные знаки и значительно различаются по абсолютной величине. В результате изменяется характер кулоновского корреляционного взаимодействия между носителями заряда одного знака (дырками в  $p$ -купратах): преобладающим может стать эффективное притяжение, ведущее к образованию долгоживущих состояний относительного движения квазичастиц, составляющих пару с квазиимпульсом, приблизительно равным характерному для данного направления удвоенному фермиевскому квазиимпульсу (сфокусированные пары). В предположении, что корреляционное взаимодействие является короткодействующим (экранированное кулоновское взаимодействие, ослабленное из-за заполнения состояний внутри контура Ферми), найдены значения энергии и огибающие функции относительного движения дырочной пары, которые соответствуют максимумам плотности состояний пар, обусловленным такими квазистационарными состояниями. Зависимость этих величин от полярного угла в плоскости проводящего слоя отражает симметрию электронной структуры соединения в нормальном состоянии и в общем случае соответствует смеси состояний, относящихся к  $s$ - и  $d$ -типам орбитальной симметрии. Энергия квазистационарного состояния как функция уровня допирования системы находится в качественном соответствии с концентрационной зависимостью температуры появления псевдощели, наблюдаемой в  $p$ -купратах при уровнях допирования ниже оптимального. Оценка концентрации пар, выше которой возникает выигрыш в корреляционной энергии, приводит к значению, соответствующему началу эффективного перекрытия пар (характерный пространственный размер которых составляет несколько единиц или десятков межатомных расстояний).

PACS: 74.20.Mn

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Высокотемпературная сверхпроводимость (ВТСП) довольно широкого класса соединений пока не нашла общепринятой интерпретации. При-

нято считать, что свойства ВТСП-соединений как в сверхпроводящем, так и в нормальном состояниях определяются, в основном, двумя особенностями: квазидвумерным характером электронной структуры и сильным электрон-электронным взаимодействием. Можно утверждать, что ВТСП-состояние обусловлено парными электронными корреляци-

\*E-mail: kopaev@sci.lebedev.ru

ями; при этом причина возникновения связанных состояний электронных или дырочных пар в ВТСП-соединениях остается неясной. Электрон-фононное спаривание, лежащее в основе теории Бардина, Купера и Шриффера (БКШ) и существенно ограничивающее величину температуры перехода в сверхпроводящее состояние, едва ли может быть ответственным за ВТСП, поскольку в некоторых ВТСП-соединениях величина энергии связи примерно на порядок выше значения, к которому, в принципе, может привести теория БКШ, так что характерный размер куперовской пары оказывается сравнимым со средним расстоянием между парами. Возникновение столь компактных композитных квазичастиц, составленных из двух фермионов, определенно не может быть обусловлено только электрон-фононным взаимодействием при сколько-нибудь разумных предположениях об интенсивности последнего. Поэтому имеются основания полагать, что возникновение электронных или дырочных пар в ВТСП-соединениях обусловлено непосредственно специфическими особенностями их электронной подсистемы.

Обширная и наиболее изученная группа купратных ВТСП-соединений в основном обнаруживает дырочный тип ( $p$ -тип) проводимости ( $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ ,  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ ,  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ , и многие другие); некоторые из ВТСП-купратов (такие, как  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ ) имеют электронный тип ( $n$ -тип) проводимости. Все остальные известные к настоящему времени ВТСП-соединения также, как правило, имеют дырочный тип проводимости. Тип проводимости и концентрация носителей тока связаны с отклонениями от стехиометрического состава (стехиометрические ВТСП-соединения являются диэлектриками) и наличием легирующих примесей. Этими двумя факторами определяется уровень допирования данного соединения.

Все известные ВТСП-соединения имеют слоистую кристаллическую структуру; при этом достаточно убедительные экспериментальные факты свидетельствуют о том, что в купратных соединениях ВТСП-состояние возникает благодаря спариванию носителей заряда в слоях  $\text{CuO}_2$  [1]. Приводятся также аргументы в пользу того, что температура сверхпроводящего перехода в ВТСП-купратах  $p$ -типа зависит от концентрации дырок только в слоях  $\text{CuO}_2$  [2], тогда как экранирование зарядов в проводящих слоях определяется полной концентрацией носителей. Слоистая структура ВТСП-купратов позволяет рассматривать их как естественные сверхрешетки, в которых латеральная проводимость опре-

деляется свойствами слоев  $\text{CuO}_2$ , играющих роль своеобразных квантовых ям, разделенных барьерными слоями [3]. В качестве квантовых ям, например, выступают отдельные слои  $\text{CuO}_2$  в соединениях  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  и  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ ; двойные слои  $\text{CuO}_2$ , разделенные слоем, содержащим атомы Y, в соединении  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ ; тройные слои  $\text{CuO}_2$ , разделенные слоями, содержащими атомы Ca, в соединении  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ . Соответственно, слои, содержащие атомы La, Ce, Ba и Bi, играют роль барьеров и одновременно резервуаров, при легировании которых, например, атомами Sr в  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ , Ce в  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$  и кислорода в  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  и  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$  носители заряда поступают в слои  $\text{CuO}_2$ . Взаимное влияние слоев друг на друга невелико [1], так что ВТСП-соединения можно рассматривать как квазидвумерные электронные системы. Атомный состав слоев, располагающихся между слоями  $\text{CuO}_2$ , однако, оказывает заметное влияние на температуру сверхпроводящего перехода [4]. Введение легирующих примесей в купратные соединения  $p$ -типа, например Sr в кристалл  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ , или образование кислородных вакансий, например при удалении кислорода из кристалла  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ , сопровождается переходами электронов с  $d$ -оболочки атомов Cu для восстановления нарушенных химических связей (к двухвалентному Sr, заместившему трехвалентный La в  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ , или к ненасыщенной в результате образования кислородной вакансии химической связи атома Ba в  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ ). При этом дырка, локализованная в основном на атоме меди, и отрицательный заряд восстановленной химической связи располагаются на прямой, практически параллельной оси  $c$  структуры. Такое расположение минимизирует маделунговскую энергию кристалла, и, следовательно, является стабилизирующим фактором, существенно компенсирующим рост упругой энергии, связанной с дефектной структурой слоев-резервуаров.

Перемещение электронов в ВТСП-купратах фактически ограничено слоями  $\text{CuO}_2$ ; в направлении оси  $c$ , перпендикулярной этим слоям, проводимость в нормальном состоянии существенно ниже, чем вдоль слоев. Изоэнергетические поверхности электронного закона дисперсии в зонах, в которых располагается поверхность Ферми, таким образом, представляют собой слабо гофрированные цилиндры, ось которых совпадает с осью  $c$  [5]. Малость матричных элементов одноэлектронного гамильтониана, связывающих атомы в соседних слоях  $\text{CuO}_2$ , по сравнению с матричными элементами между атомами внутри слоя позволяет рассматривать электронную

подсистему ВТСП-купратов как практически двумерную ( $2D$ ). Сечение изоэнергетических поверхностей плоскостью, перпендикулярной оси  $c$ , определяет семейство изоэнергетических линий (изолиний) в  $2D$ -зоне Бриллюэна (в соединениях тетрагональной симметрии это — квадрат со стороной  $2\pi/a$ , где  $a$  — период кристаллической решетки в плоскости слоя  $\text{CuO}_2$ ). Одна из изолиний — контур Ферми — соответствует поверхности Ферми.

Распределение изолиний в  $2D$ -зоне Бриллюэна определяется взаимодействием атомов в слоях  $\text{CuO}_2$  друг с другом и с атомами, принадлежащими соседним слоям. Контур Ферми, определенный экспериментально [6–10] с помощью методики фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES), в ВТСП-соединениях  $p$ -типа с оптимальным уровнем допирования (т.е. при такой концентрации носителей заряда, которая обеспечивает максимальное для данного соединения значение температуры перехода в сверхпроводящее состояние  $T_c$ ) при  $T > T_c$  представляет собой квадрат со скругленными углами. Изменение уровня допирования соответствует переходу контура Ферми с одной изолинии на другую, что позволяет с помощью методики ARPES исследовать характер изолиний в достаточно большой области зоны Бриллюэна. Если уровень допирования ниже оптимальной величины (недопированные ВТСП-соединения), то в широком интервале концентраций при температурах, превышающих некоторое значение  $T^* > T_c$ , изолиния, соответствующая контуру Ферми, также имеет форму квадрата со скругленными углами. Такую же форму контур Ферми имеет и в случаях, когда концентрация носителей выше оптимальной (передопированные ВТСП-соединения); при этом контур Ферми в виде квадрата со скругленными углами сохраняется вплоть до температуры  $T_c$ , при которой в спектре элементарных возбуждений появляется сверхпроводящая щель. Таким образом, контур Ферми ВТСП-купратов  $p$ -типа имеет относительно длинные почти прямолинейные участки, которые в силу кристаллической симметрии параллельны друг другу (нестинг контура Ферми). В связи с этим необходимо отметить, что в ВТСП-купратах  $n$ -типа, например в  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ , нестинг контура Ферми не имеет места — по форме контур Ферми близок к окружности [8, 9]. Если уровень допирования  $x$  (например, атомная концентрация легирующей примеси или кислородных вакансий) таков, что соответствует сверхпроводящей фазе при низких температурах ( $T < T_c$ ), то при  $T > T_c$  ВТСП-соединение ведет себя как металл, и площадь области зоны Бри-

ллюэна внутри контура Ферми определяется атомной концентрацией  $1+x$  в соответствии с теоремой Латтинджера [6, 9, 10].

Еще одной существенной особенностью ВТСП-купратов [11] является то, что в соединениях с  $p$ -типом проводимости в непосредственной близости к уровню Ферми располагается логарифмическая сингулярность Ван Хофа, тогда как в соединениях  $n$ -типа она находится существенно ниже уровня Ферми [11]. Этой сингулярности соответствует седловая точка электронного закона дисперсии, в которой энергия электрона (или дырки) как функция  $2D$ -квазиимпульса в одном из направлений проходит через максимум, а в другом, перпендикулярном, — через минимум. Таким образом, в некоторой окрестности седловой точки главные значения  $2D$ -тензора обратных эффективных масс имеют разные знаки, кроме того, они велики по абсолютной величине, т.е. в ВТСП-купратах  $p$ -типа эта окрестность занимает достаточно обширную часть  $2D$ -зоны Бриллюэна.

Выяснение природы спаривания и установление симметрии параметра порядка тесно связаны друг с другом и являются исключительно важным этапом построения теории высокотемпературной сверхпроводимости. Многочисленные экспериментальные данные для разнообразных ВТСП-купратов, на основании которых можно судить о симметрии параметра порядка, к сожалению, не всегда могут быть удовлетворительно согласованы друг с другом [12]. Имеются экспериментальные доказательства того, что в ВТСП-купратах с  $p$ -типом проводимости спариванию, возможно, соответствует орбитальная симметрия  $d_{x^2-y^2}$  [13]. Экспериментальные данные, относящиеся к ВТСП-соединениям с  $n$ -типом проводимости (именно,  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ ), свидетельствуют скорее в пользу  $s$ -волнового спаривания, или, если говорить точнее, указывают на отсутствие нулей параметра порядка [14]. Однако исследование спектров возбуждений в монокристаллах  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$  методом STM/STS, определенно указывает на анизотропию параметра порядка, и эта анизотропия характеризуется  $d$ -волновой симметрией [15]. Анализ разнообразных экспериментальных данных [12] позволяет с достаточно большой долей уверенности говорить о том, что параметр порядка является спиновым синглетом и может быть приближенно представлен как линейная комбинация орбитальных  $s$ - и  $d$ -волновых функций. В пользу подобной анизотропии параметра порядка в ВТСП-купратах могут косвенно свидетельствовать экспериментальные данные по электронным

спектрам комбинационного рассеяния ВТСП-кристаллов  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$  и  $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{CuO}_{6+\delta}$  [16], а также данные туннельной спектроскопии, относящиеся к соединению  $\text{Nd}_{1.85}\text{Ce}_{0.15}\text{CuO}_{4-\delta}$  [5]. Полученная в [5] угловая зависимость сверхпроводящей щели,  $\Delta(\vartheta) = \Delta_0 + \Delta_1 \cos 4\vartheta$ , где  $\Delta_0 \approx 2.2$  мэВ,  $\Delta_1 \approx 1.5$  мэВ, согласуется с выводом, сделанным в [13] на основе измерений угловой зависимости верхнего критического поля:  $\Delta(\vartheta)$  имеет четыре максимума и четыре минимума в области изменения направления квазиволнового  $2D$ -вектора,  $0 \leq \vartheta < 2\pi$ .

Имеется много экспериментальных данных [17], относящихся к большому количеству самых разных недодопированных ВТСП-соединений, свидетельствующих о наличии щели (так называемая псевдощель, поскольку некоторое количество возбуждений в пределах этой щели все же имеется) в спектре элементарных возбуждений при  $T_c < T < T^*$ . В передопированных ВТСП-соединениях псевдощель, по-видимому, отсутствует. Между псевдощелью и сверхпроводящей щелью имеется несомненная связь. Так, ЯМР-эксперименты, выполненные на большой группе ВТСП-купратов [17], показывают, что псевдощель и сверхпроводящая щель в этих соединениях имеют одинаковые симметрию и масштаб энергий и для различных купратов обнаруживают универсальную зависимость от уровня допирования. Тот факт, что ширина псевдощели и температура перехода в сверхпроводящее состояние для оптимально допированного кристалла имеют один и тот же энергетический масштаб, не связанный ни с антиферромагнитной обменной энергией, ни с энергией Ферми, интерпретируется так, что это тот же энергетический масштаб, который лежит в основе спаривающего взаимодействия [17]. Формирование псевдощели в недодопированных ВТСП-монокристаллах  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$  по мере понижения температуры от  $T^*$  до  $T_c$  наблюдалось при помощи методики ARPES [18]. Псевдощель на контуре Ферми возникает при  $T = T^*$  в четырех точках на серединах сторон квадрата со скругленными углами и при дальнейшем понижении температуры раздвигается по направлениям к углам. Таким образом, контур Ферми оказывается разрывным и представляет собой четыре дуги (скругленные края квадрата), не связанные друг с другом и постепенно уменьшающиеся с понижением температуры. При  $T = T_c$  контур Ферми исчезает полностью и на его месте возникает сверхпроводящая щель, причем эта щель, по-видимому, имеет нули (или минимальна) как раз в тех точках, где последним

исчез контур Ферми. Фазовый переход, связанный с наличием псевдощели, не наблюдается. В настоящее время нет единой и общепринятой точки зрения на природу псевдощели. В частности, считается, что при  $T = T^*$  появляются куперовские пары, фазовая когерентность между которыми возникает не при их образовании, а при существенно более низкой температуре  $T = T_c$  [19, 20]. Есть основания считать [21], что формирование псевдощели обусловлено последующим (при понижении температуры) возникновением именно сверхпроводящего, а не диэлектрического (антиферромагнитного) состояния, так что выяснение природы псевдощели в ВТСП-соединениях несомненно тесно связано с проблемой понимания механизма спаривания дырок в ВТСП-купратах  $p$ -типа.

Наблюдаемая анизотропия псевдощели и параметра порядка в ВТСП-купратах, как представляется, также связана с симметрией контура Ферми и особенностями электронной структуры в окрестности уровня Ферми. Несмотря на то что электроны в ВТСП-купратах сильно коррелированы, начиная с некоторого уровня допирования носители могут обеспечить достаточно эффективное экранирование, так что электронная структура этих соединений при энергиях, близких к уровню Ферми, может быть достаточно хорошо описана в рамках зонной схемы [11]. Результаты зонных вычислений [22], в целом, удовлетворительно согласуются с имеющимися экспериментальными данными, воспроизводя наблюдаемую форму контура Ферми в купратных ВТСП-соединениях как  $p$ -, так и  $n$ -типов. Простейшее приближение ближайших (в плоскости  $\text{CuO}_2$ ) соседей в схеме сильной связи приводит к идеальному (при половинном заполнении) нестингу контура Ферми, имеющего форму квадрата, ориентированного вдоль направлений  $\langle 110 \rangle$ . Реальные взаимодействия в слое  $\text{CuO}_2$ , однако, таковы, что помимо ближайших соседей принципиально важным оказывается учет взаимодействий в нескольких следующих координационных сферах. Так, в результате учета взаимодействия между атомами в первой, второй и третьей координационных сферах при вполне определенных соотношениях между соответствующими матричными элементами одноэлектронного гамильтониана [23] контур Ферми приобретает форму квадрата со скругленными углами, причем, стороны квадрата ориентированы вдоль направлений  $\langle 100 \rangle$ . Такая форма контура Ферми согласуется с экспериментальными данными, полученными с помощью методики ARPES для целого ряда ВТСП-купратов  $p$ -типа. Кроме того, она согласуется и с тем, что

вектор, определяющий антиферромагнитную структуру стехиометрических ВТСП-купратов, также направлен вдоль  $\langle 100 \rangle$ , а не вдоль  $\langle 110 \rangle$ , как это следует из приближения ближайших соседей. Физической причиной подобного разворота контура Ферми на угол  $\pi/4$  и соответствующей перестройки изолиний является, по-видимому, взаимодействие атомов слоя  $\text{CuO}_2$  с атомами слоев-резервуаров. Действительно, химические связи между ближайшими соседями в этих слоях ориентированы вдоль направлений  $\langle 110 \rangle$ , тогда как в слое  $\text{CuO}_2$  химические связи ориентированы вдоль  $\langle 100 \rangle$ , поэтому, создавая напряженное состояние в слоях  $\text{CuO}_2$ , резервуары фактически навязывают электронную структуру в зонах, связанных с атомами слоя  $\text{CuO}_2$ .

Изменение знака одной из эффективных масс приводит к тому, что при учете парных корреляций кулоновское межэлектронное взаимодействие обеспечивает эффективное притяжение электронов или дырок [24]. Поэтому становится, в принципе, возможным образование квазистационарных состояний пар носителей заряда одного знака. Подобные состояния могут рассматриваться как некие композитные квазичастицы, меняющие характер статистики в системе. В частности, если характерный пространственный масштаб корреляции в паре сравним со средним расстоянием между парами или меньше его, а время жизни квазистационарного состояния достаточно велико, то такие композитные квазичастицы в грубом приближении можно рассматривать как бозе-частицы, например, при оценке энергии основного состояния.

В настоящей работе с учетом реальной электронной структуры купратных ВТСП-соединений исследованы парные корреляции в электронной подсистеме, проявляющиеся как квазистационарные состояния дырочных пар, т. е. решена задача двух квазичастиц, аналогичная задаче Купера.

## 2. КОРРЕЛЯЦИОННАЯ ЭНЕРГИЯ

Поскольку характерный пространственный масштаб квазистационарных состояний во всяком случае заметно превышает межатомное расстояние, для описания корреляционных эффектов естественно воспользоваться методом огибающих функций. В этом случае закон дисперсии электрона  $\varepsilon(k)$  следует рассматривать как известную функцию  $2D$ -квазиимпульса  $k$ , а электрон в кристалле — как свободную квазичастицу со сложным законом дисперсии. Огибающей функцией такой квазичастицы

является плоская волна  $|k\alpha\rangle$ ; здесь спиновое квантовое число  $\alpha$  принимает значения  $\pm 1/2$  (далее обозначаемые как  $\uparrow$  и  $\downarrow$ ).

С помощью операторов рождения электронов  $\hat{c}_{k\alpha}^+$  в одночастичных состояниях  $k\alpha$  состояние системы  $N$  частиц может быть получено из вакуумного состояния  $|\text{vac}\rangle$ ,

$$|\rangle = \prod_{k\alpha} \hat{c}_{k\alpha}^+ |\text{vac}\rangle, \quad (2.1)$$

где произведение содержит ровно  $N$  операторов рождения электронов в данных различных одночастичных состояниях. В частности, (2.1) является волновой функцией основного состояния системы в отсутствие взаимодействия между электронами, если квазиимпульсы электронов в произведении (2.1) заполняют внутреннюю область  $2D$ -зоны Бриллюэна, ограниченную контуром Ферми.

В результате парного короткодействующего взаимодействия  $U(r)$  между электронами вклад парных корреляций в энергию системы является определяющим по сравнению с вкладом корреляций более высокого порядка [25, 26]. Для приближенного учета парных корреляций определим базис, построенный из огибающих функций электронных пар [27]. Предположим, что основным является состояние, образованное  $N/2$  синглетно связанными электронными парами. Предположим также, что уравнение Шредингера с потенциалом  $U(r)$  решено для любой пары электронов. В орбитальной части огибающей функции пары, которая в зависимости от спинового состояния пары либо симметрична (при синглетном спаривании), либо антисимметрична (при триплетном спаривании) относительно перестановки радиус-векторов электронов, очевидным образом может быть выделен множитель, соответствующий движению центра инерции пары:

$$\Psi(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{S}} \varphi_{Kk}(r) \exp(iKR) \equiv |Kk\rangle. \quad (2.2)$$

Здесь  $K = k_1 + k_2$  и  $R = (r_1 + r_2)/2$  — соответственно квазиимпульс и радиус-вектор центра инерции, а  $k = (k_1 - k_2)/2$  и  $r = r_1 - r_2$  — соответственно квазиимпульс и радиус-вектор относительного движения электронов, образующих пару. В рассматриваемом далее случае синглетного спаривания огибающая функция относительного движения  $\varphi_{Kk}(-r) = \varphi_{Kk}(r)$ . Вектор  $k$  можно рассматривать как начальный квазиимпульс частицы с приведенной эффективной массой, рассеивающейся на потенциале  $U(r)$ .

Представим (2.2) в виде

$$|Kk\rangle = \sum_q \left| \frac{K}{2} + q, \frac{K}{2} - q \right\rangle \tilde{\varphi}_K(k, q). \quad (2.3)$$

Здесь  $|k_1 k_2\rangle$  — произведение двух плоских волн с квазиимпульсами  $k_1 = K/2 + q$  и  $k_2 = K/2 - q$  без зависящих от спиновых переменных множителей,

$$\tilde{\varphi}_K(k, q) = \frac{1}{\sqrt{S}} \int d^2r \varphi_{Kk}(r) \exp(-iqr), \quad (2.4)$$

$S$  — нормировочная площадь в плоскости проводящего слоя. Фурье-образ  $\tilde{\varphi}_K(k, q)$  огибающей функции относительного движения электронов пары должен обладать определенной симметрией по отношению к перестановке начального ( $k$ ) и конечного ( $q$ ) квазиимпульсов:  $\tilde{\varphi}_K(k, q) = \tilde{\varphi}_K^*(q, k)$ . Функции  $\tilde{\varphi}_K(k, q)$  образуют полную ортонормированную систему.

Случай куперовских пар с оптимальным нулевым суммарным импульсом и большим импульсом относительного движения рассматриваться не будет, несмотря на то что такое спаривание нечувствительно к форме поверхности Ферми. Такое спаривание имеет место только при эффективном притяжении.

При наличии прямолинейных участков контура Ферми имеется альтернативная структура электронных или дырочных пар с большим суммарным импульсом (порядка расстояния между параллельными участками контура Ферми). При наличии эффективного притяжения образование такой пары, как и куперовской, соответствует минимуму энергии. Однако такое спаривание возможно и при отталкивательном взаимодействии в случае отрицательной легкой компоненты эффективной массы на большей части контура Ферми. Ниже показано, что именно такой случай реализуется в купратных высокотемпературных сверхпроводниках. Образование такой отдельной пары соответствует максимуму энергии. При концентрации же таких пар выше некоторой критической их возникновение становится энергетически выгодным за счет ослабления корреляций между такими парами бозонов по сравнению с корреляциями между неспаренными фермионами.

Определим оператор рождения электронной пары [27] с квантовыми числами  $K$  и  $k$ :

$$|Kk\rangle = \hat{A}_{Kk}^+ |\text{vac}\rangle, \quad \hat{A}_{Kk}^+ = \sum_q \tilde{\varphi}_K(k, q) \hat{c}_{K/2+q\uparrow}^+ \hat{c}_{K/2-q\downarrow}^+, \quad (2.5)$$

и обозначим  $\{F\}$  — область  $k$ -пространства, ограниченную контуром Ферми. Тогда, если векторы  $k_1 = K/2 + k$  и  $k_2 = K/2 - k$  принадлежат  $\{F\}$ , волновую функцию системы невзаимодействующих электронов можно представить в виде

$$|F\rangle = \prod_{k_1 k_2} \hat{c}_{k_1\uparrow}^+ \hat{c}_{k_2\downarrow}^+ |\text{vac}\rangle = \prod_{Kk} \hat{c}_{K/2+k\uparrow}^+ \hat{c}_{K/2-k\downarrow}^+ |\text{vac}\rangle. \quad (2.6)$$

В (2.6) входят векторы  $k_1$  и  $k_2$ , соответствующие всем различным точкам множества  $\{F\}$ . Векторы же  $K/2 \pm k$  могут быть получены, в принципе, разными способами. Так, вектор  $k_1 = K/2 + k$  может входить в состав пар с различными  $K$ . Поэтому в произведении по  $Kk$  следует оставлять лишь те сомножители, которые соответствуют всем различным  $k_1$  и  $k_2$ , (формально это условие в (2.6) выполняется автоматически). Таким образом, для каждого, вообще говоря, вектора  $K$  из соответствующей ему области определения вектора  $k$  должно быть исключено некоторое множество точек, для того чтобы обеспечить постоянство числа электронов в системе.

Волновую функцию основного состояния системы взаимодействующих электронов запишем в виде

$$|0\rangle = \prod_{Kk} \hat{A}_{Kk}^+ |\text{vac}\rangle \quad (2.7)$$

при условии, что  $K/2 \pm k \in \{F\}$ . Поскольку переменная суммирования  $q$  в определении оператора рождения пары ничем не ограничена, вклад в (2.7) дают одноэлектронные состояния, принадлежащие как внутренней, так и внешней по отношению к контуру Ферми областям.

В случае, когда рассеяние на потенциале  $U(r)$  отсутствует (что, в частности, соответствует одноэлектронному приближению), очевидно, что

$$\varphi_{Kk}(r) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{S}} \exp(ikr), \quad \tilde{\varphi}_K(k, q) \rightarrow \delta_{qk} \quad (2.8)$$

при любых  $K$ , так что основное состояние, как и должно быть, совпадает с (2.6).

Поскольку для любого  $k$  имеет место тождество  $\hat{c}_{k\alpha} \hat{c}_{k\alpha}^+ |\text{vac}\rangle \equiv |\text{vac}\rangle$ , оператор рождения электронной пары можно представить как

$$\hat{A}_{Kk}^+ = \left\{ \tilde{\varphi}_K(k, k) + \sum_{q \neq k} \tilde{\varphi}_K(k, q) \hat{c}_{K/2+q\uparrow}^+ \hat{c}_{K/2-q\downarrow}^+ \hat{c}_{K/2-k\downarrow} \hat{c}_{K/2+k\uparrow} \right\} \times \hat{c}_{K/2+k\uparrow}^+ \hat{c}_{K/2-k\downarrow}^+ \quad (2.9)$$

выделив слагаемое, соответствующее амплитуде рассеяния вперед. Основное состояние системы принимает вид

$$|0\rangle = \alpha \prod_{Kk} \left\{ 1 + \sum_{q \neq k} \alpha_K(k, q) \times \hat{c}_{K/2+q\uparrow}^+ \hat{c}_{K/2-q\downarrow}^+ \hat{c}_{K/2-k\downarrow} \hat{c}_{K/2+k\uparrow} \right\} |F\rangle, \quad (2.10)$$

где  $\alpha_K(k, q) = \tilde{\varphi}_K(k, q) / \tilde{\varphi}_K(k, k)$ ,  $\alpha \equiv \prod_{Kk} \tilde{\varphi}_K(k, k)$ . Действительно, последовательная перестановка пар операторов рождения и уничтожения электронов с одинаковыми квазиимпульсами и спинами не приводит к изменению знака волновой функции; кроме того, в сумме в (2.10)  $q \neq k$ , так что отличные от нуля свертки операторов отсутствуют. Поскольку  $K/2 \pm k \in \{F\}$  по определению, то, напротив,  $K/2 \pm q \notin \{F\}$ , так как в противном случае в произведении операторов рождения в (2.9) встретился бы член, тождественно равный нулю. Таким образом, операторы  $\hat{c}_{K/2+k\uparrow}$  и  $\hat{c}_{K/2-k\downarrow}$  рождают дырки внутри  $\{F\}$ , а операторы  $\hat{c}_{K/2+q\uparrow}^+$  и  $\hat{c}_{K/2-q\downarrow}^+$  — электроны вне  $\{F\}$ . Волновая функция основного состояния (2.10), как можно убедиться, нормирована на единицу:  $\langle 0|0\rangle = 1$ .

Последовательно выполняя перемножение (коммутирующих друг с другом) операторов, (2.10) можно представить в виде  $|0\rangle = \alpha \{1 + \hat{G}\} |F\rangle$ , где оператор  $\hat{G}$  может быть записан в виде суммы,  $\hat{G} = \hat{G}^{(1)} + \hat{G}^{(2)} + \dots$ , в которой первый член содержит всевозможные четверки операторов  $\hat{c}_{K/2+q\uparrow}^+ \hat{c}_{K/2-q\downarrow}^+ \hat{c}_{K/2-k\downarrow} \hat{c}_{K/2+k\uparrow}$ , второй — квадратичные комбинации таких четверок и так далее. Например,

$$\hat{G}^{(1)} = \sum_{Kkq} \alpha_K(k, q) \times \hat{c}_{K/2+q\uparrow}^+ \hat{c}_{K/2-q\downarrow}^+ \hat{c}_{K/2-k\downarrow} \hat{c}_{K/2+k\uparrow} \quad (2.11)$$

описывает состояния системы с парой дырок внутри  $\{F\}$  и парой электронов вне  $\{F\}$ , оператор  $\hat{G}^{(2)}$

соответствует состояниям с двумя парами дырок и двумя парами электронов и так далее.

Из энергии основного состояния (2.10) системы электронов с гамильтонианом  $\hat{H}$ ,  $E_0 = \langle 0|\hat{H}|0\rangle$ , может быть выделена энергия электронов в приближении Хартри—Фока,  $E_{HF} = \langle F|\hat{H}|F\rangle$ ; корреляционная энергия системы электронов,  $E_{corr} = E_0 - E_{HF}$ , записывается в виде

$$E_{corr} = \frac{\langle F|\hat{G}^+(\hat{H} - E_{HF})\hat{G}|F\rangle}{1 + \langle F|\hat{G}^+\hat{H}\hat{G}|F\rangle}. \quad (2.12)$$

При вычислении среднего в (2.12) ограничимся простейшим приближением  $\hat{G} \approx \hat{G}^{(1)}$ , линейным по параметрам  $\alpha_K(k, q)$ . Так как в приближении Хартри—Фока  $\hat{G} = 0$ , выражение  $\hat{G} = \hat{G}^{(1)} + \hat{G}^{(2)} + \dots$  можно рассматривать как разложение оператора  $\hat{G}$  по степеням параметров  $\alpha_K(k, q)$ , в некотором смысле аналогичных газовому параметру в кинетической теории газов. При этом  $\hat{G} \approx \hat{G}^{(1)}$  соответствует приближению самосогласованного поля для электронных и дырочных пар, тогда как слагаемое  $\hat{G}^{(2)}$  учитывает парное взаимодействие между отдельными парами.

Корреляционная поправка к кинетической энергии имеет вид

$$T_{corr} = |\alpha|^2 \sum_{Kkq} \alpha_K^*(k, q) \times \left\{ \left[ \varepsilon \left( \frac{K}{2} + q \right) + \varepsilon \left( \frac{K}{2} - q \right) \right] - \left[ \varepsilon \left( \frac{K}{2} + k \right) + \varepsilon \left( \frac{K}{2} - k \right) \right] \right\} \alpha_K(k, q). \quad (2.13)$$

Здесь первый член в фигурных скобках представляет кинетическую энергию электронной пары, возбужденной вне  $\{F\}$ , а второй — кинетическую энергию пары внутри  $\{F\}$ . Если, как обычно, энергию пары как элементарного возбуждения отсчитывать от удвоенного значения химического потенциала, то очевидно, что второй член в (2.13) соответствует кинетической энергии дырочной пары внутри  $\{F\}$ .

Вычисление корреляционной энергии, обусловленной электрон-электронным взаимодействием, приводит к билинейному по амплитудам рассеяния выражению вида  $U_{corr} = U^{(h-h)} + U^{(e-e)} + U^{(h-e)}$ , где

$$U^{(h-h)} = |\alpha|^2 \sum_{Kk\kappa} \alpha_K(k - \kappa, q) \tilde{U}(\kappa) \alpha_K^*(k, q) \quad (2.14)$$

— энергия взаимодействия дырок, образующих пары внутри  $\{F\}$ ,

$$U^{(e-e)} = |\alpha|^2 \sum_{Kkq\kappa} \alpha_K^*(k, q - \kappa) \tilde{U}(\kappa) \alpha_K(k, q) \quad (2.15)$$

— энергия взаимодействия электронов, образующих пары вне  $\{F\}$ . Здесь

$$\tilde{U}(q) = \frac{1}{S} \int d^2r U(r) \exp(-iqr) \quad (2.16)$$

— фурье-образ  $2D$ -потенциала электрон-электронного взаимодействия. Потенциал  $U(r)$  следует понимать как результат усреднения трехмерного экранированного кулоновского потенциала вдоль оси  $c$  структуры (усреднение с соответствующими огибающими функциями). Поскольку толщина проводящего слоя имеет атомные размеры, в качестве результата усреднения можно принять значение потенциала при  $z = 0$  (ось  $z$  параллельна  $c$ ). Таким образом, для оценок можно воспользоваться выражением вида

$$U(r) = \frac{e^2}{r} \exp\left(-\frac{r}{r_0}\right), \quad (2.17)$$

где  $r_0$  — радиус экранирования,  $r$  —  $2D$ -радиус-вектор. Учитывая, что толщина барьерных слоев, разделяющих проводящие слои, также имеет атомные размеры, особенности экранирования в двумерных системах можно не принимать во внимание. Поэтому для концентраций дырок, типичных для ВТСП-соединений, радиус экранирования можно оценить в приближении Томаса—Ферми:

$$r_0 = [4\pi e^2 g(\mu)]^{-1/2}. \quad (2.18)$$

Здесь  $g(\mu)$  — плотность состояний на уровне Ферми, отнесенная к единице объема.

Мы не выписываем здесь явного выражения для энергии взаимодействия электронов с дырками  $U^{(h-e)}$  в парах внутри и вне  $\{F\}$ , приводящей, в принципе, к спариванию электрона и дырки; не выписаны также и слагаемые в  $U_{corr}$ , линейные по амплитудам рассеяния пар и электронным числам заполнения в состоянии  $\{F\}$ , поскольку в принятом здесь простейшем приближении эти вклады в корреляционную энергию не могут повлиять на огибающие функции относительного движения электронных и дырочных пар.

Суммирование по  $\kappa$  (в отличие от сумм по  $q$  и  $k$ , которым соответствуют некоторые определенные области значений этих векторов для каждого квазиимпульса пары  $K$ ) проводится по всей зоне Бриллюэна. В (2.14) вектор  $k$  играет роль независимой

переменной, тогда как вектор  $q$  определяет состояние внутреннего движения дырочной пары. Наоборот, в (2.15) независимой переменной является  $q$ , а  $k$  следует рассматривать как квантовое число, относящееся к внутреннему состоянию электронной пары. В случае дырочного типа проводимости ВТСП-соединения удобно обычным образом перейти от электронного к дырочному представлению, в котором контур Ферми ограничивает область  $\{\bar{F}\}$ , дополняющую  $\{F\}$  до полной зоны Бриллюэна.

### 3. ЭКВИВАЛЕНТНЫЙ ГАМИЛЬТониАН ДЫРОЧНОЙ ПАРЫ

Чтобы записать эквивалентный гамильтониан дырочной пары с квазиимпульсом  $K$ , воспользуемся выражением (2.13), в котором второе слагаемое в фигурных скобках, взятое с противоположным знаком, имеет смысл кинетической энергии дырочной пары, и (2.14), которое описывает прямое экранированное кулоновское взаимодействие дырок, образующих пару. Положим  $k \rightarrow \hat{k} = -i\nabla$  и представим эквивалентный гамильтониан в виде  $\hat{H} = \hat{T} + \hat{U}$ , где оператор кинетической энергии пары

$$\hat{T} = \varepsilon \left( \frac{K}{2} - i\nabla \right) + \varepsilon \left( \frac{K}{2} + i\nabla \right). \quad (3.1)$$

Переходя в (2.14) к  $r$ -представлению, имеем

$$\begin{aligned} & \sum_{K,k} \tilde{\varphi}_{Kq}(k - \kappa, q) \tilde{U}(\kappa) \tilde{\varphi}_{Kq}^*(k, q) = \\ & = \frac{1}{S} \sum_k \iint d^2r d^2r' \varphi_{Kq}(r') U(r') \varphi_{Kq}^* \times \\ & \quad \times \exp[ik(r - r')]. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Суммирование по  $\kappa$  здесь, как уже отмечалось, проведено с учетом того, что эта переменная пробегает по всей зоне Бриллюэна. Напротив, суммирование по переменной  $k$  ограничено некоторой областью  $\{K\}$ , характерной для каждого квазиимпульса пары  $K$ , которому должны отвечать такие квазиимпульсы дырок  $k_1$  и  $k_2$ , которые, в соответствии с (2.6), находятся в области  $\{F\}$ , т. е. вне контура Ферми для дырок. Компактная область  $\{K\}$ , таким образом, представляет собой некоторое множество точек, принадлежащих незаполненной дырками части  $2D$ -зоны Бриллюэна. Размеры и форма областей  $\{K\}$  зависят от положения вектора  $K$  относительно контура Ферми.

Пусть  $\Xi_K$  — величина площади области  $\{K\}$  допустимых значений квазиволнового вектора относительного движения при данном  $K$ . Тогда, если эта



область достаточно велика, приближенно можно положить

$$\frac{1}{S} \sum_{k \in \{K\}} \exp [ik(r - r')] \approx \Xi_K a^2 \delta(r - r'), \quad (3.3)$$

где коэффициент при дельта-функции по порядку величины есть отношение  $\Xi_K$  к площади  $2D$ -зоны Бриллюэна ( $a$  — межатомное расстояние в плоскости проводящего слоя). Таким образом, оператор потенциальной энергии дырок, образующих пару, приближенно может быть записан как

$$\hat{U}_K \approx \Xi_K a^2 U(r). \quad (3.4)$$

Множитель  $\Xi_K a^2 < 1$  может рассматриваться как некий фактор ослабления корреляций [28], обусловленный принципом Паули.

Если область  $\{K\}$  мала, то сумма в (3.3) содержит небольшое число осциллирующих слагаемых и оператор  $\hat{U}$  становится существенно нелокальным. Фурье-компоненты, входящие в ядро этого оператора, в близких точках  $r$ -пространства могут иметь разные знаки, и по этой причине при рассмотрении взаимодействия между дырками, приводящего к возникновению квазистационарных состояний дырочных пар, можно ограничиться лишь парами с квазиимпульсами  $K$ , для которых область допустимых значений вектора  $k$  достаточно велика (отметим, что такие области располагаются вблизи почти прямолинейных участков контура Ферми). Эквивалентный гамильтониан дырочной пары с квазиимпульсами  $K$  в этом случае принимает вид

$$\hat{H}_K = \varepsilon \left( \frac{K}{2} - i\nabla \right) + \varepsilon \left( \frac{K}{2} + i\nabla \right) + \Xi_K a^2 U(r). \quad (3.5)$$

Вероятности заполнения дырочных состояний в области  $\{F\}$  определяются амплитудами рассеяния  $\varphi_K(k, q)$ . Здесь, как уже отмечалось выше,  $k \in \{F\}$ , а  $q \in \{\bar{F}\}$ . В общем случае амплитуды рассеяния имеют наибольшую величину, когда  $k$  и  $q$  находятся в непосредственной окрестности контура Ферми. Полагая, что характерная ширина  $\Delta k$  полосы наиболее вероятного распределения дырок, прилегающей к контуру Ферми в области  $\{F\}$ , определяется потенциалом (2.17) при значении аргумента, соответствующем среднему расстоянию между дырками  $\bar{r} = p^{-1/2}$ , где  $p$  — концентрация  $2D$ -дырок, нетрудно убедиться в том, что

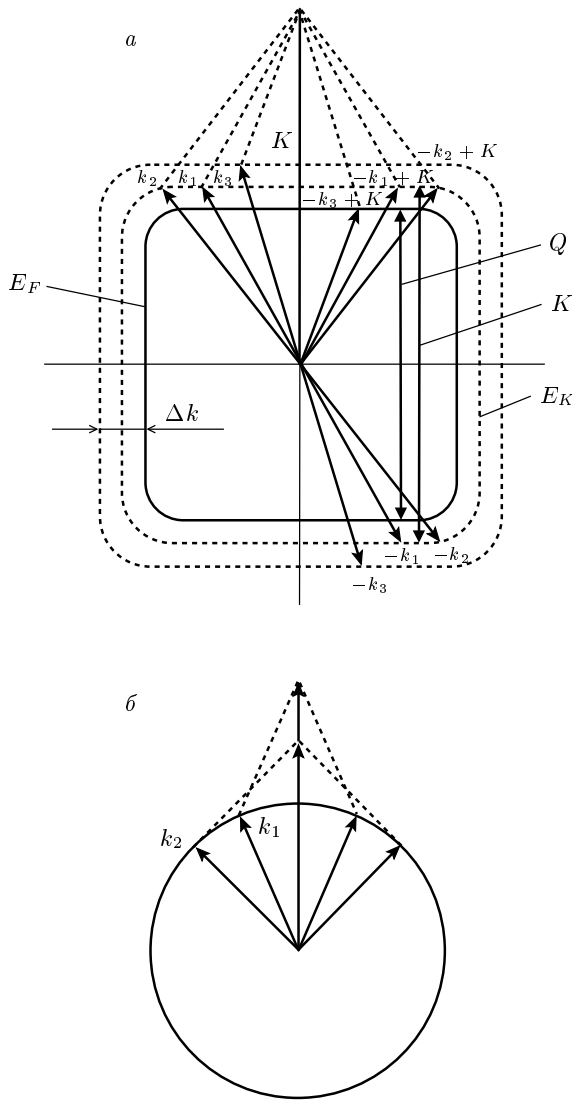
$$\Delta k \approx \frac{e^2}{\hbar |v_t(\mu)| \bar{r}} \exp \left( -\frac{\bar{r}}{r_0} \right), \quad (3.6)$$

где  $v_t(\mu)$  — перпендикулярная контуру Ферми компонента скорости дырки. Используя для порядковых оценок изотропную аппроксимацию закона дисперсии, можно получить  $v_t(\mu) \sim \hbar k_F / m$ , где  $k_F = (2\pi p)^{1/2}$  — величина волнового вектора Ферми,  $m$  — некоторая характерная эффективная масса. Для плотности состояний в качестве оценки можно воспользоваться выражением  $g(\mu) \approx m / \pi \hbar^2 d$ , где  $d$  — расстояние между соседними проводящими слоями. Обозначая также  $a^* = \hbar^2 / m e^2$ , имеем

$$\Delta k \sim \frac{1}{\sqrt{2\pi} a^*} \exp \left( -\frac{2}{\sqrt{a^* d p}} \right). \quad (3.7)$$

Если принять, что все существенные процессы рассеяния, приводящие к возникновению квазистационарных состояний, имеют место в полосе шириной  $\Delta k$ , прилегающей к контуру Ферми, то в качестве области определения квазиимпульса относительного движения можно принять пересечение этой полосы и определенной выше области  $\{K\}$ . Рисунок 1 иллюстрирует принцип определения подобной области допустимых значений для  $k_1$  и  $k_2$ . Далее определенная таким образом область будет по-прежнему обозначаться  $\{K\}$ , а ее площадь —  $\Xi_K$ , поскольку для большинства векторов  $K/2$  можно считать, что приближенно ширина области  $\{K\}$  совпадает с  $\Delta k$ .

Область  $\{K\}$  имеет форму узкой полосы (рис. 1а), если  $K/2$  находится вблизи почти прямолинейного участка контура Ферми, причем длина этой полосы  $l_K$  зависит от ориентации вектора  $K$ , т. е.  $l_K = l_K(\vartheta)$ , где  $\vartheta$  — полярный угол вектора  $K$ . Нетрудно убедиться в том, что в ВТСП-купратах  $p$ -типа, в которых контур Ферми имеет форму квадрата со скругленными углами [6–10],  $l_K$  достигает максимальной величины, когда направление  $K$  совпадает с направлениями координатных осей  $k_x$  и  $k_y$ , параллельных длинным почти прямолинейным участкам контура Ферми. С ростом  $\vartheta$  от 0 до  $\pi/4$  величина  $l_K$  уменьшается, достигая минимального значения при  $\vartheta = \pi/4$ . Таким образом,  $l_K(\vartheta)$  является периодической функцией с периодом  $\pi/2$ . В окрестности скругленных углов квадрата площадь области  $\{K\}$  невелика, и эта область может иметь достаточно сложную форму. В этом случае малым, соответственно, является и эффективное взаимодействие между дырками, образующими пару, поэтому возникновение квазистационарных состояний обязано исключительно тому обстоятельству, что изолинии в окрестности контура Ферми обладают длинными почти прямолинейными участками. Площадь области  $\{K\}$  при этом может быть



**Рис. 1.** Определение областей допустимых значений квазиимпульсов  $k_i$  дырок, образующих пару с квазиимпульсом  $K$  для изоэнергетических линий, имеющих форму квадратов со скругленными углами (а) и для окружностей (б)

оценена как  $\Xi_K \approx l_K \Delta k$ ; вместе с  $l_K(\vartheta)$  она зависит от полярного угла вектора  $K$ .

Явный вид функции  $l_K(\vartheta)$  определяется структурой изоэнергетических линий в окрестности контура Ферми. В случае, когда изоэнергетические линии представляют собой квадраты со скругленными углами, можно, пренебрегая скруглениями краев, т. е. считая изоэнергетические линии просто квадратами, записать  $l_K(\vartheta)$  в явном виде как  $l_K(\vartheta) = 2k_F(1 - \text{tg } \vartheta)$ . Здесь  $k_F$  — половина стороны квадрата, образующего контур Ферми,  $0 \leq \vartheta \leq \pi/4$ .

Учитывая, что  $\Delta k \ll k_F$ , при  $0 \leq \vartheta \leq \pi/4$  приближенно можно написать  $l_K(\vartheta) \approx K_x - K_y$ ; при  $\pi/4 \leq \vartheta \leq \pi/2$ , наоборот, имеем  $l_K(\vartheta) \approx K_y - K_x$ . Таким образом,  $l_K(\vartheta)$  определена при  $0 \leq \vartheta \leq \pi/2$ , и значения этой функции для произвольного полярного угла могут быть получены из условия периодичности:  $l_K(\vartheta + \pi/2) = l_K(\vartheta)$ .

На рисунке 1а видно, что величина  $K$  должна быть больше  $Q$ . Тогда, во-первых, все пары частиц с волновыми векторами  $k_i$  и  $-k_i + K$ , соответствующие прямолинейному участку с энергией  $\varepsilon_K$ , имеют один и тот же суммарный импульс  $K$ . Кроме того, каждому состоянию в слое  $\Delta k$  с энергией больше  $\varepsilon_K$  (например с волновым вектором  $k_3$ ) найдется напарник с  $\varepsilon_F < \varepsilon < \varepsilon_K$  (с  $k_4 = -k_3 + K$ ) для обеспечения такого же суммарного волнового вектора  $K$ . Таким образом, данному  $K$  соответствует макроскопическое число состояний с площадью  $\Xi$ . При заданном легировании существует оптимальное значение величины четырех векторов  $K$ , перпендикулярных каждой стороне контура Ферми. Для вектора же  $K$ , равного  $Q$ , соответствующая площадь равна нулю.

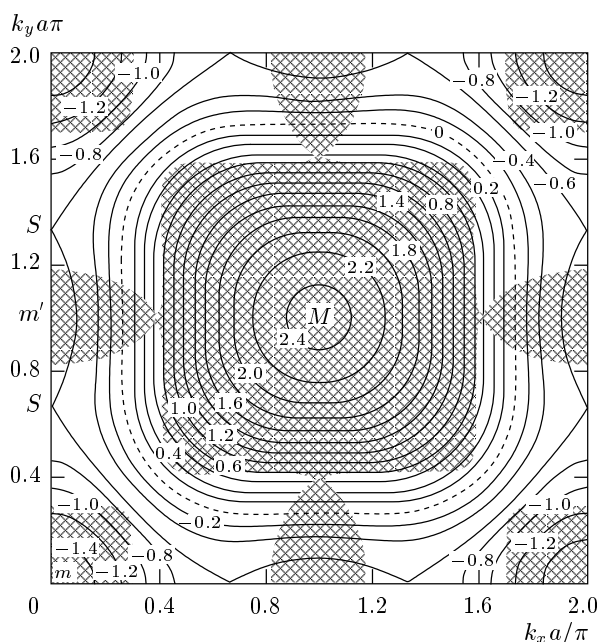
Таким образом, при наличии прямолинейных участков контура Ферми образуются как бы сфокусированные в импульсном пространстве пары дырок (сфокусированные пары). Такая фокусировка соответствует макроскопическому заполнению одного состояния с заданным  $K$  при одной и той же энергии. Подобная фокусировка невозможна, например, для формы контура Ферми в виде окружности (см. рис. 1б).

Образованию пары электронов (внутри контура Ферми для дырок) соответствует другое значение  $K$  и другие значения для энергии связи из-за отсутствия симметрии контуров постоянного значения энергии и эффективных масс относительно контура Ферми. Это, по-видимому, приведет к отсутствию симметрии состояний ниже и выше уровня Ферми в сверхпроводящей фазе, что должно проявиться в несимметрии,  $V \rightarrow -V$ , туннельных характеристик, особенностях андреевского отражения.

На рисунке 2 изображена  $2D$ -зона Бриллюэна кристалла тетрагональной симметрии и показано расположение изолиний, рассчитанных в приближении сильной связи с учетом взаимодействия в первой, второй и третьей координационных сферах. Безразмерные параметры закона дисперсии

$$E(k_x, k_y) = 2 - 2t_1(\cos k_x a + \cos k_y a) - 4t_2 \cos k_x a \cos k_y a - 2t_3(\cos 2k_x a + \cos 2k_y a) \quad (3.8)$$

подобраны таким образом [23], чтобы форма изо-

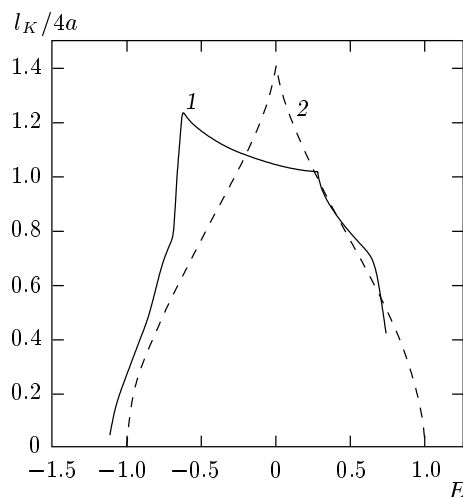


**Рис. 2.** Распределение изоэнергетических линий и особых точек в  $2D$ -зоне Бриллюэна кристалла тетрагональной симметрии. Светлые области соответствуют разным знакам главных значений тензора обратных эффективных масс закона дисперсии (3.8)

линий отражала наблюдаемую форму контура Ферми ВТСП-купратов [6–10]:  $t_1 = 0.50$ ,  $t_2 = -0.15$ ,  $t_3 = 0.10$ . Зона Бриллюэна центрирована на точку  $(\pi/a, \pi/a)$  обратного пространства. Точка  $M$  в центре квадрата является абсолютным максимумом электронной зоны (минимумом — дырочной), а  $m$  и  $m'$  — абсолютным и побочным минимумами (максимумами) электронной (дырочной) зон. Седловые точки  $S$  соединяются изолинией (сепаратрисой), разделяющей семейства замкнутых изоэнергетических линий.

В окрестности изолинии половинного заполнения имеется достаточно обширная область  $\{S\}$ , охватывающая седловые точки, в которой главные значения тензора обратных эффективных масс имеют разные знаки (светлая область на рис. 2). Именно этой области должны принадлежать векторы  $K/2$ , которым, в принципе, могут соответствовать относительно долгоживущие квазистационарные состояния.

Ширина полосы наиболее вероятного распределения дырок в соответствии с (3.7) возрастает с увеличением концентрации дырок. Таким образом, с ростом  $p$  и при условии нестинга изолиний число



**Рис. 3.** Зависимость характерной длины полосы допустимых значений квазиимпульсов дырок, образующих пару, от энергии дырки в области зоны Бриллюэна, соответствующей разным знакам главных значений тензора обратных эффективных масс. Сплошная линия соответствует  $2D$ -закону дисперсии (3.8). Для сравнения представлена аналогичная зависимость, соответствующая простейшему закону дисперсии с  $t_n = 0$  при  $n \geq 2$  (приближение ближайших соседей, штриховая линия)

дырочных пар, способных образовать квазистационарные состояния, может увеличиваться. Увеличение концентрации дырок приводит, вообще говоря, к немонотонной зависимости  $l_K(p)$ : если изолинии имеют относительно длинные почти прямолинейные участки в достаточно большой части зоны Бриллюэна, то вначале при увеличении  $p$  функция  $l_K(p)$  может медленно возрастать или оставаться практически постоянной. Дальнейший рост концентрации дырок выводит уровень Ферми на сильно искривленные изолинии, приводя к резкому уменьшению областей  $\{K\}$  или даже к их выходу за пределы области  $\{S\}$ , так что  $l_K(p)$  становится достаточно быстро убывающей функцией, как это проиллюстрировано на рис. 3 для закона дисперсии (3.8). На этом рисунке представлена зависимость средней длины полосы  $\{K\}$ ,  $\langle l_K \rangle$ , от энергии дырки в области  $\{S\}$ , где компоненты эффективной массы имеют разные знаки. Для сравнения приведены данные для закона дисперсии, полученного в приближении сильной связи с учетом взаимодействия только ближайших соседей (штриховая линия). Видно, что закону дисперсии (3.8) соответствует нестинг изолиний в области  $\{S\}$  в широком диапазоне энергий. Таким образом, при изменении уровня допирования, когда уровень

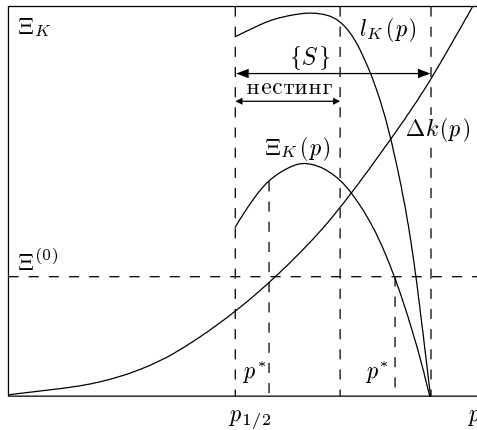


Рис. 4. Площадь области допустимых значений квазиимпульсов  $\Xi_K(p)$ , величин  $l_K$  и  $\Delta k$  дырок, образующих пару, как функция концентрации дырок (схематически)

Ферми последовательно переходит с одной изолинии на другую, условия нестинга для контура Ферми сохраняются в достаточно широком интервале концентраций. На рисунке 3 явно видна асимметрия закона дисперсии (3.8) по отношению к типу допирования: условия нестинга соблюдаются лишь в случае купратов  $p$ -типа. Напротив, простейший закон дисперсии, учитывающий только ближайших соседей, симметричен относительно типа допирования, однако, обнаруживая идеальный нестинг при половинном заполнении, приводит к резкому уменьшению величины  $\langle l_K \rangle$  по мере удаления от середины зоны.

Площадь  $\Xi_K(p)$  как функция концентрации дырок имеет, таким образом, вид кривой с максимумом (рис. 4).

В приближении эффективной массы следует ограничиться вторыми производными в разложении эквивалентного гамильтониана (3.5) по степеням  $\nabla$ ; коэффициенты разложения оператора кинетической энергии образуют тензор обратных приведенных эффективных масс для точки  $K/2$ . Преобразуя этот тензор к диагональному виду (т.е. соответствующим образом выбирая направления координатных осей  $k_1$  и  $k_2$ ), имеем

$$\varepsilon\left(\frac{K}{2} - i\nabla\right) + \varepsilon\left(\frac{K}{2} + i\nabla\right) \approx 2\varepsilon\left(\frac{K}{2}\right) - \frac{\hbar^2}{2m_1^{(K)}} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2^{(K)}} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2}, \quad (3.9)$$

где  $m_\alpha^{(K)}$  — главные значения для эффективных масс, относящихся к точке  $K/2$ .

При условии, что  $\Delta k \ll K/2 \sim k_F$ , можно считать, что  $\varepsilon(K/2)$  приближенно совпадает с уровнем Ферми:  $\varepsilon(K/2) \approx \mu$ . Тогда, если условиться, что энергия дырочной пары отсчитывается от значения  $2\mu$ , эквивалентный гамильтониан (3.5) можно записать как

$$\hat{H}_K = -\frac{\hbar^2}{2m_1^{(K)}} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2^{(K)}} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \Xi_K a^2 U(x_1, x_2). \quad (3.10)$$

Как уже отмечалось, для квазиимпульсов  $K$ , при которых возможно возникновение относительно долгоживущих квазистационарных состояний дырочных пар, приведенные эффективные массы  $m_1^{(K)}$  и  $m_2^{(K)}$  имеют разные знаки.

#### 4. КВАЗИСТАЦИОНАРНЫЕ СОСТОЯНИЯ ДЫРОЧНЫХ ПАР

В приближении эффективной массы огибающие функции свободного движения дырочной пары могут быть выбраны в виде плоских волн, причем энергия такой пары выражается через компоненты квазиволнового  $2D$ -вектора  $q_1$  как

$$E(K, q) = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{l=1}^2 \nu_K^{(l)} q_l^2; \quad (4.1)$$

здесь  $\nu_K^{(l)}/m = 1/m_l^{(K)}$  — главные значения тензора обратных эффективных масс (безразмерные параметры  $\nu_K^{(l)}$  в области  $\{S\}$  имеют разные знаки),  $m$  — параметр размерности массы,  $l = 1, 2$ . Соответственно, величина энергии, отсчитываемая от удвоенного значения химического потенциала  $2\mu$ , может иметь любой знак. Таким образом, спектр оператора (3.10) в области  $\{S\}$  не ограничен.

Поскольку реальное взаимодействие между дырками есть экранированное кулоновское взаимодействие (2.17), приближенно можно считать, что дырки взаимодействуют друг с другом посредством короткодействующего сингулярного потенциала

$$U(r) = 2\pi e^2 r_0 \delta(r). \quad (4.2)$$

Относительное движение дырочной пары инфинитно, как и должно быть в случае непрерывного спектра. Это не исключает возможности образования относительно долгоживущих состояний, принадлежащих сплошному спектру и проявляющихся в виде достаточно ярко выраженных максимумов плотности состояний. Возникающее таким образом квазистационарное состояние характеризуется энергией

$E_0$ , соответствующей максимуму плотности состояний, и конечным временем жизни  $\tau$ . Таким образом, можно считать [29], что это состояние соответствует комплексной энергии  $\tilde{E}_0 = E_0 - i\Gamma$  с затуханием  $\Gamma = \hbar/\tau$  и проявляется как полюс амплитуды рассеяния при энергии  $E = \tilde{E}_0$ .

Волновая функция, соответствующая рассеянию, имеет вид

$$\varphi_{Kq}(r) = \exp(iqr) + \chi_{Kq}(r), \quad (4.3)$$

причем преобразование Фурье рассеянной волны в случае рассеяния на  $\delta$ -потенциале записывается как

$$\tilde{\chi}_{Kq}(k) = -\frac{w_K}{1 + w_K B_K(\omega)} \frac{1}{k^2 - \omega - i0 \text{sign} \omega}. \quad (4.4)$$

Здесь

$$w_K = \frac{4\pi r_0}{a^*} \Xi_K a^2, \quad k^2 = \sum_{l=1}^2 \nu_K^{(l)} k_l^2,$$

$$\omega = \sum_{l=1}^2 \nu_K^{(l)} q_l^2,$$

знаковая функция  $\text{sign} \omega$  обеспечивает необходимое условие, чтобы  $\tilde{\chi}_{Kq}(k)$  соответствовала расходящейся (или затухающей) волне,

$$B_K(\omega) = \int \frac{1}{k^2 - \omega - i0 \text{sign} \omega} \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \equiv \equiv B_{K1}(\omega) + iB_{K2}(\omega). \quad (4.5)$$

Вещественная и мнимая части функции (4.5) записываются как

$$B_{K1}(\omega) = P \int \frac{1}{k^2 - \omega} \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \quad (4.6)$$

( $P$  — символ главного значения интеграла),

$$B_{K2}(\omega) = \pi \int \delta(\omega - k^2) \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \text{sign} \omega. \quad (4.7)$$

Знаменатель амплитуды рассеяния, вообще говоря, в нуль не обращается, так как является суммой двух независимых функций. Исключением может явиться случай, когда одна из функций, а именно  $B_{K2}(\omega)$ , обращается в нуль тождественно. Тогда полюсы амплитуды рассеяния, определяемые из уравнения

$$1 + w_K B_{K1}(\omega) = 0, \quad (4.8)$$

соответствуют связанным состояниям. Такая ситуация при  $w_K > 0$  для дырочной пары может возникнуть в окрестности максимума  $M$  дырочной зоны.

Если уравнение (4.8) имеет решение при некотором (комплексном) значении  $\omega = \omega_K^{(0)}$ , и при этом  $B_{K2}(\omega_K^{(0)}) \neq 0$ , то при условии, что величина  $B_{K2}(\omega_K^{(0)})$  достаточно мала и положительна, возникает квазистационарное состояние дырочной пары. В окрестности точки  $\omega_K^{(0)}$  функцию  $B_{K1}(\omega)$  можно представить как (штрихом обозначено дифференцирование по  $\omega$ )

$$B_{K1}(\omega) \approx B_{K1}(\omega_K^{(0)}) + B'_{K1}(\omega_K^{(0)})(\omega - \omega_K^{(0)}). \quad (4.9)$$

Амплитуда рассеяния записывается в виде

$$f_K(E) = -\frac{w_K}{1 + w_K B_K(\omega)} \approx \approx -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{B'_{K1}(\omega_K^{(0)})} \frac{1}{E - E_K^{(0)} + i\Gamma_K/2}. \quad (4.10)$$

Здесь  $E_K^{(0)} = \hbar^2 \omega_K^{(0)2}/2m$  — энергия квазистационарного состояния,  $E = \hbar^2 \omega/2m$ , а затухание имеет вид

$$\Gamma_K = \frac{\hbar^2}{m} \frac{B_{K2}(\omega_K^{(0)})}{B'_{K1}(\omega_K^{(0)})}. \quad (4.11)$$

При достаточно больших  $\omega$  (4.6) является монотонно возрастающей функцией; при этом, в соответствии с определением (4.7),  $B_{K2}(\omega) > 0$ , что и обеспечивает решение уравнения (4.8), соответствующее положительному значению затухания квазистационарного состояния.

Для выяснения характера возможного решения уравнения (4.8) рассмотрим область  $\{K\}$  вблизи почти прямолинейного участка контура Ферми и предположим для простоты, что точка  $K/2$  близка к одной из симметричных точек зоны Бриллюэна, например, принадлежащей оси симметрии. Тогда направление одной из главных осей тензора обратных эффективных масс (ось  $k_1$ ) практически параллельно прямолинейному участку контура Ферми; соответственно, направление второй главной оси ( $k_2$ ) почти перпендикулярно контуру Ферми. Поскольку направления прямолинейного участка изоэнергетической линии и оси  $k_1$  почти совпадают, соответствующая эффективная масса  $m_1^{(K)} = m/\nu_K^{(1)}$  имеет большую абсолютную величину; на рис. 2 можно видеть, что она положительна. Напротив, эффективная масса  $m_2^{(K)} = m/\nu_K^{(2)}$  вдоль оси  $k_2$  отрицательна, и  $\nu_K^{(2)} < 0$ . Для оценок можно положить  $\nu_K^{(2)} = -1$ ,  $\nu_K^{(1)} \equiv \nu \ll 1$ .

Из определения (4.7) следует, что при любых  $\omega > 0$  и  $\nu = 0$  имеет место равенство  $B_{K2}(\omega) = 0$ , и чтобы получить конечную величину затухания,

необходимо выйти за пределы приближения эффективной массы. При  $\nu \ll 1$  имеется, следовательно, определенная область  $\omega$ , в которой затухание квазистационарного состояния мало. Непосредственно из определения (4.7) следует, что этой области соответствуют  $\omega \geq \nu l_K^2/4$ , где  $l_K$  — определенный ранее характерный размер области  $\{K\}$  вдоль контура Ферми. Видно также, что при  $\omega < \nu l_K^2/4$  с логарифмической точностью  $B_{K2} \sim \nu^{-1/2}$ , так что при сделанном предположении  $\nu \ll 1$  затухание (4.11) при  $\omega < \nu l_K^2/4$  определено велико.

Функция  $B_{K1}(\omega)$  не может быть представлена в виде комбинации элементарных функций, однако при достаточно больших значениях энергии, а именно при  $\omega - \nu l_K^2/4 \gg (\Delta k)^2/4$ , эту функцию можно приближенно записать как

$$B_{K1}(\omega) \approx -\frac{\Xi_K}{(2\pi)^2} \frac{1}{\omega}. \quad (4.12)$$

Можно убедиться в том, что это выражение качественно отражает поведение функции (4.6) при всех  $\omega \geq \nu l_K^2/4$ , т.е. как раз в той области энергий, которая соответствует достаточно малым значениям затухания квазистационарного состояния. Энергию последнего, зависящую от квазиимпульса пары  $K$ , находим в виде

$$E_K^{(0)} = \frac{e^2 r_0}{2\pi} (\Xi_K a)^2, \quad (4.13)$$

или, с учетом (3.7),

$$E_K^{(0)} = \frac{e^2}{2a^*} \frac{(l_K a)^2}{4\pi} \left(\frac{d}{a^*}\right)^{1/2} \times \exp\left(-\frac{4}{\sqrt{pa^*d}}\right). \quad (4.14)$$

Таким образом, энергия квазистационарного состояния выражается через параметры электронного спектра ВТСП-соединения и его уровень допирования. Если учесть, что в ВТСП-купратах  $p$ -типа обширной окрестности седловой точки соответствует относительно слабая дисперсия дырочной зоны [11], т.е. достаточно большая эффективная масса  $m$ , для грубой оценки можно принять, что эффективный борровский радиус  $a^*$  по порядку величины совпадает с межатомным расстоянием:  $a^* \sim a \sim d$ . В этом случае при концентрации дырок, соответствующей половинному заполнению зоны,  $pa^2 = 1$ , экспоненциальный множитель в (4.14) составляет около  $2 \cdot 10^{-2}$ , а эффективный ридберг,  $e^2/2a^*$ , — около 2.5–3.0 эВ. Следовательно, величина энергии квазистационарного состояния определяется, главным образом, па-

раметром  $l_K$ , который для длинных почти прямолинейных участков контура Ферми может достигать величины порядка  $\pi/a$ . В таких случаях энергия квазистационарного состояния может составлять от 10 до 100 мэВ. Из (4.14) следует, что основную роль в его образовании играют именно обусловленные нестингом наиболее длинные области  $\{K\}$  вблизи контура Ферми: уменьшение  $l_K$  приводит к резкому снижению энергии этого состояния.

### 5. ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ ДЫРЧНОЙ ПАРЫ

Функция относительного движения пары (4.4), соответствующая расходящейся волне, в  $r$ -представлении имеет вид

$$\chi_{Kq}^{(+)}(r) = \frac{1}{4\sqrt{\nu}} \times \begin{cases} H_0^{(2)}\left(q\sqrt{\frac{x^2}{\nu}-y^2}\right), & 0 < |y| < \frac{|x|}{\sqrt{\nu}}, \\ \frac{2i}{\pi} K_0\left(q\sqrt{y^2-\frac{x^2}{\nu}}\right), & \frac{|x|}{\sqrt{\nu}} < |y| < \infty. \end{cases} \quad (5.1)$$

Здесь  $H_0^{(2)}(z)$  — функция Ганкеля,  $K_0(z)$  — функция Макдональда. Таким образом, плоскость  $x, y$  разбивается на четыре сектора, два из которых,  $0 < |y| < |x|/\sqrt{\nu}$ , соответствуют волнам, расходящимся из начала координат; в двух других секторах,  $|x|/\sqrt{\nu} < |y| < \infty$ , волновая функция (5.1) затухает (рис. 5). Линии  $y = \pm x/\sqrt{\nu}$ , разделяющие эти сектора, являются каустиками, в окрестностях которых  $\chi_{Kq}^{(+)}(r)$  имеет логарифмическую особенность.

Функция  $\chi_{Kq}^{(+)}(r)$  и линейно независимая функция  $\chi_{Kq}^{(-)}(r)$ , соответствующая сходящейся к центру волне и также выражающаяся через функции Бесселя, являются собственными функциями эквивалентного гамильтониана (3.10) с сингулярным потенциалом (4.2), относящимися к комплексным собственным значениям. Таким образом, для исследования пространственного распределения дырочной плотности в произвольный момент времени необходимо решать нестационарное уравнение с гамильтонианом (3.10). Такое исчерпывающее решение, однако, невозможно получить методом разделения временных и пространственных переменных [29]. Поэтому, чтобы качественно исследовать характер волновой функции в течение времени жизни квазистационарного состояния дырочной пары, можно воспользоваться адиабатическим приближением [30], разделив «быстрое» движение вдоль  $y$  и «медленное» —

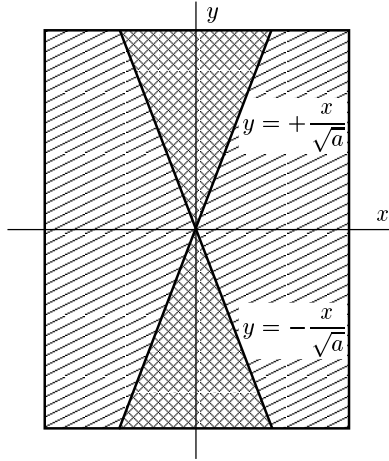


Рис. 5. Характер волновой функции относительно движения пары (5.1), соответствующей расходящейся (светлая область) и затухающей (темная область) волне. Прямые, разделяющие эти области, являются каустиками

вдоль  $x$ . Действительно, при  $t \leq \tau$  квазистационарное состояние можно рассматривать как практически стационарное состояние с энергией  $E_K^{(0)}$ ; кроме того, из-за предельно сильной анизотропии эффективных масс, когда  $m_1 = m/\nu$ ,  $m_2 = -m$  и  $\nu \ll 1$ , подобное приближенное разделение движений вдоль  $x$  и  $y$  становится возможным.

Представим огибающую функцию, являющуюся решением уравнения Шредингера с гамильтонианом (3.10), в виде  $\psi(x, y) = \varphi(x, y)\Phi(x)$ , где зависящая от  $x$  как от параметра функция  $\varphi(x, y)$  является одним из решений уравнения

$$\left[ \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \Xi_K a^2 U(x, y) \right] \varphi_n(x, y) = V_n(x) \varphi_n(x, y), \quad (5.2)$$

в котором  $n$  — число, нумерующее собственные значения  $V_n(x)$  оператора в левой части (5.2). Очевидно, что по крайней мере одно из этих собственных значений, которое мы обозначим  $V_0(x)$ , неотрицательно. Ограничимся именно этим случаем и запишем уравнение для  $\Phi(x) = \Phi_0(x)$ :

$$\left[ -\nu \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0^*(x) \right] \Phi_0(x) = E \Phi_0(x), \quad (5.3)$$

где эффективный потенциал для «медленного» движения

$$V_0^*(x) = V_0(x) + \nu \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{\partial \varphi_0(x, y)}{\partial x} \right)^2 dy. \quad (5.4)$$

Поскольку  $V_0^*(x) > 0$ , функция  $\Phi_0(x)$  соответствует сплошному спектру, т. е. может быть представлена в виде линейной комбинации сходящейся и расходящейся волн. Напротив, при любом  $U(x, y) > 0$  и любом  $x$  функция одномерного движения  $\varphi_0(x, y)$  соответствует стационарному состоянию дискретного спектра и может быть нормирована условием

$$\int_{-\infty}^{\infty} [\varphi_0(x, y)]^2 dy = 1. \quad (5.5)$$

Это означает, что в некоторой области оси  $x$  и при определенном значении энергии огибающая функция  $\Phi_0(x)$  может резко возрастать, что и соответствует квазистационарному состоянию [29].

Можно установить характерные особенности функции  $\varphi_0(x, y)$ , если представить взаимодействие в (5.2) в виде сепарабельного потенциала

$$U(x, y) = U_0 r_0^2 f(x) f(y), \quad (5.6)$$

где функция  $f(x)$  предполагается ограниченной и нормированной на единицу. Характерным пространственным масштабом для этой функции является радиус экранирования  $r_0$ , параметр  $U_0 = (2\pi e^2/r_0)\Xi_K a^2$ . Полагая для простоты, что  $f(y) = (2r_0)^{-1}$  при  $|y| < r_0$  и  $f(y) = 0$  при  $|y| > r_0$ , нетрудно найти  $\varphi_0(x, y)$  при  $|y| > r_0$ , т. е. вне радиуса действия потенциала (5.6):

$$\varphi_0(x, y) = [\gamma(x)]^{1/2} \exp(-\gamma(x)|y|). \quad (5.7)$$

Здесь  $\gamma(x) = \sqrt{2mV_0^*(x)}/\hbar$ . Предположим, что потенциал  $U(x, y)$  приводит к единственному дискретному уровню, как и (4.2). Тогда положение этого уровня приближенно может быть оценено как [31]

$$\gamma(x) \approx \frac{2mr_0^2}{\hbar^2} U_0 f(x). \quad (5.8)$$

Оценка (5.8) имеет место, если  $2mr_0^2 U_0/\hbar^2 < 1$ . Это неравенство можно переписать в таком виде, чтобы выполнимость его была очевидной:

$$\frac{2\pi e^2}{r_0} \Xi_K a^2 < \frac{\hbar^2}{2mr_0^2}. \quad (5.9)$$

Действительно,  $2\pi e^2/r_0$  и  $\hbar^2/2mr_0^2$  имеют один и тот же порядок величины, неравенство же  $\Xi_K a^2 \ll 1$  имеет место по определению.

Функция (5.7) является нормируемой, так что ее точный вид при  $|y| < r_0$  для дальнейших оценок несуществен. Если учесть, что  $f(x)$  быстро (от  $(1/2)r_0$  до нуля) меняется на масштабе  $r_0$  (именно

этим характерным масштабом предэкспоненциального множителя в (5.7) характеризуется локализация квазистационарного состояния по оси  $x$ , то из (5.7) следует, что при  $|x| \leq r_0$  характерным масштабом по оси  $y$  для функции  $\varphi_0(x, y)$  является величина  $\gamma^{-1}(0) = \hbar^2/2mr_0U_0 \sim r_0/\Xi_K a^2 \gg r_0$ . Можно считать, что в течение времени жизни квазистационарного состояния дырочная пара локализована в области  $|x| \leq r_0, |y| \leq r_0/\Xi_K a^2$ . Этими неравенствами определяется размер области в  $r$ -пространстве, в которой движение двух дырок можно считать существенно коррелированным. Таким образом, корреляционная длина для дырочной пары с квазиимпульсом  $K$  оказывается анизотропной.

Следствием кристаллической симметрии является то, что все волновые функции  $\tilde{\chi}_{\hat{g}Kq}(k)$ , соответствующие совокупности векторов  $\hat{g}K$  ( $\hat{g}$  — преобразование из группы симметрии кристалла, переводящее вектор  $K$  в ему эквивалентный), образующие звезду вектора  $K$ , оказываются эквивалентными. Поэтому отражающая симметрию кристалла волновая функция пары должна быть представлена в виде линейной комбинации

$$\tilde{\Phi}_{Kq}^{(\Gamma)}(k) = \sum_{\{\hat{g}K\}} c_{\hat{g}K}^{(\Gamma)} \tilde{\chi}_{\hat{g}Kq}(k), \quad (5.10)$$

в которой выбор коэффициентов  $c_{\hat{g}K}^{(\Gamma)}$  определяется неприводимым представлением  $\Gamma$  группы симметрии кристалла, базисной функцией которого является (5.10). Эта функция соответствует нулевому квазиимпульсу пары, поскольку  $\sum_{\{\hat{g}K\}} \hat{g}K = 0$ .

Для кристаллов тетрагональной симметрии ( $2D$ -группа симметрии  $C_{4m}$ ) все элементы звезды произвольного вектора  $K$  можно разбить на две совокупности. Одна из них, включающая сам вектор  $K$ , содержит векторы  $\hat{g}K$ , которые связаны друг с другом отражениями относительно координатных осей  $k_x$  и  $k_y$ ; вторая аналогичным образом генерируется вектором, который получается из  $K$  в результате отражения от диагонали квадрата, представляющего  $2D$ -зону Бриллюэна. Тривиальному представлению  $A_{1g}$  соответствуют коэффициенты  $c_{\hat{g}K}^{(A_{1g})}$ , одинаковые для всех векторов звезды. В случае представления  $B_{1g}$  коэффициенты  $c_{\hat{g}K}^{(B_{1g})}$  одинаковы по абсолютной величине и отличаются знаком для векторов  $\hat{g}K$ , принадлежащих различным совокупностям. Учитывая явный вид (4.4) функций  $\tilde{\chi}_{\hat{g}Kq}(k)$ , нетрудно убедиться в том, что при подходящем выборе системы координат всем векторам  $\hat{g}K$  из первой совокупности отвечает

$k^2 = \nu k_x^2 - k_y^2$ , тогда как векторам второй совокупности соответствует  $k^2 = \nu k_y^2 - k_x^2$ . Таким образом, функция (5.10), соответствующая неприводимому представлению  $A_{1g}$ , при  $\nu \ll 1$  имеет вид

$$\tilde{\Phi}_{Kq}^{(\Gamma)}(k) \sim -\frac{2q^2}{(q^2 + k_x^2)(q^2 + k_y^2)} \quad (5.11)$$

и обладает полной симметрией относительно всех преобразований группы симметрии кристалла, т.е. условно может быть отнесена к  $s$ -типу орбитальной симметрии. Для функции, соответствующей неприводимому представлению  $B_{1g}$ , при  $\nu \ll 1$  имеем

$$\tilde{\Phi}_{Kq}^{(\Gamma)}(k) \sim -\frac{k_x^2 - k_y^2}{(q^2 + k_x^2)(q^2 + k_y^2)}, \quad (5.12)$$

эту функцию условно можно отнести к  $d$ -типу орбитальной симметрии.

Рассмотрим пару с данным  $K$ . Ее характерные размеры вдоль осей  $x$  и  $y$  в  $r$ -пространстве соответственно  $r_0$  и  $r_0/\Xi_K a^2$ . Таким образом, в  $k$ -пространстве размеры пары вдоль осей  $k_x$  и  $k_y$  по порядку величины соответствует  $r_0^{-1}$  и  $\Xi_K a^2/r_0$ . Площадь в  $k$ -пространстве, приходящаяся на одну пару с заданным  $K$ , может быть оценена как  $\Xi_K (a/r_0)^2 \sim \Xi_K$ , поскольку при концентрациях дырок, соответствующих менее чем половинному заполнению, можно считать, что  $r_0 \sim a$ . Следовательно, на всю область определения квазиимпульса относительного движения пары,  $\{K\}$ , фактически приходится всего одна пара. Этот вывод, естественно, остается в силе и для нормированной правильной волновой функции пары (5.10), соответствующей нулевому квазиимпульсу. Длину корреляции при этом можно оценить как  $\xi \sim \Xi_K^{-1/2}$ , она ограничена как сверху, так и снизу:  $\xi_m \leq \xi \leq \xi_M$ ; здесь  $\xi_M \sim (\Xi^{(0)})^{-1/2}$ , а минимальное значение  $\xi_m$  определяется наибольшей при заданном уровне допирования длиной  $l_K$  почти прямолинейного участка контура Ферми. Очевидно, что по порядку величины корреляционная длина может составлять всего несколько межатомных расстояний.

Образование квазистационарного состояния дырочной пары выводит из игры квазиимпульсы дырок  $k_1, k_2 \in \{K\}$ , в результате чего плотность одночастичных состояний в окрестности уровня Ферми снижается, что может быть интерпретировано как возникновение псевдощели в спектре одночастичных возбуждений.

Энергия пары (4.13), образующей квазистационарное состояние при данном  $K$ , включает в себя кинетическую энергию относительного движения



дырок и энергию их кулоновского взаимодействия. Пусть в системе возникло  $N_{pair}$  дырочных пар, образующих такое состояние. Корреляционная энергия этих квазичастиц может быть оценена как сумма энергии газа невзаимодействующих пар,  $E_0 N_{pair}$ , где  $E_0 = (e^2 r_0 / 2\pi)(\Xi a)^2$  — некоторое среднее значение величины (4.13), и энергии взаимодействия  $E^{(B)}$  пар друг с другом. Последнюю в первом порядке по концентрации пар можно оценить, если рассматривать  $N_{pair}$  дырочных пар как слабо неидеальный бозе-газ [32]:

$$E^{(B)} = \frac{1}{2} N_{pair} n_{pair} U^{(B)} (\Xi a^2)^2. \quad (5.13)$$

Здесь  $n_{pair}$  — концентрация пар, энергетический параметр взаимодействия можно оценить как  $U^{(B)} \approx 4\pi(2e)^2 r_0^2$ , включение в (5.13) второй степени фактора ослабления корреляций учитывает то обстоятельство, что должны быть исключены процессы одновременного рассеяния двух дырок в состояния, уже занятые другими дырками. В отсутствие спаривания  $2N_{pair}$  дырок можно рассматривать как слабо неидеальный ферми-газ, так что в этом случае (4.13) переходит в

$$E^{(F)} = \frac{1}{4} N_{pair} n_{pair} U^{(F)} (\Xi a^2) \quad (5.14)$$

(для оценок использовано выражение для энергии слабо неидеального ферми-газа с короткодействующим отталкиванием между частицами [32] в первом порядке по концентрации частиц). Здесь энергетический параметр взаимодействия двух дырок оценивается как  $U^{(F)} \approx 4\pi e^2 r_0^2$ , а фактор ослабления корреляций, как и в (3.10), входит в первой степени, поскольку учитывает лишь процессы взаимного рассеяния двух дырок. Так как  $\Xi a^2 \ll 1$ , то очевидно, что  $E^{(B)} \ll E^{(F)}$ , и образование квазистационарного состояния дырочных пар энергетически выгодно при условии  $E_0 N_{pair} < E^{(F)}$ , которое можно переписать как

$$n_{pair} > \frac{1}{2\pi^2} \frac{\Xi}{r_0}. \quad (5.15)$$

Учитывая, что  $\Xi^{-1/2}$  — характерный размер квазистационарного состояния в плоскости проводящего слоя, неравенство (5.15) можно интерпретировать следующим образом: возникновение такого состояния дырочных пар приводит к понижению энергии основного состояния, когда их двумерная концентрация начинает превышать величину порядка  $\Xi$ , т. е. когда пары в  $r$ -пространстве начинают перекрывать-ся.

Проигрыш в энергии  $E_0$ , соответствующий образованию пары дырок с отталкивательным взаимодействием при отрицательной эффективной массе, компенсируется уменьшением при конечной концентрации пар положительного вклада в энергию за счет ослабления корреляций между парами по сравнению с положительным вкладом в энергию от корреляций несвязанных в пары дырок (фермионов).

Обоснованием использования нами вывода о положительном знаке корреляционной энергии в модели слабо неидеального газа с короткодействующим отталкиванием [32] является следующее. Все свойства купратных ВТСП определяются небольшой в меру допированием концентрацией дырок, поскольку вплоть до оптимального легирования сохраняются диэлектрические корреляции. Радиус же экранирования  $r_0$  определяется большой концентрацией носителей металлической прафазы, если корреляционная диэлектрическая длина существенно больше величины  $r_0$ .

В рамках рассматриваемого подхода сверхпроводящее состояние необходимо описывать как бозе-конденсацию таких фокусирующихся пар. Сверхпроводящий параметр порядка будет определяться аномальным средним  $\langle c_k^+ c_{-k+K}^+ \rangle$ , т. е. соответствовать состоянию типа [33, 34] с неравным нулю суммарным импульсом пары. Однако при тех же условиях для формы поверхности Ферми, при которых могут возникать фокусирующиеся пары, могут возникать и электрон-дырочные пары с параметром порядка  $\langle c_k^+ c_{k+K_1} \rangle$  с суммарным импульсом  $K_1$  близким к величине  $K$ . Необходимый одновременный учет параметров  $\langle c_k^+ c_{-k+K}^+ \rangle$  и  $\langle c_k^+ c_{k+K_1} \rangle$  должен приводить к возникновению параметра  $\langle c_k^+ c_{-k+K-K_1}^+ \rangle$ , что при  $K \approx K_1$  соответствует куперовскому спариванию. Роль диэлектрического параметра порядка при легированиях, соответствующих сверхпроводящей области, может играть ближний антиферромагнитный порядок. В настоящее время имеются указания на существование в этой области нового типа упорядоченного состояния («скрытый» параметр порядка). Таковым может быть электрон-дырочное спаривание с мнимым параметром порядка, при котором, как известно [35], возникают замкнутые спонтанные токи [36].

## ЛИТЕРАТУРА

1. G. V. M. Williams and J. L. Tallon, Phys. Rev. B **57**, 10984 (1998).

2. Y. D. Leu, W. N. Huang, C. M. Wang, and H.-C. I. Kao, *Physica C* **261**, 284 (1996).
3. I. Bosovic and J. N. Eckstein, in: *Physical Properties of High Temperature Superconductors*, ed. by D. M. Ginsberg, World Scientific, Singapore (1996), Vol. V.
4. J. Kane, K.-W. Ng, and D. Moecher, *Physica C* **294**, 176 (1998).
5. S. Kashiwaya, T. Ito, K. Oka et al., *Phys. Rev. B* **57**, 8680 (1998).
6. J. C. Campuzano, G. Jennings, M. Faiz et al., *Phys. Rev. Lett.* **64**, 2308 (1990).
7. C. G. Olson, R. Liu, D. W. Linch et al., *Phys. Rev. B* **42**, 381 (1990).
8. D. M. King, Z.-X. Shen, D. S. Dessau et al., *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3159 (1993).
9. R. O. Anderson, R. Claessen, J. W. Allen et al., *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3163 (1993).
10. H. Ding, A. F. Bellman, J. C. Campuzano et al., *Phys. Rev. Lett.* **76**, 1533 (1996).
11. Z.-X. Shen, W. E. Spicer, D. M. King et al., *Science* **267**, 343 (1995).
12. R. A. Klemm, *Int. J. Mod. Physics B* **12**, 2920 (1998).
13. Y. Koike, T. Takabayashi, T. Noji et al., *Phys. Rev. B* **54**, R776 (1996).
14. S. M. Anlage, D.-H. Wu, J. Mao et al., *Phys. Rev. B* **50**, 523 (1994).
15. F. Hayashi, E. Ueda, M. Sato et al., *J. Phys. Soc. Jap.* **67**, 3234 (1998).
16. C. Kendziora, R. J. Kelley, and M. Onellion, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 727 (1996).
17. G. V. M. Williams, J. L. Tallon, E. M. Haines et al., *Phys. Rev. Lett.* **78**, 721 (1997).
18. M. R. Norman, H. Ding, M. Randeria et al., *Nature* **392**, 157 (1998).
19. B. Batlogg and V. Emery, *Nature* **382**, 20 (1996).
20. C. Renner, B. Revaz, K. Kadowaki, and I. Maggio-Aprile, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 3606 (1998).
21. H. Ding, M. R. Norman, T. Yokoya et al., *Phys. Rev. Lett.* **78**, 2628 (1997).
22. S. Massidda, N. Hamada, J. Yu, and A. J. Freeman, *Physica C* **157**, 571 (1989).
23. A. J. Freeman and J. Yu, *Helvetica Physica Acta* **61**, 401 (1988).
24. Е. Ф. Гросс, В. И. Перель, Р. И. Шехмаметьев, *Письма в ЖЭТФ* **13**, 320 (1971).
25. К. А. Вруекнер, *Phys. Rev.* **100**, 36 (1955).
26. Н. А. Бетхе, *Phys. Rev.* **103**, 1353 (1956). (Пер. в сб.: *Вопросы квантовой теории многих тел*, под ред. В. Л. Бонч-Бруевича, ИЛ, Москва (1959)).
27. Г. Липкин, *Квантовая механика*, Мир, Москва (1977).
28. М. Schafroth, S. Butler, and J. Blatt, *Helv. Phys. Acta* **30**, 93 (1957). (Пер. в сб.: *Теория сверхпроводимости*, под ред. Н. Н. Боголюбова, ИЛ, Москва (1960)).
29. А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов, *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике*, Наука, Москва (1971).
30. В. Velicky and I. Sak, *Phys. Stat. Sol.* **16**, 147 (1966).
31. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, Наука, Москва (1989).
32. Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Статистическая физика, часть 2*, Наука, Москва (1978).
33. А. И. Ларкин, Ю. Н. Овчинников, *ЖЭТФ* **47**, 1136 (1964).
34. R. Fulde and R. Ferrel, *Phys. Rev.* **135**, 550 (1964).
35. Б. А. Волков, А. А. Горбацевич, Ю. В. Копаев, В. В. Тугушев, *ЖЭТФ* **81**, 729 (1981).
36. С. М. Варма, *Phys. Rev. B* **61**, R3804 (2000).