

ВЫСОКАЯ T_c В КУПРАТАХ КАК УНИВЕРСАЛЬНОЕ СВОЙСТВО ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОЙ СИСТЕМЫ

Е. А. Мазур^{a}, Ю. Каган^b*

*^a Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»
115409, Москва, Россия*

*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»
123182, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 3 февраля 2015 г.

Теория Элиашберга, обобщенная за счет особых свойств электронной зоны конечной ширины для электрон-фононных (ЭФ) систем с непостоянной плотностью электронных состояний, а также с учетом электрон-дырочной неэквивалентности, частотного поведения перенормировки химического потенциала в зависимости от степени допирования и электронных корреляций в вершинной функции, используется для изучения T_c в купратах. Рассматривается фононный вклад в нодальную аномальную электронную функцию Грина (ФГ). Учитывается спаривание в пределах полной ширины электронной зоны, а не только в узком слое у поверхности Ферми. Частотная, температурная и зависимость от степени легирования комплексной перенормировки массы $\text{Re } Z$, $\text{Im } Z$, комплексной перенормировки химического потенциала $\text{Re } \chi(\omega)$, $\text{Im } \chi(\omega)$, плотности состояний $N(\varepsilon)$, перенормированной за счет ЭФ-взаимодействия, полученные расчетным путем, используются для расчета электронной нодальной аномальной ФГ. Обнаружено, что эффект подавления вклада высоких частот в полученных заново уравнениях Элиашберга ЭФ-системы с конечной шириной электронной зоны является решающим фактором для проявления эффекта высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП). Показано, что вблизи оптимального допирования дырочного типа в купратах высокое значение T_c воспроизводится спектральной функцией электрон-фононного взаимодействия, полученной из туннельных экспериментов. С увеличением степени дырочного допирования, ведущей к увеличению степени электрон-дырочной неэквивалентности, новый логарифмический член в уравнениях для T_c имеет тенденцию увеличивать T_c , в то время как увеличение затухания носителей и, особенно, ослабление «обрезающего» фактора приводят к снижению T_c .

DOI: 10.7868/S004445101508009X

1. ТЕОРИЯ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ ДЛЯ ЭЛЕКТРОННОЙ ЗОНЫ КОНЕЧНОЙ ШИРИНЫ С НЕПОСТОЯННОЙ ПЛОТНОСТЬЮ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ

Построение теории высокотемпературной сверхпроводимости в купратах (см. обзоры [1–6] и ссылки в них) в рамках ЭФ-механизма спаривания электронов представлялось трудной задачей. Считается, что такое высокое значение T_c в случае ЭФ-механизма сверхпроводимости воспроизводится теорией сильной связи Элиашберга [7] только с неоправданно высокими константами ЭФ-взаимодействия

$\lambda \geq 3$ [8]. На самом же деле при высоких константах ЭФ-связи $\lambda > 1$ вместо теории Мигдала–Элиашберга должен быть применен иной вариант теории ЭФ-систем [9]. В то же время установлено, что реальная константа ЭФ-взаимодействия λ в купратах незначительно превышает единицу, $\lambda \geq 1$ [4]. В ряде недавних экспериментальных работ [10, 11] (см. также работы [1, 2, 4] и ссылки в них), выполненных в купратах методом ARPES, были обнаружены при низких частотах $\omega \sim 70\text{--}75$ мэВ особенности (кинки) действительной и мнимой частей собственной-энергетической части (СЧ) электронной функции Грина (ФГ). В работах [12, 13] (см. также [1, 2, 4] и ссылки в этих работах) была обнаружена изотопическая зависимость положения таких сингулярностей. Это позволило одному из нас [14] интерпретировать эти кинки как проявление в электрон-

*E-mail: eugen_mazur@mail.ru

ном спектре частотных особенностей спектральной функции ЭФ-взаимодействия $\alpha^2 F(\omega)$. Еще в [15] было показано, что учет отличия от константы электронной плотности состояний вблизи поверхности Ферми приводит к реконструкции СЧ и плотности состояний в ЭФ-системах. В [14, 15] было показано, что реконструкция действительной части $\text{Re} \Sigma$ и мнимой части $\text{Im} \Sigma$ СЧ в материалах с конечной шириной электронной зоны не ограничена областью частот ω порядка предельной фононной частоты ω_D , а распространяется на область гораздо большего диапазона частот $\omega \gg \omega_D$. В результате ЭФ-взаимодействие модифицирует СЧ-функции Грина, включая ее аномальную часть, на значительном энергетическом расстоянии от поверхности Ферми в единицах дебаевских фононных частот, а отнюдь не только в окрестности поверхности Ферми $\mu - \omega_D < \omega < \mu + \omega_D$. Целью настоящей работы является изучение вопроса о том, какая часть экспериментальных результатов для высокого T_c (см., например, [1, 2, 4, 5] и ссылки в этих работах) воспроизводится ЭФ-взаимодействием с корректным учетом всех особенностей такого взаимодействия, и какая часть при этом «остаётся» для электрон-электронного взаимодействия. Для этой цели в настоящей работе построен пересмотренный вариант теории Мигдала–Элиашберга для ЭФ-системы в купратах [14] при ненулевой температуре $T \neq 0$ в намбу-представлении, который учитывает d -свойства, конечность ширины электронной зоны и непостоянство плотности электронных состояний в пределах зоны, а также эффекты, вытекающие из электрон-дырочной неэквивалентности. В этих условиях уравнения Элиашберга [7] выведены заново на более строгом основании, что привело к новым членам в уравнениях для параметра порядка, которые не учитывались в предыдущих версиях теории (см., например, [16–25]). Приведение полного списка предшествующих работ по вычислению T_c в рамках формализма теории Элиашберга представляется трудной задачей, поэтому ссылки можно найти в обзорах [1–6, 20, 22].

Учитывая все написанное выше, будем рассматривать ЭФ-систему без сингулярности Ван Хофа в электронном спектре с гамильтонианом, который включает электронную компоненту \hat{H}_e , ионную компоненту \hat{H}_i и компоненту, отвечающую электрон-ионному взаимодействию в гармоническом приближении \hat{H}_{ei} , так что

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_i + \hat{H}_{ei} - \mu \hat{N}.$$

\hat{H}_{ei} дается выражением

$$\hat{H}_{ei} = \sum_{n\kappa} \int d\mathbf{r} \psi^\dagger(x) \psi(x) \nabla_\alpha V_{eik}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{n\kappa}^0) u_{n\kappa}^\alpha.$$

Здесь введены следующие обозначения: M_κ — масса иона κ -типа в элементарной ячейке, μ — химический потенциал, \hat{N} — оператор числа электронов в системе, $u_{n\kappa}^\beta$ — α -проекция отклонения от положения равновесия иона κ -типа в элементарной ячейке с векторным индексом n , $\mathbf{R}_{n\kappa}^0 = \mathbf{R}_n^0 + \boldsymbol{\rho}_\kappa$ — радиус-вектор положения равновесия иона κ -типа в кристалле, V_{eik} — потенциал электрон-ионного взаимодействия, $\mathbf{u}_{n\kappa} = \mathbf{R}_{n\kappa} - \mathbf{R}_{n\kappa}^0$. Матричная функция Грина электронов \hat{G} в представлении Намбу определяется выражением

$$\hat{G}(x, x') = -\langle T \Psi(x) \Psi^\dagger(x') \rangle,$$

где обычные операторы рождения и уничтожения электронов фигурируют в качестве операторов Намбу. Записывая стандартные уравнения движения для электронной волновой функции и усредняя их с гамильтонианом \hat{H} , получаем уравнения для электронной ФГ. Матричная собственно-энергетическая часть без учета эффекта сверхпроводимости с вершиной $\hat{\Gamma}$ и с полным учетом электрон-электронных корреляций имеет вид

$$\begin{aligned} \hat{\Sigma}(x, x') = & \int dx_1 \int d\mathbf{r}'' \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}''|} \times \\ & \times \varepsilon^{-1}(\mathbf{r}'' \tau, x_1) \hat{\tau}_3 \hat{G}(x, x_2) \hat{\tau}_3 \hat{\Gamma}(x_2, x', x_1) + \\ & + i \left\{ \sum_{n, \kappa; n', \kappa'} \int dx_1 dx_2 \nabla_\alpha V_{eik}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{n\kappa}^0) \times \right. \\ & \times \nabla_\beta V_{eik}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_{n'\kappa'}^0) D_{n\kappa n'\kappa'}^{\alpha\beta}(\tau - \tau_1) \left. \right\} \times \\ & \times \hat{\tau}_3 \hat{G}(x, x_2) \hat{\tau}_3 \hat{\Gamma}(x_2, x', x_1). \quad (1) \end{aligned}$$

В выражении (1) $x \equiv \{\mathbf{r}, t\}$ концентрация электронов полагается малой. Как следствие этого, в (1) экранированием электрон-ионного потенциала можно пренебречь в силу слабой экранировки при небольшой концентрации электронов. Функция Грина фононов определяется как

$$D_{n\kappa, n'\kappa'}^{\alpha\beta}(\tau) = -\langle T_\tau (u_{n\kappa}^\alpha, u_{n'\kappa'}^\beta) \rangle,$$

$\hat{\Gamma}$ — вершинная функция, являющаяся матрицей в пространстве матриц Паули $\hat{\tau}_i$. Предполагается, что поведение вершины $\hat{\Gamma}$ формируется под влиянием первого слагаемого в (1), которое включает в себя все эффекты, проистекающие из электрон-электронных корреляций. В частности, предполагается,

что $\hat{\Gamma}$ имеет хорошо известный d -характер в зависимости от импульса в купратах [2]. В дальнейшей части работы мы не будем приводить явно первый вклад в собственно-энергетическую часть функции Грина электрона $\hat{\Sigma}_{el-el}(x, x')$ из (1), учитывая тем не менее его влияние через поведение вершины $\hat{\Gamma}$ и СЧ $\hat{\Sigma}_{el-el}(x, x')$ в виде всех упомянутых выше (см., например, [4, 5]) эффектов, происходящих из электрон-электронных корреляций и электрон-магнного взаимодействия в купратах. В частности, поведение аномальной части ФГ предполагается имеющим d -характер. СЧ запаздывающей электронной ФГ в дискретном наборе частотных точек $\omega_m = (2m + 1)\pi T$, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ на мнимой оси может быть записано в виде

$$\hat{\Sigma}(i\omega_m) = i\omega_m [1 - Z(\mathbf{p}, \omega_m)] \hat{\tau}_0 + \chi(\mathbf{p}, \omega_m) \hat{\tau}_3. \quad (2)$$

Значение величины $\chi(\mathbf{p}, \omega_m)$, действительная часть которой после аналитического продолжения определяет частотно-зависящий сдвиг химического потенциала, дается следующей формулой:

$$\chi(\mathbf{p}, \omega_m) = \frac{1}{2} [\Sigma(\mathbf{p}, \omega_m) + \Sigma(\mathbf{p}, -\omega_m)]. \quad (3)$$

Значение величины $Z(\mathbf{p}, \omega_m)$, действительная часть которой после аналитического продолжения задает перенормировку массы электрона, а мнимая часть — затухание электрона, определяется формулой

$$i\omega_m [1 - Z(\mathbf{p}, \omega_m)] = \frac{1}{2} [\Sigma(\mathbf{p}, \omega_m) - \Sigma(\mathbf{p}, -\omega_m)].$$

Нулевое значение частоты $\omega = 0$ не включено в набор точек $\omega_m = (2m + 1)\pi T$, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. После аналитического продолжения величин $Z(\mathbf{p}, i\omega_m)$ и $\chi(\mathbf{p}, \omega_m)$ на область комплексной переменной ω функции $Z(\mathbf{p}, \omega)$ и $\chi(\mathbf{p}, \omega)$ становятся четными и комплексными для всех значений частоты ω , включая значения частоты на действительной оси, за исключением дискретного набора точек $\omega_m = (2m + 1)\pi T$. В частности, значение величины $\chi(\mathbf{p}, \omega = 0)$ становится комплексным. Затухание электронов на поверхности Ферми определяется следующей величиной:

$$\text{Im } \Sigma(\omega = 0) = \text{Im } \chi(\mathbf{p}, \omega = 0) \neq 0.$$

Значение этой величины отлично от нуля, что определяет ненулевое затухание электронов на поверхности Ферми. Более того, можно утверждать, что затухание электронов на поверхности Ферми увеличивается с ростом температуры, поскольку с увеличением температуры происходит смещение нулевого значения частоты на комплексной плоскости

относительно ближайших точек $\omega = i\pi T$ и $\omega = -i\pi T$, при которых значение $\chi(\mathbf{p}, \omega)$ является действительным. После выполнения аналитического продолжения $i\omega_p \rightarrow \omega + i\delta$ фононный вклад в собственно-энергетическую часть нодальной фракции электронной ФГ \hat{g}_{Rnod} выражается [14] следующим образом:

$$\begin{aligned} \hat{\Sigma}_{nod}^{ph}(\xi, \omega) = & -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} dz' \times \\ & \times \int_{-\infty}^{\infty} d\xi' \alpha_{nod}^2(\xi', \xi, z) F(\xi', \xi, z) N_{0nod}(\xi') \times \\ & \times \frac{\text{th}(z'/2T) + \text{cth}(z/2T)}{\omega - z - z' + i\delta} \hat{\tau}_3 \text{Im } \hat{g}_{Rnod}(\xi', z') \tau_3. \quad (4) \end{aligned}$$

Будем использовать в дальнейшем технику для уравнений Элиашберга для действительных частот. Такая техника позволит нам контролировать в процессе вычислений частотное поведение $\text{Re } Z(\omega)$, $\text{Im } Z(\omega)$, $\text{Re } \Sigma(\omega)$ и $\text{Im } \Sigma(\omega)$, сравнивая результаты расчетов с соответствующими зависимостями, полученными из эксперимента. В выражении (2) введены матрицы Паули $\hat{\tau}_i$, $\alpha_{nod}^2(\xi', \xi, z) F(\xi', \xi, z)$ — нодальная фракция спектральной функции ЭФ-взаимодействия, $N_{0nod}(\xi)$ представляет собой «голую» (не перенормированную ЭФ-взаимодействием) нодальную фракцию переменной плотности электронных состояний, определяемую следующим выражением:

$$\int_{S(\xi)} \Gamma(\mathbf{p}_{nod}, \mathbf{p}', \omega') \frac{d^2 \mathbf{p}'}{\nu_{\xi \mathbf{p}'}} d\xi = \int_{S(\xi)} N_{0nod}(\xi, \omega') d\xi$$

при энергии «голых» электронов ξ , отсчитываемой от уровня Ферми с импульсом \mathbf{p}_{nod} , ориентированным в направлении нодальной области. Направление спина будем обозначать стрелочками, ориентированными вверх и вниз. $\Gamma(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \omega')$ — вершина, определяемая кулоновскими эффектами, значительно ослабляется вблизи уровня оптимального допирования δ в силу эффекта «пика в рассеянии вперед» (ПРВ) в процессах рассеяния высококоррелированных электронов [26] для поперечной по отношению к нодальному направлению компоненты импульса $q_{\perp} > \delta\pi/a$, где a — модуль вектора трансляций для «медной» плоскости. В силу эффекта ПРВ матричный элемент $\Gamma g_j(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ для импульса \mathbf{p} , имеющего нодальное направление, может быть приближенно записан в следующем виде с использованием θ -функции:

$$\Gamma(\mathbf{p}, \mathbf{p}')g_j(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = Gg_{jnod}(\xi, \xi') (1 - \theta(|\varphi_{nod} - \varphi| - \delta\pi/aq(\xi))).$$

Такое приближение предполагает, что матричный элемент ЭФ-взаимодействия с учетом вершины $Gg_j(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ не зависит от угла φ , отсчитывающего отклонение направления вектора \mathbf{q} от строго нодального направления в двумерном объеме Ферми. При уровне допирования, лежащем в окрестности оптимального уровня допирования, ПРВ все еще четко выражен [26]. В результате мы получаем раздельные (не связанные) уравнения для нодальной и антинодальной ФГ при уровнях допирования, близких к уровню оптимального допирования $\delta \approx 0.16$. В случае электронной зоны конечной ширины мы будем рассматривать не перенормированную ЭФ-взаимодействием нодальную фракцию переменной плотности электронных состояний $\Gamma N_{0nod}(\xi)$, определяемую следующей формулой

$$\int_{S(\xi)} \Gamma(\mathbf{p}_{nod}, \mathbf{p}') \frac{d^2 \mathbf{p}'}{\nu_{\xi \mathbf{p}'}} d\xi = \int_{S(\xi)} N_{0nod}(\xi) d\xi$$

при энергии голых электронов ξ , отсчитываемой от уровня Ферми при импульсе электрона \mathbf{p}_{nod} , ориентированном в нодальном направлении. Аналогичное выражение может быть записано для антинодальной ориентации импульса \mathbf{p} , при этом параметр порядка будет предполагаться имеющим d -характер [1, 2, 14]. В определение включена вершина Γ , что гарантирует включение в описание ЭФ-взаимодействия всех эффектов электрон-электронной корреляции, а также приводит к d -характеру электрон-фононной собственно-энергетической части электронной ФГ. В оставшейся части работы будет рассматриваться только нодальная фракция электронной ФГ. Под $\chi_\varphi(\xi, \omega)$ будет пониматься функция, обычно именуемая ренормализацией химического потенциала ЭФ-взаимодействием, в направлении, задаваемом углом φ , отсчитываемом от нодального направления. Не предполагается, что импульсы электронов лежат на поверхности Ферми. Будем пренебрегать в формуле (4) зависимостью $\alpha_\varphi^2 F$ от переменных ξ, ξ' . Заменим $Z(\mathbf{p}', \omega)$ величиной $Z_\varphi(\xi, \omega)$, соответствующей постоянной энергии ξ в направлении, определяемом углом φ . Усредним выражение (4) по углу φ отклонения импульса от строго нодального направления. Из формулы (4) с учетом стандартного выражения для запаздывающей ФГ $\hat{g}_{Rnod}(\xi', z')$ получаем уравнения для действительной $\text{Re} \varphi(\xi, \omega)$ и мнимой $\text{Im} \varphi(\xi, \omega)$ частей нодальной фракции аномальной части СЧ

ФГ $\varphi_\varphi(\xi, \omega)$ вблизи T_c в виде следующей системы линейаризованных уравнений:

$$\text{Re} \varphi(\xi, \omega) = -\frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} dz' K^{ph}(z', \omega) \int_{-\mu}^{\infty} d\xi' N_0(\xi') \times \times \text{Im} \frac{\varphi(\xi', z')}{[Z(\xi', z')z']^2 - (\xi' + \chi(\xi', z'))^2}, \quad (5)$$

$$\text{Im} \varphi(\xi, \omega) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dz' \int_{-\mu}^{\infty} d\xi' N_0(\xi') \times \times \text{Im} \frac{\varphi(\xi', z')}{[Z(\xi', z')z']^2 - (\xi' + \chi(\xi', z'))^2} \alpha^2(\omega - z') F(\omega - z') \times \times \left[\text{cth} \frac{\omega - z'}{2T} + \text{th} \frac{z'}{2T} \right] \text{sign}(\omega - z'), \quad (6)$$

где

$$K^{ph}(z', \omega) = \int_0^{\infty} dz \alpha^2(z) F(z) \times \times \frac{1}{2} \left\{ \frac{\text{th}(z'/2T) + \text{cth}(z/2T)}{z' + z - \omega} - \frac{\text{th}(z'/2T) - \text{cth}(z/2T)}{z' - z - \omega} \right\}.$$

В формулах (5), (6) мы пренебрегли в первом приближении кулоновским вкладом в параметр порядка. Для нодальной (1,1) компоненты мнимой части матрицы СЧ

$$\text{Im} \Sigma_\varphi(\omega) = -\text{Im} Z_\varphi(\omega)\omega + \text{Im} \chi_\varphi(\omega)$$

может быть получено следующее выражение:

$$\text{Im} \Sigma_{nod}(\omega) = -\pi \int_0^{\infty} dz \alpha_{nod}^2(z) F(z) \times \times \{ [N_{nod}(\omega - z) + N_{nod}(\omega + z)] n_B(z) + + N_{nod}(\omega - z) f(z - \omega) + N_{nod}(\omega + z) f(z + \omega) \}. \quad (7)$$

Выражение для действительной части нодальной (1,1) матричной компоненты $\text{Re} \Sigma_\varphi(\omega) = [1 - \text{Re} Z_\varphi(\omega)]\omega + \text{Re} \chi_\varphi(\omega)$ имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \Sigma_{nod}(\omega) = & -P \int_0^\infty dz \alpha_{nod}^2(z) F(z) \times \\ & \times \int_0^\infty dz' \left\{ f(-z') \left(-\frac{N_{nod}(-z')}{z' + z + \omega} + \frac{N_{nod}(z')}{z' + z - \omega} \right) + \right. \\ & \left. + f(z') \left(-\frac{N_{nod}(-z')}{z' - z + \omega} + \frac{N_{nod}(z')}{z' - z - \omega} \right) \right\}. \quad (8) \end{aligned}$$

С учетом (6), (8) легко видеть, что $\operatorname{Re} \chi_{nod}(\omega)$ и $\operatorname{Im} Z_{nod}(\omega)$ выражаются через интегралы от разницы плотностей состояний как функций энергии противоположного знака и, таким образом, отражают степень электрон-дырочной неэквивалентности в ЭФ-системе. Эти величины обращаются в нуль при нулевой степени электрон-дырочной неэквивалентности, т. е. при нулевой степени допирования наполовину заполненной зоны. При получении (6), (7) был принят во внимание факт, что при температурах около T_c аномальная функция Грина может считаться равной нулю, $\operatorname{cth}(\omega_{ph}/2T) \approx 1$. В формуле (6) $n_B(z)$ — функция распределения Бозе, $f(z')$ — функция распределения Ферми. В формулах (6) и (8) ренормализованная ЭФ-взаимодействием нодальная фракция плотности электронных состояний $N_{nod}(z')$ выражается через голую нодальную фракцию плотности электронных состояний $N_{0\,nod}(\xi)$ так:

$$N_{nod}(z') = -\frac{1}{\pi} \int_{-\mu}^\infty d\xi' N_{0\,nod}(\xi') \operatorname{Im} g_{R\,nod}(\xi', z'). \quad (9)$$

В дальнейшем нижний индекс будет опущен или будет заменяться на индекс « n ». Строго говоря, такая плотность состояний $N(z')$ определена в пределах диапазона $-\infty < z' < \infty$ и не является симметричной (четной) функцией z' . Частотное поведение вершины Γ включено в определение $N_{0\,nod}(\xi')$. В дальнейшем мы будем аппроксимировать выражение для «голой» (модифицированной допированием, но не ЭФ-взаимодействием) не постоянную электронную плотность состояний $\Gamma N_0(\xi)$ выражением $N_0(\xi) = \zeta N_0$ при $-W[1 + (\zeta - 1)d]/\zeta \leq \xi \leq dW$ и $N_0(\xi) = N_0$ при $dW < \xi \leq W$, где $(1 + 1/\zeta)W$ является шириной исходной «голой» зоны, d — оптимальный уровень допирования, $\zeta \approx 1.38$ [27]. График модельной плотности состояний в относительных безразмерных единицах $N_0(\xi)/N_0$ показан на рис. 1. Такая модель переменной плотности электронных состояний оставляет зону наполовину заполненной в отсутствие допирования. Введенная выше модельная плотность состояний приобретает физический смысл только при уровнях допирования

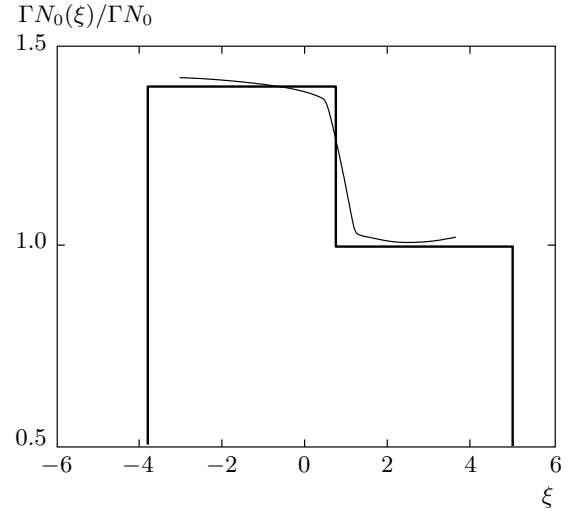


Рис. 1. Относительная нодальная электронная плотность состояний в допированном Вi2212 дырочного типа при $p = 0.16$ как функция энергии электрона (дырки) ξ , представленная в безразмерных переменных, выраженных в единицах ω_0 (толстая линия); вычисленная [13] электронная плотность состояний (тонкая линия)

не меньших 0.1. В оставшейся области переменной ξ «голая» плотность состояний $N_0(\xi)$ будет полагаться равной нулю. Мы будем полагать для простоты, что допирование дырочного или электронного типа приводит к сдвигу химического потенциала μ от его значения при половинном заполнении линейным образом в зависимости от степени допирования $\delta\mu_{el} = W\delta$, так что $\mu_{el} = W(1/\zeta + \delta)$ и $\delta\mu_{hole} = -\delta W/\zeta$, так что $\mu_{el} = W(1 - \delta)/\zeta$. Пренебрегая зависимостью $\operatorname{Re} \Sigma_\varphi(\xi, \omega)$ и $\operatorname{Im} \Sigma_\varphi(\xi, \omega)$ от ξ , мы получаем в результате интегрирования по ξ следующее уравнение для действительной части нодальной фракции комплексного аномального параметра порядка:

$$\begin{aligned} |Z(\omega)| \operatorname{Re} \Delta(\omega) = & P \int_{-\infty}^\infty dz' N_0 K^{ph}(z', \omega) \times \\ & \times \frac{1}{z'|Z(z')|} \{ \Xi(z') [\operatorname{Re} \Delta(z') \operatorname{Re} Z(z') + \\ & + \operatorname{Im} \Delta(z') \operatorname{Im} Z(z')] + 0.5\Lambda(z') \times \\ & \times [\operatorname{Im} \Delta(z') \operatorname{Re} Z(z') - \operatorname{Re} \Delta(z') \operatorname{Im} Z(z')] \}. \quad (10) \end{aligned}$$

Для мнимой части $\operatorname{Im} \Delta(\omega)$ нодальной фракции параметра порядка мы получаем при $\operatorname{cth}(z/2T) \approx 1$

$$\begin{aligned} \text{Im } \Delta(\omega) |Z(\omega)| &= \pi \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{1}{2} N_0 \alpha^2 (|\omega - z|) \times \\ &\times F(|\omega - z|) \text{sign}(\omega - z) \frac{1 + \text{th}(z/2T)}{z|Z(z)|} \times \\ &\times \{ \Xi(z) [\text{Re } \Delta(z) \text{Re } Z(z) + \text{Im } \Delta(z) \text{Im } Z(z)] + \\ &+ 0.5 \Lambda(z') [\text{Im } \Delta(z') \text{Re } Z(z') - \\ &- \text{Re } \Delta(z') \text{Im } Z(z')] \}. \end{aligned} \quad (11)$$

Здесь

$$\Delta(\omega) = \varphi(\omega) / |Z(\omega)|,$$

$$|Z(z')| = (\text{Re}^2 Z(z') + \text{Im}^2 Z(z'))^{1/2},$$

интеграл по z' в (10) берется в смысле главного значения, что отмечено символом P , $\Xi(z')$ и $\Lambda(z')$ представляют собой факторы, которые учитывают конечность ширины электронной зоны,

$$\begin{aligned} \Xi(z) &= \text{arctg} \left[\frac{\xi_H + z' \text{Re } Z(z', p)}{-\text{Im } \Sigma(-z', p)} \right] + \\ &+ \text{arctg} \left[\frac{\xi_H - z' \text{Re } Z(z', p)}{-\text{Im } \Sigma(z', p)} \right] + \\ &+ \zeta \text{arctg} \left[\frac{-\xi_L - z' \text{Re } Z(z', p)}{-\text{Im } \Sigma(-z', p)} \right] + \\ &+ \zeta \text{arctg} \left[\frac{-\xi_L + z' \text{Re } Z(z', p)}{-\text{Im } \Sigma(z', p)} \right] > 0, \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \Lambda(z') &= \ln \left[\left(\frac{(\xi_H + 2z' \text{Re } Z(z'))^2 + \text{Im } \Sigma(-z')^2}{(\xi_H - 2z' \text{Re } Z(z'))^2 + \text{Im } \Sigma(+z')^2} \right) \times \right. \\ &\times \left. \left(\frac{(\xi_L - 2z' \text{Re } Z(z'))^2 + \text{Im } \Sigma(z')^2}{(\xi_L + 2z' \text{Re } Z(z'))^2 + \text{Im } \Sigma(-z')^2} \right) \right] + \\ &+ (\zeta - 1) \ln \left(\frac{(z' \text{Re } Z(z'))^2 + \text{Im } \Sigma(-z')^2}{(z' \text{Re } Z(z'))^2 + \text{Im } \Sigma(+z')^2} \right), \end{aligned} \quad (13)$$

где $\xi_H = W - \delta\mu + \text{Re } \chi(z')$, $\xi_L = -W/\zeta - \delta\mu + \text{Re } \chi(z')$. В правой части уравнений (10), (11) для комплексного параметра порядка $\varphi(z)$ содержатся ранее не учитывавшиеся в полной мере [16–25] вклады, пропорциональные произведению $\text{Im } \varphi(z')$, «обрезающего» $\Xi(z)$, и логарифмического $\Lambda(z)$ вкладов. В силу отмеченных ранее свойств электрона на поверхности Ферми, мнимая компонента СЧ $-\text{Im } \Sigma(\pm z')$ в (12), (13) никогда не обращается в нуль. Заметим также, что логарифмический член также демонстрирует поведение, аналогичное «обрезающему» эффекту. Предполагая постоянство «голой» плотности электронных состояний, полагая $\zeta = 1$ и пренебрегая отличием $\text{Im } Z(z')$ от нуля, $\Xi(z')$ от $(1 + \zeta)\pi$, а также полностью пренебрегая логарифмическим

членом $\Lambda(z')$, можно было бы перейти от системы уравнений (10), (11) к обычной системе уравнений Элиашберга [7, 16–20], в которой пренебрегается шириной электронной зоны, спариванием вне ферми-поверхности, изменениями плотности электронных состояний и эффектами электрон-дырочной неэквивалентности. Константа ЭФ-связи оценивается [14] величиной $\lambda \sim 1.21$, исходя из наклона кривой $\text{Re } \Sigma(\omega) \sim -\lambda\omega$ при низких частотах, что находится в соответствии с результатами, представленными в обзорах [4, 5].

2. ВЫСОКАЯ T_c В КУПРАТАХ КАК СЛЕДСТВИЕ ПОВЕДЕНИЯ ПЛОТНОСТИ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ В ЗОНЕ КОНЕЧНОЙ ШИРИНЫ

Вычисления значений функциональных зависимостей $\text{Re } Z(\omega, p, T)$, $\text{Im } Z(\omega, p, T)$, $\text{Re } \chi(\omega, p, T)$ и $\text{Im } \chi(\omega, p, T)$, содержащихся в выражениях (10)–(12), были выполнены с использованием формализма, развитого в работе [14] с использованием (6)–(8) и $W = 5$ [27, 28]. Результаты для $\text{Re } Z(\omega)$ и $\text{Im } Z(\omega)$ в «дырочных» купратах Bi2212 при $T = 0.10$ и оптимальном уровне допирования $\delta = 0.16$ находятся в согласии с экспериментами [11, 29] (рис. 2). Частотная зависимость ренормализации комплексного химического потенциала $\text{Re } \chi_{nod}(\omega)$, $\text{Im } \chi_{nod}(\omega)$ представлена на рис. 3. Частотное поведение четной, отрицательной при всех значениях частоты функции $\text{Im } \chi_{nod}(\omega)$ весьма схоже с частотным поведением $\text{Im } \Sigma_{nod}(\omega)$ [14], зависимость логарифмического члена $\Lambda(z)$ от частоты представлена на рис. 4, график

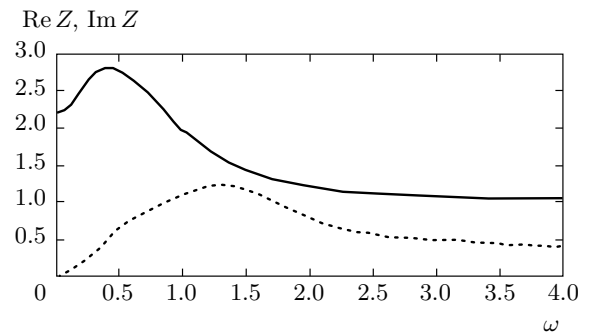


Рис. 2. Безразмерная комплексная перенормировка массы электрона (дырки) $\text{Re } Z(\omega)$ (сплошная линия), $\text{Im } Z(\omega)$ (пунктир) в Bi2212. Полуширина зоны $W = 5$, $T = 0.15$, допирование дырочного типа, $p = 0.16$; W, T представлены в безразмерных единицах ω_0

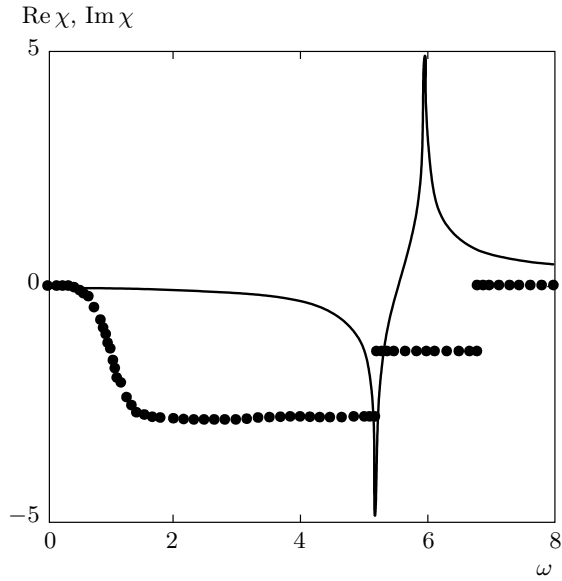


Рис. 3. Нодальная фракция комплексной ренормализации химического потенциала $\text{Re } \chi(\omega)$ (сплошная линия) и $\text{Im } \chi(\omega)$ (пунктир) при оптимальном допировании дырочного типа $p = 0.16$ в Bi2212; T_c , $\chi(\omega)$ и ω выражены в безразмерных единицах ω_0

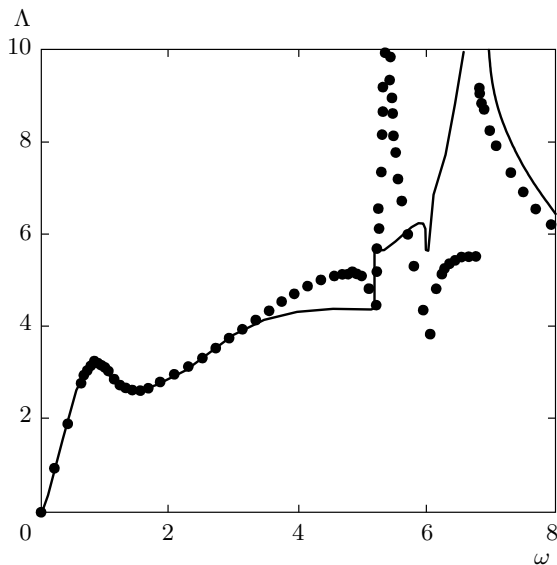


Рис. 4. Безразмерный «логарифмический» фактор при оптимальном допировании дырочного типа $p = 0.16$ (сплошная линия) и при той же степени допирования электронного типа (пунктир) в Bi2212 при $T = 0.25$

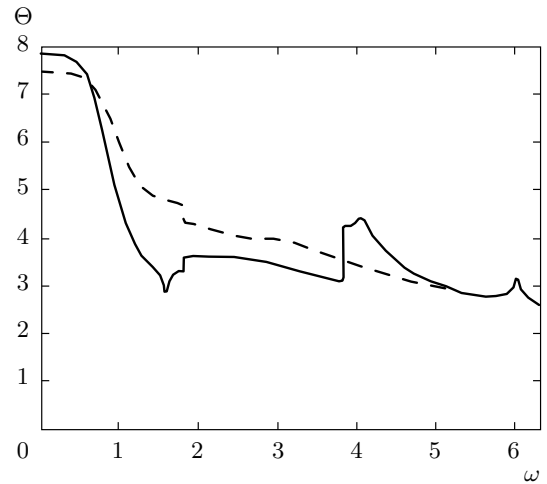


Рис. 5. Безразмерный фактор конечной ширины зоны $\Theta(\omega)$ при оптимальном допировании дырочного типа $p = 0.16$ (сплошная линия) и при той же степени допирования электронного типа (штриховая линия) в Bi2212 при $T = 0.25$

«обрезающего» фактора $\Xi(z)$ для этого случая представлен на рис. 5. Из рис. 3 также ясно, что действительная часть ренормализации химического потенциала $\text{Re } \chi_{nod}(\omega)$ не может полагаться малой, что влияет на поведение $\Xi(\omega)$ и ведет к перераспределению вкладов в правой части уравнений (10), (11). Из рис. 4, 5 становится ясно, что вклад отрицательных составляющих в $\text{Re } \Delta(\omega < \omega_D)$ и, следовательно, в значение T_c , в существенной степени ослаблен, а при частотах, удовлетворяющих условию $\omega > W$, является полностью подавленным. Решение методом итераций системы уравнений (10), (11) выполнено для ясности результатов с использованием спектральной функции ЭФ-взаимодействия эйнштейновского типа $\alpha^2 F(z) = \lambda \omega_0 \delta(z - \omega_0)/2$, которая «моделирует» экспериментально наблюдавшееся поведение функции Элиашберга $\alpha^2 F(z)$ [14, 30–32] для Bi2212 при $\omega_0 \approx 60$ мэВ. При проведении вычислений T_c в купратах мы исходим из того экспериментального факта, что значение T_c определяется нодальной фракцией ФГ [33, 34]. Поведение действительной части параметра порядка $\text{Re } \Delta_{nod}(\omega, T)$ и мнимой части $\text{Im } \Delta_{nod}(\omega, T)$ при оптимальном уровне допирования дырочного типа $\delta = 0.16$ с результирующим значением $T_c \sim 0.28\omega_0$ представлено на рис. 6, 7. Аналогичный результат вычислений в случае допирования $\delta = 0.16$ электронного типа представлен на рис. 8, 9 с результирующим значением $T_c = 0.033\omega_0$. Все вычисления были выполнены с полным учетом логарифмического фактора $\Xi(z)$.

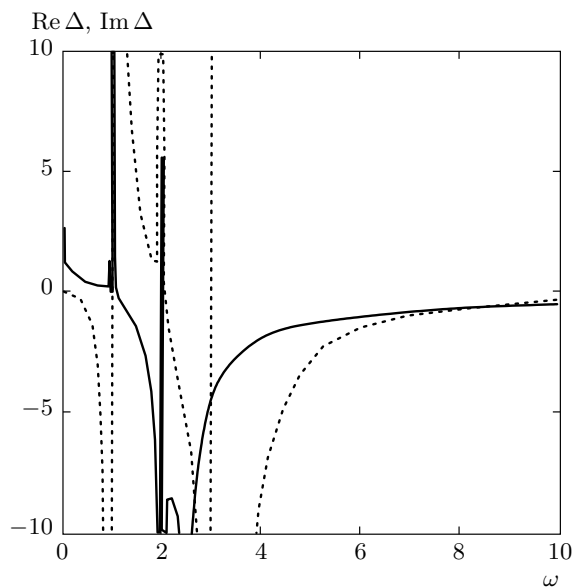


Рис. 6. $\text{Re } \Delta(\omega)$ (сплошная линия) и $\text{Im } \Delta(\omega)$ (пунктир) в Bi2212 при допировании дырочного типа $p = 0.16$, $T = 0.09$; T , Δ выражены в безразмерных единицах ω_0

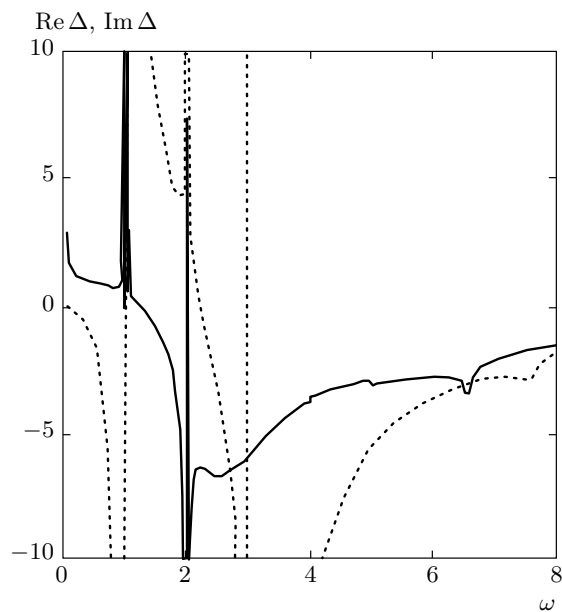


Рис. 8. $\text{Re } \Delta(\omega)$ (сплошная линия) и $\text{Im } \Delta(\omega)$ (пунктир) в Bi2212 при допировании электронного типа $p = 0.16$, $T = 0.06$; T , Δ выражены в безразмерных единицах усредненной фоновой частоты ω_0

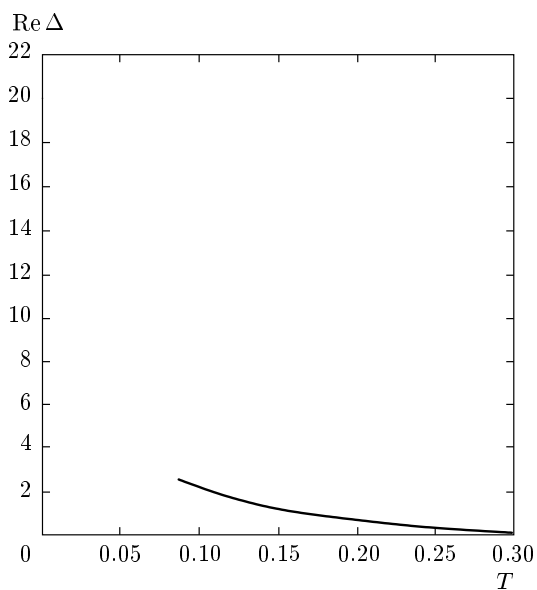


Рис. 7. Зависимость $\text{Re } \Delta(\omega = 0.3, T)$ от температуры в Bi2212 при допировании дырочного типа $p = 0.16$; T , ω , Δ выражены в безразмерных единицах усредненной фоновой частоты ω_0

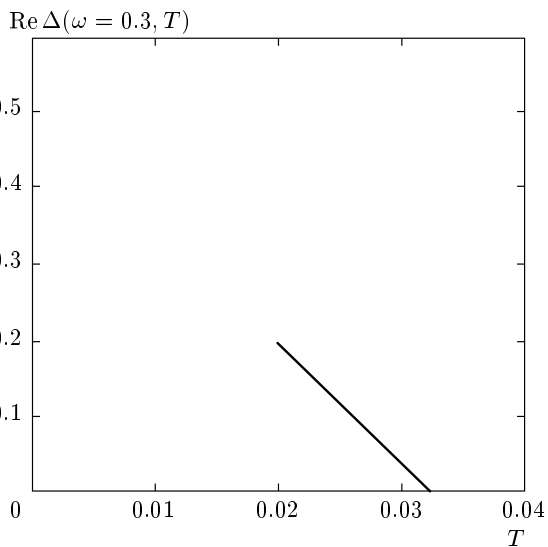


Рис. 9. Зависимость $\text{Re } \Delta(\omega = 0.3, T)$ от температуры в Bi2212 при допировании электронного типа $p = 0.16$; T , ω , Δ выражены в безразмерных единицах усредненной фоновой частоты ω_0

3. ВЫВОДЫ

Анализируя представленные результаты и суммируя все написанное ранее, мы приходим к следующим выводам.

Анализируя представленные результаты и суммируя все написанное ранее, мы приходим к следующим выводам.

1. В работе не делалось никаких предположений и не использовалось никаких подгоночных параметров. Все рассмотрение проводилось на действительной оси так, чтобы можно было исследовать частотное поведение параметра порядка без процедуры аналитического продолжения одновременно с расчетом T_c . Полученное значение T_c в купратах дырочного типа не описывается формулой Макмиллана [18]. Полученный результат для T_c не воспроизводится также асимптотической формой $T_c = 0.18\sqrt{\lambda\langle\omega^2\rangle}$ теории Элиашберга [3, 8], которая считается справедливой при $\lambda \geq 10$. Подставляя значения ω_0 в формулу для T_c при $\omega_0 = 60$ мэВ, мы получаем несколько увеличенное значение T_c по сравнению с экспериментальным значением $T_c = 95$ К в Bi2212, что может быть объяснено пренебрежением в наших вычислениях кулоновским псевдопотенциалом, а также эффектом несколько завышенной оценки T_c в модели Эйнштейна фононного спектра.

2. Высокие значения T_c в купратах при дырочном допировании получаются при учете $\text{Re } \chi_{nod}(\omega)$ и эффекта перенормировки химического потенциала μ при допировании, так же как и учете частотного поведения мнимой компоненты собственной-энергетической части $\text{Im } \Sigma(\pm\omega)$, что ведет к «обрезанию» большого негативного вклада в интеграл в правой части уравнений (10), (11) и определяет поведение $\text{Re } \Delta(\omega)$ и рост T_c . Значение T_c в электронно-допированных купратах представляется совершенно обычным и может быть вычислено стандартным образом [8].

3. Увеличение $\text{Re } \Delta(\omega)$ в диапазоне $0 < \omega < \omega_D$ благодаря резкому ослаблению негативного вклада от $\text{Re } \Delta(\omega > \omega_D)$ является критическим фактором в увеличении T_c в купратах. Полученные в настоящей работе вклады в (10), (11), пропорциональные затуханию $\text{Im } Z(z')$ носителей, которые ведут к значительному уменьшению T_c при увеличении затухания носителей $\text{Im } Z(z')$, были полностью упущены в предыдущих работах [16–25]. Конкуренция двух упомянутых выше факторов приводит к куполообразному поведению температуры сверхпроводящего перехода T_c в зависимости от концентрации дырок при дырочном допировании в купратах. Три фактора, критическим образом влияющие на T_c в ЭФ-системе, а именно: роль вкладов, пропорциональных $\text{Im } \Delta(\omega)$, «обрезающий» эффект, связанный с фактором $\Xi(z)$ (12), и логарифмический вклад $\Lambda(z)$ (13), не были изучены в формализме предыдущих работ [16–25]. Неучет этих вкладов, пропорциональных $\text{Im } \Delta(\omega)$, приводил к грубому нарушению соотношений Крамерса–Кронига для мнимой и действительной ча-

стей параметра порядка в уравнениях Элиашберга.

4. Описания ФГ электрона (дырки) не могут рассматриваться исключительно в рамках ЭФ-взаимодействия, поскольку расчеты, проведенные в настоящей работе, используют эффект пика в рассеянии вперед и d -характер аномальной ФГ, причем обе эти черты являются многочастичными эффектами.

5. Показана невозможность пренебрежения ни одной из величин $\text{Re } Z(\omega)$, $\text{Im } Z(m)$, $\text{Re } \chi(\omega)$, $\text{Im } \chi(\omega)$, $N(\varepsilon)$ или зависимостью этих величин от уровня допирования, температурной или частотной зависимостью в процессе вычисления аномальной ФГ, как это обычно делается.

6. Для появления высокого T_c в ЭФ-системе критически важно учитывать конечность ширины электронной зоны. Учет конечности ширины электронной зоны и непостоянства плотности электронных состояний в такой зоне приводит к возможности спаривания электронов во всем ферми-объеме, в отличие от обычно рассматриваемого спаривания в пределах слоя толщиной ω_D у поверхности Ферми. Конечность ширины электронной зоны приводит к весьма сложному частотному поведению $\text{Re } \chi_{nod}(\omega)$ в купратах.

7. Учет кулоновского псевдопотенциала электронов приводит к несущественному уменьшению вычисляемого T_c и будет выполнен отдельно. Все полученные результаты верны также для стандартной ЭФ-системы, не проявляющей d -свойства. Авторы предполагают, что в дибориде магния MgB_2 и пниктидах имеет место аналогичная ситуация с ситуацией с высоким T_c в купратах, поскольку в свойствах этих материалов прослеживается много общих черт [35]. Из настоящего рассмотрения становится ясно, что значение T_c в ЭФ-системах может быть повышено по сравнению со значением T_c в купратах путем оптимизации поведения «обрезающего» фактора одновременно с поведением логарифмического фактора путем подбора материала с адекватной шириной электронной зоны наряду с оптимальным поведением плотности электронных состояний $N_0(\varepsilon)$ при слабой электрон-дырочной неэквивалентности и при умеренном значении константы ЭФ-связи.

ЛИТЕРАТУРА

1. E. G. Maximov, M. L. Kulich, and O. V. Dolgov, *cond-mat/10014859*.
2. X. J. Zhou, T. Cuk, T. Devereaux, and N. Nagaosa, *Handbook of High-Temperature Superconductivity*.

- Theory and Experiment*, ed. by J. R. Schrieffer, Springer (2007), p. 87.
3. F. Marsiglio and J. P. Carbotte, *Superconductivity: Conventional and Unconventional Superconductors*, V. 1, ed. by K. H. Bennemann and J. B. Ketterson, Springer, Berlin–Heidelberg (2008), p. 73.
 4. А. С. Мищенко, УФН **52**, 1193 (2009).
 5. O. Gunnarson and O. Rosch, *J. Phys.: Condens. Matter*. **20**, 043201 (2008).
 6. V. Z. Kresin and S. A. Wolf, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 481 (2009).
 7. Г. М. Элиашберг, ЖЭТФ **38**, 966 (1960).
 8. P. B. Allen and R. C. Dynes, *Phys. Rev. B* **12**, 905 (1975).
 9. А. С. Александров, Е. А. Мазур, ЖЭТФ **96**, 1773 (1989).
 10. A. Lanzara et al., *Nature* **412**, 510 (2001).
 11. Bok Jin Mo, Yun Jae Hyun, Choi Han-Yong, Zhang Wentao, X. J. Zhou, Varma Chandra M., *Phys. Rev. B* **81**, 174516 (2010); cond-mat/09120088.
 12. G.-H. Gweon, T. Sasagawa, and H. Takagi, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 227001 (2006); cond-mat/07081027.
 13. H. Iwasawa, J. F. Douglas, K. Sato et al., *Phys. Rev. Lett.* **101**, 157005 (2008).
 14. E. A. Mazur, *Europhys. Lett.* **90**, 47005 (2010); **90**, 69901 (2010).
 15. А. С. Александров, В. Н. Гребенев, Е. А. Мазур, Письма в ЖЭТФ **45**, 357 (1987).
 16. S. Engelsberg and J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **131**, 993 (1963).
 17. D. J. Scalapino, J. R. Schrieffer, and J. W. Wilkins, *Phys. Rev.* **148**, 263 (1966).
 18. W. L. McMillan, *Phys. Rev.* **167**, 331 (1968).
 19. А. Е. Каракозов, Е. Г. Максимов, С. А. Машков, ЖЭТФ **68**, 1937 (1975).
 20. *High Temperature Superconductivity*, ed. by V. L. Ginzburg and D. A. Kirzhnits, Consultants Bureau, New York (1982).
 21. В. Н. Гребенев, Е. А. Мазур, ФНТ **12**, 478 (1987).
 22. W. E. Pickett, *Rev. Phys. Rev. B* **26**, 1186 (1982).
 23. F. Marsiglio, *J. Low Temp. Phys.* **87**, 659 (1992).
 24. D. M. Tang, J. Li, and Gong Ch-De, *Sol. St. Comm.* **133**, 259 (2005).
 25. E. Schachinger and J. P. Carbotte, *Phys. Rev. B* **77**, 094524 (2008).
 26. M. L. Kulich, *Phys. Rep.* **338**, 1 (2000).
 27. A. A. Kordyuk and S. V. Borisenko, *Low Temp. Phys.* **32**, 298 (2006).
 28. M. M. Korshunov and S. G. Ovchinnikov, *Eur. Phys. J. B* **57**, 271 (2007).
 29. W. Zhang, G. Liu, L. Zhao et al., *Phys. Rev. Lett.* **100**, 107002 (2008).
 30. S. I. Vedeneev, A. G. M. Jensen, P. Samuely, V. A. Stepanov, A. A. Tsvetkov, and P. Wyder, *Phys. Rev. B* **49**, 9823 (1994).
 31. S. I. Vedeneev, A. G. M. Jansen, A. A. Tsvetkov, and P. Wyder, *Phys. Rev. B* **51**, 16380 (1995).
 32. S. I. Vedeneev, A. G. M. Jensen, and P. Wyder, *Physica B* **218**, 213 (1996).
 33. A. Pushp, C. V. Parker, A. N. Pasuparty et al., *Science* **324**, 1689 (2009).
 34. T. Kondo, R. Khasanov, T. Takeuchi, J. Schmalian, and A. Kaminski, *Nature* **457**, 296 (2009).
 35. D. N. Basov and A. V. Chubukov, *Nature Phys.* **7**, 272 (2011).