

УДК 537.362

## АНИЗОТРОПИЯ ПАРАМЕТРОВ ПОРЯДКА И СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ ВТСП

Н. В. Аншукова, А. И. Головашкин, Л. И. Иванова, А. П. Русаков

*В рамках модели сверхструктурного кислородного упорядочения в дополнение к антиферромагнитному упорядочению ионов меди показан механизм возникновения Пайерлсовской щели  $\Delta^*$ . Для сверхпроводящей ( $\Delta$ ) и диэлектрической ( $\Delta^*$ ) щелей получены зависимости от направления в плоскости  $\text{CuO}_2$ , хорошо согласующиеся с экспериментом даже в случае  $s$ -спаривания. Сделан вывод о том, что Пайерлсовская щель  $\Delta^*$  является наблюдаемой на эксперименте псевдощелью.*

В настоящее время в литературе активно обсуждается вопрос об анизотропии сверхпроводящего параметра порядка  $\Delta$  и псевдощели  $\Delta^*$ . Экспериментально обнаружено, что как  $\Delta$ , так и  $\Delta^*$  имеют  $V$ -образную зависимость от волнового вектора  $k$  [1 – 3]. Такую зависимость связывают с  $d$ -типом параметра порядка. Далее будет показано, что в рамках модели кислородного сверхструктурного упорядочения [4 – 6]  $V$ -образная зависимость  $\Delta$  и  $\Delta^*$  от волнового вектора  $k$  может быть получена при обычном  $s$ -типе спаривания.

Ранее нами было показано [4 – 6], что в плоскостях  $\text{CuO}_2$  в диэлектрической фазе высокотемпературных сверхпроводящих (ВТСП) систем ионы кислорода существуют в двух зарядовых состояниях:  $O^{-2}$  и  $O^{-1.5}$ . Это соответствует ионным связям  $\text{Cu}-O^{-2}$  и ковалентным связям  $\text{Cu}-O^{-1.5}$ . Упорядочение таких связей, с учетом антиферромагнитного упорядочения ионов меди, приводит к удвоению периодов решетки в плоскости  $\text{CuO}_2$  (это эквивалентно возникновению волны зарядовой плотности, – ВЗП, – в подрешетке ионов кислорода). В соседних плоскостях  $\text{CuO}_2$  упорядочение осуществляется в перпендикулярных направлениях, что приводит к удвоению периода решетки и вдоль оси "с". В простейшем случае  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  получается новая элементарная ячейка,

которая помимо 28 ионов  $O^{-2}$  содержит 4 иона  $O^{-1.5}$ . Эти 4 иона приводят к образованию узкой ( $\sim 0.3$  эВ) кислородной зоны, расположенной выше потолка нижней Хаббардовской зоны и отделенной от верхней Хаббардовской зоны диэлектрической щелью  $E_g \approx 2$  эВ. Шесть валентных электронов от четырех ионов кислорода  $O^{-1.5}$  заполняют три первые зоны Бриллюэна для плоской квазидвумерной решетки, включающей две плоскости  $CuO_2$ .

При дырочном легировании возникают дырочные носители заряда у потолка узкой кислородной зоны. При этом начинает опустошаться от электронов третья зона Бриллюэна. Система разбивается на диэлектрические и металлические полосы (так называемые "страйпы"), т.е. становится двухфазной. При оптимальном легировании остается одна металлическая фаза [6].

Расчеты электронной зонной структуры в рамках метода сильной связи дают дисперсию  $E(\mathbf{k})$  верхней валентной зоны, которую можно аппроксимировать формулой типа [7 – 9]:

$$E(\mathbf{k}) = -2t(\cos k_x + \cos k_y) - 4t' \cos k_x \cos k_y - \\ - 2t''(\cos 2k_x + \cos 2k_y) - t_{\perp}(\cos k_x - \cos k_y)^2/4, \quad (1)$$

где  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$  – безразмерный волновой вектор для квазидвумерной обратной решетки, нормированный на период решетки,  $t, t', t''$  – интегралы перекрытия с ближайшими, вторыми и третьими соседними ионами соответственно,  $t_{\perp}$  – интеграл перекрытия для взаимодействия между соседними плоскостями  $CuO_2$ . Расчеты по этой формуле приводят к форме поверхности Ферми, показанной на рис. 1. Эта форма получена для параметров  $t = 0.5$  эВ,  $t'/t = -0.3$ ,  $t''/t = 0.2$ ,  $t_{\perp} = 0.15$  эВ. Такая форма поверхности Ферми согласуется с экспериментальными данными, полученными методом ARPES [10, 11].

Используя указанные значения интегралов перекрытия, можно оценить дисперсию  $E(\mathbf{k})$  для разных направлений.

Из рис. 1 видно, что из-за образования конгруэнтных участков поверхности Ферми и нестинга при половинном (по импульсу) заполнении состояний вдоль направлений [100] или [010] период решетки может еще раз удвоиться в этих направлениях. Для них возникает новый вектор обратной решетки  $\mathbf{G}_4 = \mathbf{G}/4$ , показанный на рис. 1, который и является вектором нестинга. Здесь  $\mathbf{G} = (2\pi/a)[100]$  – вектор обратной решетки для исходной прямой решетки без удвоения. Как хорошо известно, нестинг приводит к Пайерлсовской неустойчивости с образованием диэлектрической щели  $\Delta^*$ . Дисперсия

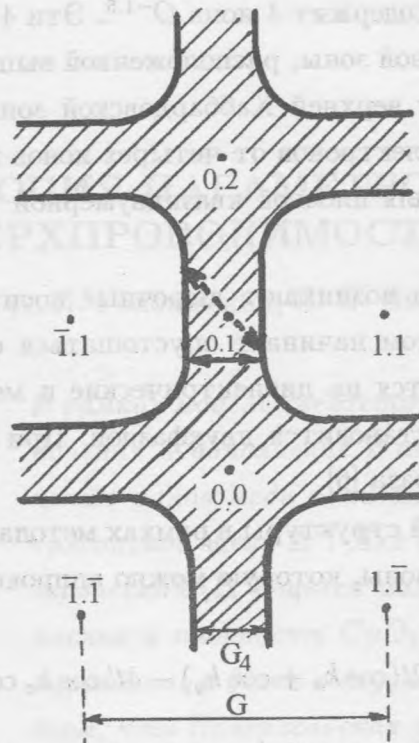


Рис. 1. Поверхность Ферми (сплошные линии) для случая  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$  при оптимальном легировании ( $x \approx 0.15$ ). Указаны векторы обратной решетки  $G$  и  $G_4 = G/4$ , где  $G = (2\pi/a)[100]$ . Вектор  $G_4$  связывает плоские конгруэнтные участки поверхности Ферми (жирная стрелка), вектор  $G_4 + Q$  связывает состояния на поверхности Ферми, симметричные относительно точки  $(0, 1)$  (пунктирная стрелка).

$E(k)$ , полученная по формуле (1) для разных направлений, с учетом возникновения Пайерлсовской щели  $\Delta^*$ , показана на рис. 2.

Как видно из рис. 1 точку  $(0, 1)$  можно рассматривать как центр симметрии. Спаривание носителей, находящихся на поверхности Ферми и связанных векторами  $G_4 + Q$ , проходящими через точку  $(0, 1)$ , дает суммарный нулевой импульс и может быть сверхпроводящим. Один из таких векторов показан на рис. 1 пунктирной стрелкой. Такие векторы могут быть волновыми векторами фононов. Таким образом, состояния на поверхности Ферми, удовлетворяющие условиям нестинга и симметричные относительно точки  $(0, 1)$ , при достаточно низкой температуре испытывают одновременно два типа взаимодействия: одно, приводящее к диэлектрической Пайерлсовской щели  $\Delta^*$ , и другое, приводящее к сверхпроводящей щели  $\Delta_s$ . Известно, что спектр одночастичных

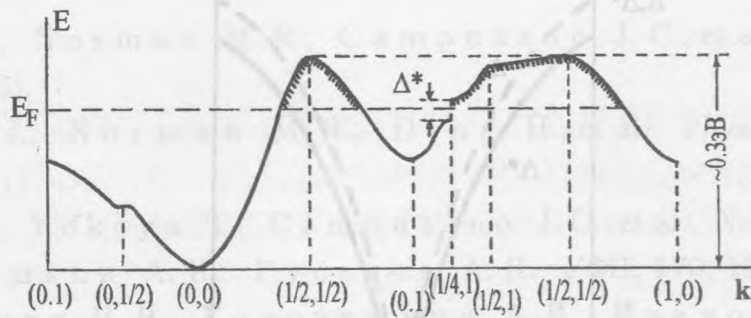


Рис. 2. Схематическая кривая дисперсии  $E(\mathbf{k})$ , полученная методом сильной связи, для верхней валентной зоны вдоль некоторых симметричных направлений зон Бриллюэна. Случай оптимального легирования. Заштрихованы состояния, заполненные дырочными носителями.

возбуждений  $E(\mathbf{k})$  в таких случаях описывается формулой [12, 13]:

$$E(\mathbf{k}) = [(k^2/2m + \Delta^*)^2 + \Delta_s^2]^{1/2}, \quad (2)$$

где  $\mathbf{k}$  – волновой вектор электрона для состояний вблизи  $E_F$ ,  $m$  – масса электрона. При этом возникает общая щель, ширина которой зависит от температуры  $T$  как

$$\Delta(T) = \sqrt{(\Delta^*)^2 + \Delta_s^2}. \quad (3)$$

При низкой температуре ( $T < T_c$ ) величина  $\Delta$  превышает  $\Delta_s$ , и материал является сверхпроводящим. При  $T > T_c$  величина  $\Delta_s(T) = 0$  и  $\Delta(T) = \Delta^*$ . Из формулы (3) видно, что даже при обычном фононном механизме сверхпроводимости при учете Пайерлсовского спаривания величина  $\Delta$  (и  $T_c$ ) может быть значительно выше, чем без учета такого спаривания. Такой вывод соответствует экспериментальным данным, полученным в туннельных измерениях [14 – 16].

Условия нестинга нарушаются в окрестности точек  $(\pm 1/4, \pm 1/4)$  и Пайерлсовская щель  $\Delta^*$  вблизи этих точек не возникает (см. рис. 1 и 2). В результате зависимость  $\Delta^*$  от направления в  $\mathbf{k}$ -пространстве имеет вид, показанный на рис. 3 сплошной линией. На этом рисунке указано примерное положение точки, где  $\Delta^* = 0$ , поскольку вблизи этой точки находятся участки всех трех зон Бриллюэна, что усложняет расчет точного вида дисперсии.

С учетом выражения (3) зависимость ширины сверхпроводящей щели  $\Delta(T)$  от направления при  $T < T_c$  также показана на рис. 3 пунктиром. Видно, что зависимости

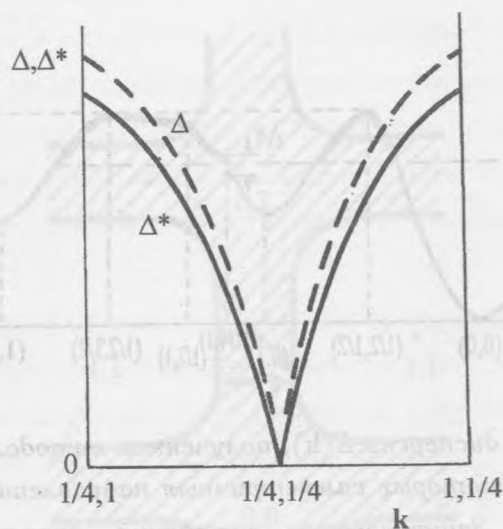


Рис. 3. Зависимость величины сверхпроводящей щели  $\Delta$  (пунктир) и Пайерлсовской щели  $\Delta^*$  (сплошные линии) от направления в кристалле.

$\Delta^*$  и  $\Delta$  от направления подобны. Такие зависимости в рамках модели получаются даже при  $s$ -спаривании, хотя они имитируют зависимости, соответствующие  $d$ -спариванию. Именно такие зависимости для ВТСП наблюдаются экспериментально, например, методом ARPES для сверхпроводящей щели  $\Delta$  [1, 2] и псевдощели  $\Delta^*$  [3].

Туннельные измерения температурной зависимости щели (см., например, [14 – 16]) также подтверждают наличие при  $T > T_c$  псевдощели  $\Delta^*$  и сверхпроводящей щели  $\Delta(T)$  при  $T < T_c$ , согласующейся с формулой (3). Качественное согласие экспериментальных данных с рассмотренной выше моделью ведет к заключению, что Пайерлсовская щель  $\Delta^*$  является псевдощелью, наблюдаемой экспериментально.

Таким образом, в рамках развиваемой модели для сверхпроводящей ( $\Delta$ ) и диэлектрической ( $\Delta^*$ ) щелей получаются зависимости от направления в плоскости  $(k_x, k_y)$ , хорошо согласующиеся с экспериментом даже в случае  $s$ -спаривания. Высокие критические температуры ВТСП связываются с квазидвумерностью и сосуществованием диэлектрического и сверхпроводящего спаривания.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект N 01-02-16395) и Научного совета ГНТП "Актуальные направления в физике конденсированных сред" (подпрограмма "Сверхпроводимость").

## ЛИТЕРАТУРА

- [1] Ding H., Norman M. R., Sampruzano J. C., et al. Phys. Rev., **B50**, R9678 (1996).
- [2] Mesot J., Norman M. R., Ding H., et al. Phys. Rev. Lett., **83**, 840 (1999).
- [3] Ding H., Yokoуа T., Sampruzano J. C., et al. Nature, **382**, 51 (1996).
- [4] Головашкин А. И., Русаков А. П. УФН, **170**, 192 (2000).
- [5] Аншукова Н. В., Головашкин А. И., Иванова Л. И., Русаков А. П. ФТТ, **44**, 769 (2002).
- [6] Аншукова Н. В., Головашкин А. И., Иванова Л. И., Русаков А. П. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 7, 34 (2002).
- [7] Liechtenstein A. I., Gunnarsson O., Andersen O. K., Martin R. M. Phys. Rev., **B54**, 12505 (1996).
- [8] Sushkov O. P., Sawatzky G. A., Eder R., Eskes H. Phys. Rev., **B56**, 11769 (1997).
- [9] Mishonov T., Penev E. J. J. Phys.: Condens. Matter, **12**, 143 (2000).
- [10] Ino A., Kim C., Mizokawa T., et al. J. Phys. Soc. Japan, **68**, 1496 (1999).
- [11] Ino A., Kim C., Nakamura M., et al. Phys. Rev., **B62**, 4137 (2000).
- [12] Булаевский Л. Н., Гинзбург В. Л., Жарков Г. Ф., и др. Проблема высокотемпературной сверхпроводимости. Ред. В. Л. Гинзбург, Д. А. Киржниц. М., Наука, 1977.
- [13] Markiewicz R. S., Kuskо C., Kidambi V. Phys. Rev., **B60**, 627 (1999).
- [14] Krasnov V. M., Yurgens A., Winkler D., et al. Phys. Rev. Lett., **84**, 5860 (2000).
- [15] Krasnov V. M. Phys. Rev., **B65**, 140504(R) (2002).
- [16] Пономарев Я. Г. УФН, **172**, 705 (2002).

Поступила в редакцию 23 августа 2002 г.