

УДК 537.312.62

П. КОНСИН, Н. КРИСТОФЕЛЬ, Т. ЭРД

О ВОЗМОЖНОСТИ ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОГО МЕЖЗОННОГО МЕХАНИЗМА ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ

(Представил В. Хижняков)

Предложен возможный механизм высокотемпературной сверхпроводимости, основанный на электрон-фононном взаимодействии перекрывающихся дырочных зон проводимости.

Пионерской относительно получения высокотемпературной сверхпроводимости была работа К. А. Мюллера и Я. Г. Беднорца [1] на системах типа $(\text{Ba}, \text{La})_2\text{CuO}_4$. Дальнейшее повышение температуры сверхпроводящего перехода (T_c) в район 100 К достигнуто в классе систем $\text{Y}_1\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ [2, 3]. Несмотря на дальнейший и, видимо, значительный прогресс в получении все более высокотемпературной сверхпроводимости, в данном сообщении мы будем ориентироваться лишь на два упомянутых класса соединений. Это связано с основной целью нашей работы — предложить один из возможных механизмов высокотемпературной сверхпроводимости, основываясь на особенностях электронного спектра данных систем. Расчеты одноэлектронного энергетического спектра для La_2CuO_4 выполнены в [4–7], а для $\text{Y}_1\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ в [8–10].

Выяснение механизма высокотемпературной сверхпроводимости — задача очевидных интереса и значимости, и ей посвящено уже большое число разнообразных по физическому содержанию и различных по глубине работ. Возможности традиционного механизма БКШ были, по видимому, наиболее объективно оценены в этом аспекте в [11], не позволяя выйти в область с $T_c > 40$ К. Поэтому большинство исследователей склонны к рассмотрению принципиально новых механизмов с различными электронными (нефононными) возбуждениями в качестве посредников сверхпроводящего спаривания, или вносящих тем или иным приемом шкалу электронных энергий как затравочную при определении T_c . В качестве иллюстративной (но достаточно случайной) выборки можно указать на работы [12–23]. Несмотря на обилие оптимистических оценок относительно величины T_c , вопрос о природе высокотемпературной сверхпроводимости к моменту написания настоящей заметки полностью не решен.

Нам представляется, что способность к высокотемпературной сверхпроводимости должна быть связана с некоторыми характерными свойствами электронного энергетического спектра соответствующих материалов. При этом в первую очередь внимание следует обратить на валентные зоны (дырочные зоны проводимости), так как экспериментально установлено, что сверхпроводимость в обсуждаемых материалах обязана носителям с положительным знаком заряда [24, 25]. В этом контексте сразу выясняется, что незаполненная часть «валентной» зоны (со спектром двухмерного типа генеалогически определяемым $3d_{x^2-y^2}$ -орбиталями Си и $2p_{x,y}$ орбиталями О) сконцентрирована вокруг

X-точки зоны Бриллюэна в La_2CuO_4 и S-точки в $\text{Y}_1\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$. При этом имеет место перекрывание нескольких зон. Грубо говоря, максимум более низкой зоны лежит под максимумом верхней, а поверхность Ферми проходит, практически, по потолку нижней зоны в «нелегированном» соединении (La_2CuO_4 без примеси Ba или $\text{Y}_1\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ с $\delta=0$), которое еще не показывает свойства сверхпроводника. В этой связи встает вопрос о возможной роли межзонного электрон-фононного взаимодействия как причины сверхпроводящего спаривания. Это, конечно, означает отход от традиционной схемы БКШ, оперирующей с эффективным электронным притяжением в пределах одной зоны. В схеме БКШ соответственно появляется фононный масштаб энергий для обеспечения нужного знака взаимодействия. В случае же межзонного электрон-фононного взаимодействия снимается жесткое требование относительно знака взаимодействия и соответственно могут «рабо-

тать» значительные участки \vec{k} -пространства, т. е. появляется электронный масштаб энергий. О возможной роли нескольких зон говорит также то, что в ряде случаев в эксперименте наблюдаются две сверхпроводящие щели [26].

Кроме того, о возможной роли межзонного электрон-фононного взаимодействия можно вспомнить и в связи с вибронной теорией сегнетоэлектричества [27, 28]. Высокотемпературные сверхпроводники в известной мере родственны соединениям SrTiO_3 и $(\text{Ba}, \text{Bi})\text{PbO}_3$ [29], являющимися одновременно сегнетоэлектриками и родоначальниками ряда веществ, исследование которых привело к резко возрастающей зависимости обнаруженных T_c от времени. В то время как внутризонные электрон-фононные взаимодействия в системах низкой размерности могут привести к пайерлсовскому переходу, межзонное электрон-фононное взаимодействие может привести к структурным фазовым переходам типа сегнетоэлектрических. «Сегнетоэлектрическая тенденция» проявляется и у высокотемпературных сверхпроводников, в частности, у La_2CuO_4 имеется структурный переход из тетрагональной (несверхпроводящей) фазы в орторомбическую, причем наблюдаема и соответствующая мягкая мода [30].

Отметим, что электрон-фононный механизм сверхпроводимости в связи с участием нескольких зон уже затрагивался в литературе: [31] (несколько зон); [32] (несколько долин); [33] (зона и локальные состояния).

Начнем с того, что выпишем гамильтониан, получающийся путем обычной фреиховской процедуры введения эффективного, обусловленного электрон-фононной связью взаимодействия носителей многозонной модели. В целях простоты опускаем вклады, обусловленные внутризонным взаимодействием и частью межзонного взаимодействия, формирующего пары на разных зонах. В итоге сохраняется межзонное взаимодействие с «однозонными» парами и гамильтониан имеет вид

$$H = \sum_{\sigma, k, s} [\varepsilon_{\sigma}(\vec{k}) - \mu] a_{\sigma k s}^{\dagger} a_{\sigma k s} + 2 \sum_{\sigma, \sigma'}' \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} W_{\sigma\sigma'}(\vec{k}, \vec{k}') a_{\sigma k \uparrow}^{\dagger} a_{\sigma -k \downarrow}^{\dagger} a_{\sigma' -k' \downarrow} a_{\sigma' k' \uparrow}. \quad (1)$$

Здесь операторы $a_{\sigma k s}$ относятся к уничтожению элементарных возбуждений в валентных зонах с энергиями $\varepsilon_{\sigma}(\vec{k})$, μ — химический потенциал. Константы эффективного межзонного взаимодействия элемен-

тарных возбуждений определены через коэффициенты линейного межзонного электрон-фононного взаимодействия $V_{\sigma\sigma'}$ и фононные частоты $\omega_{\vec{k}}$ следующим образом

$$W_{\sigma\sigma'}(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{|V_{\sigma\sigma'}(\vec{k} - \vec{k}')|^2 \hbar \omega_{\vec{k}-\vec{k}'}}{[\varepsilon_{\sigma}(\vec{k}) - \varepsilon_{\sigma'}(\vec{k}')]^2 - (\hbar \omega_{\vec{k}-\vec{k}'})^2}. \quad (2)$$

Взаимодействие, связанное с (2), описывает под поверхностью Ферми рассеяние пар дырок и над поверхностью Ферми пар электронов из одной зоны в другую. В отличие от куперовских пар активные волновые векторы не ограничены здесь узкой областью вокруг поверхности Ферми.

Далее для упрощенной интерполяции будет рассматриваться двухзонная модель с законами дисперсии типа ($m_{1,2} > 0$)

$$\begin{aligned} \varepsilon_1(\vec{k}) &= -\frac{\hbar^2}{2m_1} (k_x^2 + k_y^2) \\ \varepsilon_2(\vec{k}) &= -E_0 - \frac{\hbar^2}{2m_2} (k_x^2 + k_y^2), \end{aligned} \quad (3)$$

где \vec{k} — отсчитывается от соответствующей (X; S) симметричной точки зоны Бриллюэна и полагается, что $m_2 > m_1$, т. е. зона тяжелых дырок лежит глубже. Истинный электронный спектр высокотемпературных сверхпроводников моделируется при этом даже в актуальной области весьма грубо, но это не имеет здесь особого значения. Плотности состояний для двумерного спектра (3) можно записать в виде $\rho_{1,2} = -\frac{vk_z m_{1,2}}{2\pi^2 \hbar^2} n$, где v — объем элементарной ячейки, $k_z \simeq \pi/a_z$, а n — число эквивалентных долин.

Гамильтониан (1) можно диагонализировать четырехпараметрическим преобразованием Боголюбова. Для двух щелевых параметров порядка

$$\begin{aligned} \Delta_{1\vec{k}} &= -2 \sum_{\vec{k}'} W_{12}(\vec{k}, \vec{k}') \langle a_{2-\vec{k}'\downarrow} a_{2\vec{k}'\uparrow} \rangle \\ \Delta_{2\vec{k}} &= 2 \sum_{\vec{k}'} W_{21}(\vec{k}, \vec{k}') \langle a_{1-\vec{k}'\downarrow} a_{1\vec{k}'\uparrow} \rangle, \end{aligned} \quad (4)$$

связанных с аномальными внутризонными средними, индуцируемыми взаимно межзонной связью получается система уравнений

$$\begin{aligned} \Delta_{1\vec{k}} &= \sum_{\vec{k}'} W_{12}(\vec{k}, \vec{k}') \Delta_{2\vec{k}'} \frac{(1 - 2f_2(\vec{k}'))}{\{[\varepsilon_2(\vec{k}') - \mu]^2 + \Delta_{2\vec{k}'}^2\}^{1/2}} \\ \Delta_{2\vec{k}} &= \sum_{\vec{k}'} W_{21}(\vec{k}, \vec{k}') \Delta_{1\vec{k}'} \frac{(1 - 2f_1(\vec{k}'))}{\{[\varepsilon_1(\vec{k}') - \mu]^2 + \Delta_{1\vec{k}'}^2\}^{1/2}}. \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь $f_{1,2}$ — фермиевские функции распределения (ср. [31]). Рассмотрим в дальнейшем случай, когда $-E_0 < \mu < 0$, т. е. химический потенциал лежит над максимумом зоны тяжелых дырок в пределах первой

зоны. Тем самым исключаются корреляции между электронами в качестве механизма сверхпроводимости (W) в данной модели и дальнейшее основано на межзонном взаимодействии дырок.

Сделаем обычное (в данном случае, видимо, еще менее обоснованное, чем в БКШ-теории) предположение, что $W(\vec{k}, \vec{k}')$ является константой в области энергии от $\mu = -\zeta$ до энергии обрезания E_c . Понятие и фиксация последней требует специального обсуждения, что достаточно сложно. Физически E_c должно определяться энергией, при которой скорость дырок становится столь большой, что за время жизни они успевают разлететься на расстояние большее корреляционной длины. На основании данных расчетов [4-10] можно оценить порядок $E_c - \zeta \simeq 1$ эВ.

Анализ показывает, что системе (5) можно удовлетворить при положительном значении W . Это является характерным преимуществом межзонной модели.

Оценим температуру сверхпроводящего фазового перехода. В указанных приближениях из (5) получим систему

$$\begin{aligned}\beta &= -W_{Q_2} \int_{\zeta - E_0}^{\zeta - E_c} \frac{dx}{x} \operatorname{th} \frac{x}{2k_B T_c} \\ \beta^{-1} &= -W_{Q_1} \int_0^{\zeta - E_c} \frac{dx}{x} \operatorname{th} \frac{x}{2k_B T_c},\end{aligned}\quad (6)$$

где β — предел отношения щелей при их стремлении к нулю, если $T \rightarrow T_c$.

Из анализа системы (6) следует, что с $\zeta \rightarrow E_0$ температура перехода T_c существенно повышается. Отсюда вытекает, что для возникновения высокотемпературной сверхпроводимости требуется подходящий сдвиг уровня Ферми, достигаемый на опыте легированием La_2CuO_4 примесями типа Ва [4, 5, 11] и в $\text{Y}_1\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$, видимо, созданием вакансий кислорода (ср. [29]). Далее положим ζ настолько сдвинутым относительно E_0 , что в первом уравнении (6) можно гиперболический тангенс считать мало отличающимся от минус единицы. Исключая затем β , получим оценку температуры перехода

$$k_B T_c = 1,14 (E_c - \zeta) e^{-1/\lambda}, \quad (7)$$

где

$$\lambda = W^2_{Q_1 Q_2} \ln \frac{E_c - \zeta}{E_0 - \zeta}. \quad (8)$$

Эта формула напоминает по структуре в некоторой мере результат БКШ. Но масштаб обрезаемых энергий здесь электронный. Межзонная константа взаимодействия имеет порядок $W \sim V^2 \hbar \omega_0 [\bar{E}^2 - (\hbar \omega_0)^2]^{-1}$. Учитывая обычный порядок линейного электрон-фоонного взаимодействия в ионных соединениях, для V можно взять 0,45 эВ. Величина $\hbar \omega_0$ отвечает энергии деформационных колебаний кислородо-медной связи и, согласно [11], $\hbar \omega_0 \sim 0,1$ эВ. Для произведения плотностей состояний реальна оценка $Q_1 Q_2 \approx 8$ (эВ)⁻² ср. [8] и $\bar{E} \approx 0,4$ эВ. Находим $W \approx 0,135$ эВ. Учтя еще, что $\ln \frac{E_c - \zeta}{E_0 - \zeta} \approx 2$, получаем в итоге $e^{-1/\lambda} \sim 0,03$. Это означает, что поскольку $(E_c - \zeta) \sim 1$ эВ, то рассматриваемый механизм может обеспечить температуры сверхпроводящего перехода вплоть до комнатных,

Следует заметить, что формула (7) содержит другого типа источник изотопического эффекта в сравнении с БКШ-теорией, несмотря на электрон-фононную природу исходного взаимодействия. В (7) массы атомов входят непосредственно через W , а в теории БКШ изотопический эффект происходит от характеристической энергии фононного порядка, стоящей на месте ($E_c - \xi$). Грубая оценка на основании (2), (7) и (8) дает при изменении массы ячейки на 1% сдвиг T_c порядка 5%. Экспериментально в высокотемпературных сверхпроводниках изотопический эффект в T_c , хотя и наблюдается, но он значительно слабее, чем в системах, описываемых обычной БКШ-теорией [34, 35]. Малость изотопического эффекта в высокотемпературных сверхпроводниках может быть связана и с нефононным вкладом в W от собственно-электронных межзонных корреляций носителей.

Число наблюдаемых щелей в спектре определяется в настоящей схеме числом электронных зон, пересекающих уровень Ферми. Теория допускает разброс значений $2\Delta_{1,2}(T=0)/k_B T_c$ в интервале 1—10 при разумных ограничениях на $q_{1,2}$, W .

Естественно, подход данного сообщения носит качественный характер и количественно груб. В частности, мы игнорировали кулоновское отталкивание дырок. Уточнению подлежит также вклад отдельных колебательных ветвей и межзонное электрон-фононное взаимодействие.

Авторы благодарны В. Хижнякову и А. Пищеву за полезные замечания.

ЛИТЕРАТУРА

1. Bednorz, J. G., Müller, K. A. // Z. Phys. B, 1986, **64**, № 2, 189—193.
2. Wu, M. K., et al. // Phys. Rev. Lett., 1987, **58**, № 9, 908—910.
3. Ovshinski, S. R. et al. // Phys. Rev. Lett., 1987, **58**, № 24, 2579—2581.
4. Mattheiss, L. F. // Phys. Rev. Lett., 1987, **58**, № 10, 1028—1030.
5. Yu, J., Freeman, A. J., Xu, J.-H. // Phys. Rev. Lett., 1987, **58**, № 10, 1035—1037.
6. Takegahara, K., Harima, H., Yanase, A. // Jap. J. Appl. Phys., 1987, **26**, № 4, L352—L354.
7. Oguchi, T. // Jap. J. Appl. Phys., 1987, **26**, № 4, L417—L419.
8. Massidda, S., Yu, J., Freeman, A. J., Koelling, D. D. // Phys. Lett. A, 1987, **122**, № 3, 4, 198—202.
9. Yu, J., Massidda, S., Freeman, A. J., Koelling, D. D. // Phys. Lett. A, 1987, **122**, № 3, 4, 203—208.
10. Ching, W. Y. et al. // Phys. Rev. Lett., 1987, **59**, № 12, 1333—1336.
11. Weber, W. // Phys. Rev. Lett., 1987, **58**, № 13, 1371—1374.
12. Kopaeв, Yu. V., Rusinov, A. I. // Phys. Lett. A, 1987, **121**, № 6, 300—304.
13. Plakida, N. M., Aksenov, V. L., Drechler, S. L. Preprint JINR, E17—87—198, Dubna, 1987.
14. Кулик И. О. // ФНТ, 1987, **13**, № 8, 879—883.
15. Matsuura, T., Miyake, K. // Jap. J. Appl. Phys., 1987, **26**, № 4, L407—L409.
16. Fukuyama, H., Yosida, K. // Jap. J. Appl. Phys., 1987, **26**, № 4, L371—L373.
17. Kivelson, S. A., Rokhsar, D. S., Sethna, J. P. // Phys. Rev. B, 1987, **35**, № 16, 8865—8868.
18. Parmenter, R. H. // Phys. Rev. Lett., 1987, **59**, № 8, 923—925.
19. Ruckenstein, A. E., Hirschfeld, P. J., Appel, J. // Phys. Rev. B, 1987, **36**, № 1, 857—860.
20. Emery, V. J. // Phys. Rev. Lett., 1987, **58**, № 26, 2794—2797.
21. Anderson, P. W., Baskaran, G., Zou, Z., Hsu, T. // Phys. Rev. Lett., 1987, **58**, № 26, 2790—2793.
22. Ruvalds, J. // Phys. Rev. B, 1987, **35**, № 16, 8869—8872.
23. Hirsch, J. E. // Phys. Rev. B, 1987, **35**, № 16, 8726—8729.
24. Chen, J. T., McEwan, C. J., Wenger, L. E., Logothetis, E. M. // Phys. Rev. B, 1987, **35**, № 13, 7124—7125.
25. Луцук Ч. Б. и др. // Письма в ЖЭТФ, 1987, **46**, вып. 3, 122—124.
26. Янсон И. К. и др. // ФНТ, 1987, **13**, № 5, 557—560.
27. Kristoffel, N., Kohn, P. // Ferroelectrics, 1973, **6**, 3—12; 1978, **21**, № 1—4, 477—479.

28. Берсукер И. Б., Полингер В. З. Вибронные взаимодействия в молекулах и кристаллах. М., Наука, 1983.
29. Габович А. М., Моисеев Д. П. // УФН, 1986, 150, вып. 4, 599—623.
30. Birgeneau, R. J. et al. // Phys. Rev. Lett., 1987, 59, № 12, 1329—1332.
31. Kondo, J. // Prog. Theor. Phys., 1963, 29, № 1, 1—9.
32. Батыев Э. Г., Борисюк В. А. // ЖЭТФ, 1986, 90, вып. 2, 558—568.
33. Мойжес Б. Я., Супрун С. Г. // ФТТ, 1987, 29, вып. 2, 441—448.
34. Falten, T. A. et al. // Phys. Rev. Lett., 1987, 59, № 8, 915—918.
35. Batlogg, B. et al. // Phys. Rev. Lett., 1987, 59, № 8, 912—914.

Институт физики
Академии наук Эстонской ССР

Поступила в редакцию
9/XI 1987

P. KONSIN, N. KRISTOFFEL, T. ÖRD

KÕRGETEMPERATUURILISE ÜLIJUHTIVUSE TSOONIDEVAHELISE ELEKTRON—FOONON-MEHHANISMI VÕIMALIKKUSEST

On välja pakutud kõrgetemperatuurilise ülijuhtivuse võimalik mehhanism, mis põhineb kattuvate aukjuhtivustsoonide elektron—foonon-interaktsioonil.

P. KONSIN, N. KRISTOFFEL and T. ÖRD

ON THE POSSIBILITY OF THE INTERBAND ELECTRON—PHONON MECHANISM OF HIGH-TEMPERATURE SUPERCONDUCTIVITY

A possible mechanism of high-temperature superconductivity based on the interband electron—phonon interaction of hole conductivity overlapping bands is proposed.