Физика низких температур, 1995, т. 21, № 4, с. 421–430 УДК 537.312.62; 539.14

Электронный спектр и критическая температура высокотемпературных сверхпроводников с несколькими купратными слоями в ячейке

Э. В. Горбар, В. М. Локтев, С. Г. Шарапов

Институт теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова НАН Украины, Украина, 252143, г. Киев, ул. Метрологическая, 14-б

Статья поступила в редакцию 15 ноября 1994 г.

Исходя из модельного микроскопического лагранжиана многослойной системы ферми-частиц с притяжением получены уравнения для определения сверхпроводящих щелей, критической температуры T_c и химического потенциала как функций концентрации носителей и числа слоев мультислойного металла. Показано, что по мере заполнения зон свободных носителей на соответствующих зависимостях возможно появление участков с достаточно резким возрастанием величины щелей и T_c по мере увеличения плотности носителей в системе. При этом в системе сосуществуют куперовские и локальные пары носителей, что является причиной немонотонного роста T_c многослойного проводника; последнее наблюдается, например, в бислойном соединении $YBa_2Cu_3O_{6+\delta}$ при изменении δ.

Виходячи із модельного мікроскопічного лагранжіана багатошарової системи фермі-частинок з притяганням одержано рівняння для визначення надпровідних щілин, критичної температури T_c і хімічного потенціалу як функцій концентрації носіїв і числа шарів мультишарового металу. Показано, що по мірі заповнення зон вільних носіїв на відповідних залежностях можлива поява ділянок с достатньо різким зростанням величини щілин і T_c по мірі зростання густини носіїв в системі. При цьому в системі співіснують куперовські і локальні пари носіїв, що є причиною немонотонного зростання T_c багатошарового провідника; останнє спостерігається, наприклад, в бішаруватій сполуці $YBa_2Cu_3O_{6+\delta}$ при зміні δ.

Введение

Задача о формировании электронного спектра высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) и его связи с их кристаллическим строением остается в центре внимания исследователей с момента открытия Беднорцем и Мюллером системы $La_{2-x}M_xCuO_4$ ($M \equiv$ Sr, Ba), обладающей критической температурой $T_c \approx 40$ K и содержащей один купратный слой CuO_2 в ячейке [1]. Последующий синтез ВТСП соединения $YBa_2Cu_3O_{6+\delta}$ ($0 \le \delta \le 1$), или 1–2–3, имеющего бислойную структуру* и $T_c \approx 90$ K, убедительно продемонстрировал возможную связь последней с кристаллической структурой, в частности, числом N_{pl} купратных слоев в ячейке, что нашло отражение в известном «правиле Чу» (скорее, предположении), согласно которому каждый такой слой «вносит» в величину T_c около 30–40 K [2]. Интенсивные экспериментальные исследования и создание целых гомологических семейств ВТСП состава A–M–Ca–Cu–O, где A ≡ Bi, Tl, Hg ; M ≡ Ba, Sr и число слоев CuO_2 на ячейку $1 \le N_{pl} \le 6$ [3–14], показали, что если быть точным, то это правило не соблюдается. Тем не менее T_c испытывает заметный рост для малых $N_{pl} = 1, 2, 3$ с выходом на насыщение (и даже некоторое уменьшение), когда $N_{pl} = 5, 6$. Несмотря на то что зависимости $T_c(N_{pl})$ посвящен ряд публикаций, она не нашла своего последовательного объяснения. Так, с этой целью использовалась модель резонирующих валентных связей [15], которая сама не имеет надежного экспериментального подтверждения. В работах [16,17] предпринималась попытка описать функцию $T_c(N_{pl})$ на основе теории БКШ и показано, что она достигает насыщения лишь при $N_{pl} \gtrsim 10$. Прямо противоположный подход, базирующийся на идее о локальных бозонах и трактовке T_c как температуры их квазидвумерной бозе-конденса-

* Вообще говоря, в ячейке 1–2–3 имеются три купратных слоя, но считается общепринятым, что один из них, а именно CuO_δ, служит, главным образом, поставщиком носителей в слои CuO_2 по мере насыщения этого соединения кислородом.

© Э. В. Горбар, В. М. Локтев, С. Г. Шарапов, 1995

ции в слоях конечного (из-за гранулярности структуры керамической среды) размера, был развит в работе [18]. Наконец, упомянем работу [19], в которой наблюдаемое поведение $T_c(N_{pl})$ связывалось с сильно анизотропным поведением СП одномерного конденсата бисолитонов.

Рассматривая T_c как функцию N_{pl}, нельзя не сказать о другой (по-видимому, связанной с ней) наблюдающейся закономерности — немонотонной зависимости T_c от плотности N_f фермионов, особенно ярко проявляющей себя в бислойном купрате 1–2–3 [20], где путем изменения содержания кислорода в базисных плоскостях сравнительно легко управлять процессом увеличения (либо уменьшения) концентрации $n_f = N_f/N_{pl}$ подвижных носителей в токонесущих слоях CuO_2, ибо $n_f \sim \delta$. Учитывая при этом, что отмеченное изменение может соответствовать и, например, области малых значений n_f, когда представление о конденсате с дальними двухчастичными корреляциями еще не адекватно отражает свойства системы ниже T_c, и он состоит из локальных (а не куперовских) пар с химическим потенциалом μ составляющих их фермионов, заведомо не равным фермиевской энергии ε_F [21,22], применение подхода БКШ—Боголюбова к описанию зависимости $T_c(n_f)$ [23–25] нельзя, вообще говоря, признать вполне обоснованным.

Настоящая работа ставит целью изучить, как блочное строение кристаллических решеток ВТСП может влиять на спектр их СП фазы и T_c, а также зависимость последних от величины n_f. Будет использован и обобщен подход, предложенный в [22,26], где методом Хаббарда—Стратоновича получены самосогласованные уравнения для щели Δ и μ, допускающие точное решение в случае монослоя ($N_{pl} = 1$). Это решение показало (см. также [27]), что как Δ, так и μ суть монотонные функции n_f, причем имеется конечная область концентраций, где $\mu < 0$, т.е. все свободные носители оказываются попарно связанными.

В блочной структуре появляются межплоскостные эффекты — одночастичное туннелирование и спаривание. При этом СП конденсат оказывается суперпозицией как внутри-, так и межслоевых пар, которые, что более необычно, даже для не очень малых n_f могут быть разной природы — куперовскими и локальными. Появление последних благодаря увеличению n_f служит причиной «ступенчатого» поведения $T_c(n_f)$, причем число и выраженность областей немонотонного поведения уменьшаются по мере роста N_{pl}. Полученные общие формулы для щелей и T_c подробно анализируются на примерах $N_{pl} = 2$ и 3.

Модель

Семейства сэндвичевых ВТСП принято обозначать символически: $A{-}n_A n_M n_{Ca} n_{Cu}$, где n_A, n_M, $n_{Ca} = n_{Cu} - 1$ и n_{Cu} ($\equiv N_{pl}$) — количество слоев соответственно A–O, M–O, Ca–O и CuO_2 в элементарной ячейке (кислородный индекс обычно опускается, так как он может быть легко установлен из условия электронейтральности; к примеру, Tl–2234 означает соединение $Tl_2M_2Ca_3Cu_4O_{12}$). При этом N_{pl}-слойные купратные «мультиплеты», содержащие также плоскости Ca–O*, окружены так называемыми спейсорами или, что то же, блоками из того или иного количества слоев A–O и M–O. Изменение стехиометрического состава последних (преимущественно по кислороду) вводит в эти, исходно непроводящие соединения носители так, что металлическими становятся, главным образом, слои CuO_2; спейсоры же, будучи для них донорами подвижных зарядов, играют роль почти изоляционных прослоек, что обусловливает чрезвычайно большую анизотропию (вдоль и поперек слоев) проводящих свойств купратных ВТСП.

Модель, в полной мере отражающая особенности кристаллической и электронной структур таких ВТСП, была бы слишком сложной для расчетов, поэтому ниже мы примем упрощения, свойственные большинству теоретических работ: ВТСП состоит из идентичных металлических блоков, разделенных спейсорами; СП возникает в каждом N_{pl}-слойном металле независимо, так что все актуальные взаимодействия ограничены одним блоком; внутри последнего связь отлична от нуля лишь для ближайших соседних слоев.

В итоге приходим к лагранжевой функции многослойного проводника, обладающего отмеченными характеристиками:

$$L = L_0 + L_{int}, \qquad (1)$$

* Их, как нетрудно догадаться, действительно $N_{pl} - 1$, так как купратный блок — это простая последовательность плоскостей $(CuO_2)(Ca{-}O)\ldots(CuO_2)$. В этом смысле небезынтересно заметить, что соединение $CaCuO_2$ с $T_c \approx 100$ К также относится к этому общему ряду и, принято считать, отвечает значению $N_{pl} = \infty$.

где ($\hbar = 1$)

$$L_0 = \sum_{j=1}^{N_{pl}} \sum_{\sigma} \left\{ \int dr \psi_{j\sigma}^{+}(\mathrm{r}, t) \left(i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu \right) \psi_{j\sigma}(\mathrm{r}, t) + \int\int d\mathrm{r}_1 d\mathrm{r}_2 \left[\psi_{j\sigma}^{+}(\mathrm{r}_1, t) t_{jj+1}(\mathrm{r}_1 - \mathrm{r}_2) \psi_{j+1\sigma}(\mathrm{r}_2, t) + \text{э.с.} \right] \right\} \tag{2}$$

— лагранжиан свободных носителей;

$$L_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{j_1 j_2} \sum_{\sigma} \int\int d\mathrm{r}_1 d\mathrm{r}_2 \psi_{j_1\sigma}^{+}(\mathrm{r}_1, t) \psi_{j_2\bar{\sigma}}^{+}(\mathrm{r}_2, t) V_{j_1 j_2}(\mathrm{r}_1 - \mathrm{r}_2) \psi_{j_2\bar{\sigma}}(\mathrm{r}_2, t) \psi_{j_1\sigma}(\mathrm{r}_1, t) \tag{3}$$

— взаимодействие между ними. В (2), (3) приняты следующие обозначения: $\psi_{j\sigma}^{+}(\mathrm{r}, t), \psi_{j\sigma}(\mathrm{r}, t)$ — ферми-операторы частицы с эффективной массой m, спином $\sigma (\equiv -\bar{\sigma})$ и координатой $\mathrm{r} = (x, y)$ из j-го ($1 \le j \le N_{pl}$) слоя, удовлетворяющие граничному условию $\psi_{0\sigma}(\mathrm{r}, t) = \psi_{N_{pl}+1,\sigma}(\mathrm{r}, t) = 0$; $t_{jj+1}(\mathrm{r}_1 - \mathrm{r}_2)$ — константа одночастичного межслоевого туннелирования; $V_{j_1 j_2}(\mathrm{r}_1 - \mathrm{r}_2)$ — параметры внутри-($j_1 = j_2$) и межплоскостного ($j_1 \ne j_2$) взаимодействий, знаки которых выбраны так, что $V_{j_1 j_2}(\mathrm{r}_1 - \mathrm{r}_2) > 0$ отвечает притяжению носителей с противоположными спинами.

Часть лагранжиана (1), соответствующая свободным носителям, допускает диагонализацию, если ввести новые ферми-поля согласно представлению

$$\psi_{j\sigma}(\mathrm{r}, t) = \sum_{\nu=1}^{N_{pl}} u_{j\nu} \varphi_{\nu\sigma}(\mathrm{r}, t) ;$$

$$u_{j\nu} = \left(\frac{2}{N_{pl} + 1} \right)^{1/2} \sin \pi \frac{j\nu}{N_{pl} + 1} ;$$

$$\sum_{j=1}^{N_{pl}} u_{j\nu_1} u_{j\nu_2} = \delta_{\nu_1 \nu_2} ; \quad \sum_{\nu=1}^{N_{pl}} u_{j_1\nu} u_{j_2\nu} = \delta_{j_1 j_2} . \tag{4}$$

В результате лагранжиан преобразуется к простому виду

$$L_0 = \sum_{\nu=1}^{N_{pl}} \sum_{\sigma} \varphi_{\nu\sigma}^{+}(\mathrm{r}, t) \left(i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\nabla^2}{2m_\nu} + \mu_\nu \right) \varphi_{\nu\sigma}(\mathrm{r}, t) , \tag{5}$$

описывающему N_{pl}-зонный металл в приближении эффективной массы. При этом носитель в ν-ой зоне характеризуется эффективной массой $m_\nu = \{m^{-1} + \Delta m^{-1} \cos(\pi\nu/(N_{pl} + 1))\}^{-1}$ и химическим потенциалом $\mu_\nu = \mu + \varepsilon_0 \cos(\pi\nu/(N_{pl} + 1))$. Перенормировка массы и энергетическое положение каждой из зон определяются константой $t_{jj+1}(\mathrm{r})$ межслоевых перескоков так, что $\varepsilon_0 \equiv 2t_{jj+1}(0)$, а $\Delta m^{-1} \equiv a^2 \nabla^2 t_{jj+1}(\mathrm{r})|_{\mathrm{r}=0}$ (a — параметр размерности длины, связанный в этом приближении с ширинами зон соотношением $W_\nu = (2\pi m_\nu a^2)^{-1}$). Такое определение химического потенциала позволяет по знаку соответствующего μ_ν судить о характере спаривания (локальном или куперовском) в ν-ой зоне.

Взаимодействие L_{int} в новых переменных (4) принимает вид

$$L_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{\nu,\lambda=1}^{N_{pl}} \sum_{\sigma} \int d\mathrm{r} \varphi_{\lambda\sigma}^{+}(\mathrm{r}, t) \varphi_{\lambda,\bar{\sigma}}^{+}(\mathrm{r}, t) \times$$

$$\times V_{\lambda\nu} \varphi_{\nu\bar{\sigma}}(\mathrm{r}, t) \varphi_{\nu\sigma}(\mathrm{r}, t) , \tag{6}$$

где матричные элементы $V_{\lambda\nu}$ непосредственно выражаются через исходные $V_{j_1 j_2}(\mathrm{r}_1 - \mathrm{r}_2)$, в которых ниже, ради простоты, мы ограничиваемся лишь локальными их значениями $V_{j_1 j_2}(0)$, сохраняя, как говорилось, лишь два: $V_{\text{intra}} \equiv V_{jj}(0)$ и $V_{\text{inter}} \equiv V_{jj+1}(0)$. В результате выражения (5) и (6) могут рассматриваться как обобщение известной двухзонной модели СП [28,29] на случай произвольного числа зон. При этом, однако, видно, что симметрия выбранной модели (эквивалентность всех плоскостей) и характер внутри- и межслоевых взаимодействий проявляются, например, в том, что в (6) отсутствуют слагаемые, которые отвечают межзонному спариванию, вообще говоря, присутствующему в феноменологических моделях. Это, конечно, не означает, что каждая зона в обсуждаемой модели (5) и (6) ведет себя независимо, ибо перестройка вакуума (появление аномальных средних или конденсатного параметра порядка) для носителей одной из зон немедленно влечет такую же перестройку и для носителей в других зонах.

Интересуясь далее лишь низкоэнергетическим спектром лагранжиана (1), отвечающим системе с

перестроенным вакуумом, используем метод вспомогательного поля для вывода уравнений, которые самосогласованно описывают параметры порядка (щели) $\Delta_\nu \equiv \Delta_\nu(T) = \langle \varphi_{\lambda\sigma}\varphi_{\lambda\bar{\sigma}} \rangle$ и химический потенциал $\mu \equiv \mu(T)$. Соответствующие выкладки тождественны проведенным в работе [22], поэтому, опуская их, сразу приведем искомую систему уравнений ($k_B = 1$):

$$\sum_\lambda (\hat{V}^{-1})_{\lambda\nu}\Delta_\lambda - \frac{m_\nu}{4\pi}\int\limits_{-\mu_\nu}^{W_\nu-\mu_\nu}\frac{du}{\sqrt{u^2+\Delta_\nu^2}}\,\mathrm{th}\,\frac{\sqrt{u^2+\Delta_\nu^2}}{2T} = 0\,;$$

$$\sum_\lambda m_\lambda\left\{W_\lambda - \sqrt{(W_\lambda-\mu_\lambda)^2+\Delta_\lambda^2} + \sqrt{\mu_\lambda^2+\Delta_\lambda^2} - \right.$$

$$\left. - 2T\ln\frac{1+\exp\left(-\sqrt{(W_\lambda-\mu_\lambda)^2+\Delta_\lambda^2}/T\right)}{1+\exp\left(-\sqrt{\mu_\lambda^2+\Delta_\lambda^2}/T\right)}\right\} = 2\pi N_{\mathrm{pl}} n_f \qquad (7)$$

и ее предельный вид для случая $T = 0$:

$$\sum_\lambda (\hat{V}^{-1})_{\lambda\nu}\Delta_\lambda -$$

$$- \frac{m_\nu}{4\pi}\left[\ln\frac{\sqrt{(W_\nu-\mu_\nu)^2+\Delta_\nu^2}+W_\nu-\mu_\nu}{\sqrt{\mu_\nu^2+\Delta_\nu^2}-\mu_\nu}\right]\Delta_\nu = 0\,; \qquad (8)$$

$$\sum_\lambda m_\lambda\left[W_\lambda - \sqrt{(W_\lambda-\mu_\lambda)^2+\Delta_\lambda^2} + \sqrt{\mu_\lambda^2+\Delta_\lambda^2}\right] =$$

$$= 2\pi N_{\mathrm{pl}} n_f\,.$$

Очевидно, что решения системы (7) задают Δ_ν и μ как функции «внешних» параметров T, N_{pl} и n_f. Непосредственно из нее нетрудно получить и уравнения для определения T_c и $\mu_c \equiv \mu(T_c)$ как функций тех же N_{pl} и n_f:

$$\det\left[(\hat{V}^{-1})_{\lambda\nu} - \delta_{\lambda\nu}\frac{m_\nu}{4\pi}\int\limits_{-\mu_\nu}^{W_\nu-\mu_\nu}\frac{du}{|u|}\,\mathrm{th}\,\frac{|u|}{2T_c}\right] = 0\,; \qquad (9)$$

$$\sum_\lambda m_\lambda\left\{|\mu_\lambda(T_c)| + |\mu_\lambda(T_c)| - \right.$$

$$\left. - 2T_c\ln\frac{1+\exp\left\{-\left[W_\lambda-\mu_\lambda(T_c)\right]/T_c\right\}}{1+\exp\left[-|\mu_\lambda(T_c)|/T_c\right]}\right\} = 2\pi N_{\mathrm{pl}} n_f\,.$$

В (7)–(9) матрица $\hat{V}^{-1}$ — обратная по отношению к $\hat{V}$, и в следующих разделах мы приведем ее конкретный вид для $N_{\mathrm{pl}} = 2$ и 3.

Бислойные купраты

Случай $T = 0$. К бислойным, как отмечалось, относится соединение 1–2–3, а также все соединения с общей структурой A–$n_A n_M$12. Для них элементы матрицы $\hat{V}^{-1}$ равны

$$(\hat{V}^{-1})_{\nu\nu} = \frac{1}{2}\left(V_{\mathrm{intra}}^{-1} + V_{\mathrm{inter}}^{-1}\right)\,;$$

$$(\hat{V}^{-1})_{12} = (\hat{V}^{-1})_{21} = \frac{1}{2}\left(V_{\mathrm{intra}}^{-1} - V_{\mathrm{inter}}^{-1}\right)\,,$$

а $\mu_\nu = \mu - (-1)^\nu\varepsilon_0/2$. Вводя теперь безразмерные константы

$$G_\nu^{-1} = (2\pi/m_\nu)(\hat{V}^{-1})_{\nu\nu}\,;$$

$$G_{12}^{-1} = 2\pi(m_1 m_2)^{-1/2}(\hat{V}^{-1})_{12}$$

корреляций СП параметров порядка из одной и разных зон соответственно, систему (8) можно преобразовать к виду

$$\Delta_1\left[G_1^{-1} - \ln\frac{\sqrt{(W_1-\mu_1)^2+\Delta_1^2}+W_1-\mu_1}{\sqrt{\mu_1^2+\Delta_1^2}-\mu_1}\right] +$$

$$+ \Delta_2\sqrt{m_2/m_1}\,G_{12}^{-1} = 0\,;$$

$$\Delta_1\sqrt{m_1/m_2}\,G_{12}^{-1} + \qquad (10)$$

$$+ \Delta_2\left[G_2^{-1} - \ln\frac{\sqrt{(W_2-\mu_2)^2+\Delta_2^2}+W_2-\mu_2}{\sqrt{\mu_2^2+\Delta_2^2}-\mu_2}\right] = 0\,;$$

$$\sum_{\lambda=1,2} m_\lambda\left[W_\lambda - \sqrt{(W_\lambda-\mu_\lambda)^2+\Delta_\lambda^2} + \sqrt{\mu_\lambda^2+\Delta_\lambda^2}\right] =$$

$$= 4\pi n_f\,.$$

Она становится более наглядной, если, следуя [26], ввести энергии ε_{bv} связанных двухфермионных состояний, всегда образующихся в $2D$ системах с притяжением. В нашем случае такие состоя-

ния возникают для фермионов в каждой из зон, а их энергии равны $\varepsilon_{bv} = -2W_v \exp(-G_v^{-1})$.

Если также предположить изотропию внутри- и межплоскостных взаимодействий, т.е. положить $V_{\text{intra}} = V_{\text{inter}}$, то преобразованная таким образом система (10) приобретает вид

$$\Delta_\nu \ln \frac{\sqrt{\mu_\nu^2 + \Delta_\nu^2} - \mu_\nu}{|\varepsilon_{bv}|} = 0 \ ;$$

$$\sum_{\lambda=1,2} m_\lambda \left(\sqrt{\mu_\lambda^2 + \Delta_\lambda^2} + \mu_\lambda \right) = 4\pi n_f \qquad (11)$$

и допускает аналитическое решение при $n_f \le n_0$

$$\Delta_1^2 = (4\pi/m_1)|\varepsilon_{b1}| n_f \ ; \quad \Delta_2 = 0 \ ;$$

$$\mu = (2\pi/m_1) n_f - (|\varepsilon_{b1}|/2) - (\varepsilon_0/2) \ ; \qquad (12)$$

при $n_f \ge n_0$

$$\Delta_{1,2}^2 = \left[4\pi |\varepsilon_{b1,2}| n_f \pm m_{2,1} |\varepsilon_{b1,2}| \times \right.$$

$$\left. \times (|\varepsilon_{b1}| - |\varepsilon_{b2}| + 2\varepsilon_0) \right] / (m_1 + m_2);$$

$$\mu = \left[2\pi n_f - m_1 |\varepsilon_{b1}| - m_2 |\varepsilon_{b2}| - \right.$$

$$\left. - \frac{1}{2} \varepsilon_0 (m_1 - m_2) \right] / (m_1 + m_2) \ , \qquad (13)$$

где $n_0 = (m_1/4\pi)(2\varepsilon_0 + |\varepsilon_{b1}| - |\varepsilon_{b2}|)$ — характерная концентрация, по достижении которой начинается, как нетрудно проверить, заполнение второй зоны (т.е. уровень Ферми $\varepsilon_F = \varepsilon_0$) и появляется еще одна щель. Уравнения (11) соответствуют такой ситуации, когда СП в каждой из зон разыгрывается как бы независимо в том смысле, что каждая из щелей Δ_ν зависит лишь от «своей» концентрации n_ν, но не непосредственно друг от друга (при этом связь между n_1 и n_2 обеспечивается уравнением для μ). При $n_f < n_0$ вторая зона пуста и не принимает участия в создании конденсата; в точке же $n_f = n_0$ энергия ε_F достигает второй зоны, где также начинаются процессы спаривания и появляется конденсат, причем линейное увеличение $\Delta_1^2(n_f)$ становится в области $n_f > n_0$ меньше, чем в области $n_f < n_0$. Последнее обусловлено тривиальным увеличением резервуара, заполняемого носителями и, как следствие, замедлением скорости роста уровня Ферми.

Из (12) и (13) также видно, что при $n_f > n_0$ (но $n_f - n_0 \ll n_0$), до тех пор, пока число частиц во второй зоне таково, что $\mu_2(n_f) < 0$, в ней реализуется режим локальных пар. При этом в первой зоне в зависимости от знака μ_1 при том же значении n_f пары могут быть как локальными, так и куперовскими. Однако можно ожидать, что в реальности, по-видимому, $|\varepsilon_{bv}| < \varepsilon_0$, и поэтому к моменту возникновения второго конденсата ($n_f \approx n_0$) первый будет иметь уже характер конденсата БКШ, т.е. состоять из куперовских пар. В такой ситуации конденсат 2D системы представляет собой смесь пар обоих типов. В частности, квазичастичные возбуждения будут иметь энергию Δ_1 и (пока $\mu_2 < 0$) $\sqrt{\mu_2^2 + \Delta_2^2}$* [21,22]. Можно также показать, что для простейшего случая тождественных зон свободная энергия системы с нетривиальным вакуумом на величину $\sim |\varepsilon_{bv}| n_f$ ниже этой энергии для нормального состояния, что совпадает с соответствующим значением, полученным в [22] для монослоя.

В более общем случае $V_{\text{intra}} \ne V_{\text{inter}}$ щели обеих зон появляются одновременно ($G_{12} \ne 0$), однако их зависимость от n_f можно проследить лишь численными методами, которые обнаруживают следующие характерные ситуации:

1) $V_{\text{intra}} > V_{\text{inter}} > 0$. Здесь поведение $\Delta_\nu(n_f)$ снова немонотонно в окрестности $n_f \approx n_0$ (рис. 1), но, в отличие от (12) и (13), скорость роста $\Delta_1(n_f)$ при

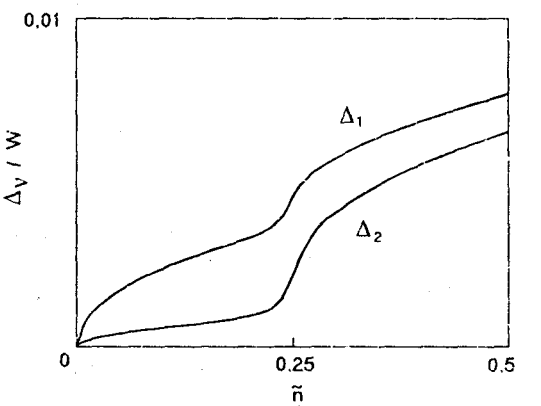

Рис. 1. Зависимости $\Delta_\nu(n_f)$ при $m_\nu = m$, $\tilde{n} = 2\pi n_f/m$; $W = 8\varepsilon_0$ для $4\pi/(mV_{\text{intra}}) = 9$; $4\pi/(mV_{\text{inter}}) = 13$.

* Уместно заметить, что именно такое значение должно проявляться в резонансных и термодинамических свойствах СП системы, на что, как нам кажется, пока не обращается должное внимание.

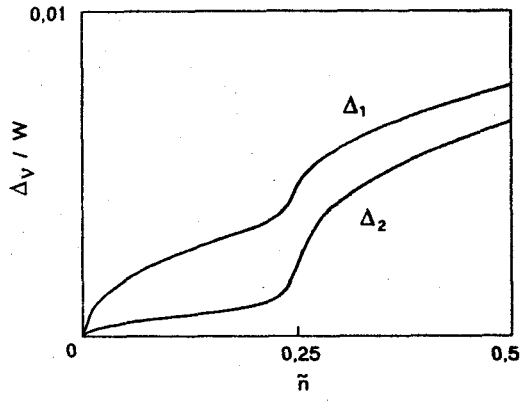

Рис. 2. Зависимости $\Delta_\nu(n_f)$ (обозначения см. рис.1) для $4\pi/(mV_{\text{intra}}) = 9$; $4\pi/(mV_{\text{inter}}) = 21$.

$n_f \gtrsim n_0$ не уменьшается, а увеличивается. Сами щели при этом остаются заметно разными по величине. Заметим, что наличие двух щелей в соединении 1–2–3 неоднократно отмечалось в литературе (например, [30,31]), хотя не связывалось с его бислойным кристаллическими строением.

Поведение $\mu(n_f)$ в этом случае качественно совпадает с поведением решения (12), (13).

2) $V_{\text{intra}} >> V_{\text{inter}} > 0$. Такому неравенству соответствуют (рис. 2) почти вырожденные по величине щели, которые как функции n_f сохраняют все же свою немонотонность. Энергии же квазичастичных возбуждений, во всяком случае пока $\mu_2(n_f) < 0$, в силу отмеченного выше различия вакуумов в обеих зонах не вырождены. Для обратного сильного неравенства $V_{\text{inter}} >> V_{\text{intra}} > 0$ результаты ничем принципиально не отличаются, если не считать, что $\Delta_2(n_f) < 0$, хотя $|\Delta_2(n_f)| \approx \approx |\Delta_1(n_f)|$. Отметим, что система (10) имеет физические решения и в случае, когда одно из взаимодействий имеет характер отталкивания, которое, тем не менее, слабее притяжения.

3) Глубокие связанные состояния $|\varepsilon_{bv}| \gtrsim \varepsilon_0$, обусловливающие наличие в системе лишь локально связанных пар. Как показывает анализ, в этом случае обе щели растут практически монотонно, не обнаруживая в области $n_f \approx n_0$ каких-либо особенностей.

Таким образом, можно утверждать, что эти особенности характеризуют «гетерогенные» конденсаты, состоящие из пар обоих типов. Если же при этом число носителей во второй зоне столь мало, что какое-то количество пар существует и в нормальной фазе, то, как показал Кулик [32], удельное сопротивление таких металлов линейно зависит от T, что, как известно, наблюдается во всех без исключения купратных ВТСП.

Критическая температура. Уравнения для T_c и μ прямо следуют из (9) и имеют вид

$$\prod_{\lambda=1,2}\left(G_\lambda^{-1} - \int_{-\mu_\lambda}^{W_\lambda-\mu_\lambda} \frac{du}{|u|}\ \text{th}\ \frac{|u|}{2T_c}\right) = G_{12}^{-2}\ ,$$

$$\sum_{\lambda=1,2} m_\lambda \left\{\mu_\lambda + |\mu_\lambda| - \right.$$

$$\left. - 2T_c \ln \frac{1+\exp\{[\mu_\lambda(T_c) - W_\lambda]/T_c\}}{1+\exp[-|\mu_\lambda(T_c)|/T_c]}\right\} = 4\pi n_f\ , \qquad (14)$$

из которого видно, что их решение не зависит от знака G_{12}, что обычно имеет место в СП фазе двухзонного металла [23–25,28,29]. Легко также убедиться, что из (14) следует результат теории БКШ для области больших n_f ($\mu >> \varepsilon_0$, T_c):

$$T_c = (2\gamma/\pi)\sqrt{\pi W n_f/m}\ \exp[-(1/2)(G_1^{-1} + G_{12}^{-1})]$$

(γ — постоянная Эйлера).

Коль скоро уравнение для μ не тривиально, то аналогично (10) система (14) допускает лишь численный анализ. Наиболее интересные результаты можно получить в следующих случаях:

1) $V_{\text{intra}} > V_{\text{inter}} > 0$. Зависимость $T_c(n_f)$, хотя и немонотонна, но область смены роста выражена слабо (рис. 3), что обусловлено сильным различием величин щелей между собой.

2) $V_{\text{intra}} >> V_{\text{inter}} > 0$. В этой ситуации, наоборот, немонотонность роста $T_c(n_f)$ проявляется достаточно сильно (рис. 4); более того, поведение $T_c(n_f)$ в значительной степени повторяет поведение щелей, которые, как было показано в этом разделе, оказываются почти вырожденными. Зависимости

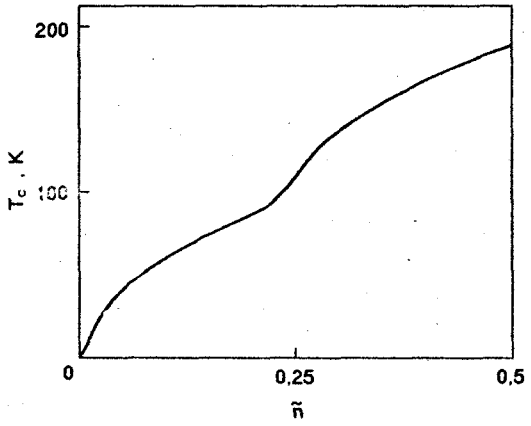

Рис. 3. Зависимость $T_c(n_f)$ (обозначения см. рис. 1) для $4\pi/(mV_{\text{intra}}) = 9$; $4\pi/(mV_{\text{inter}}) = 13$.

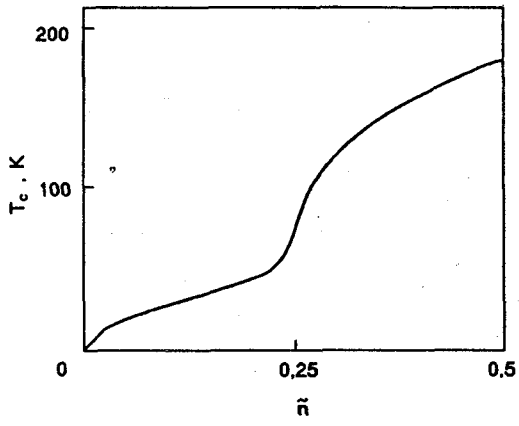

Рис. 4. Зависимость $T_c(n_f)$ (обозначения см. рис. 1) для $4\pi/(mV_{\text{intra}}) = 9$; $4\pi/(mV_{\text{inter}}) = 21$.

$\mu_\lambda(n_f)$ здесь ведут себя так (рис. 5), что область ступенчатого поведения $T_c(n_f)$ соответствует смешанному конденсату из куперовских (в нижней зоне) и локальных (в верхней зоне) пар. В обоих случаях немонотонность свойственна области начала заполнения второй зоны.

Итак, наблюдающаяся немонотонность поведения $T_c(n_f)$ в бислойных купратах находит свое естественное объяснение в двухзонной модели СП, если уровень Ферми по мере увеличения количества носителей поочередно пересекает сначала одну, а затем обе зоны. При этом уравнение для μ является существенным, так как, в отличие от обычного подхода в рамках теории БКШ, когда полагается $\mu = \varepsilon_F$, здесь последнее равенство, вообще говоря, не выполняется. Отметим, что в самое последнее время двухзонность соединения 1–2–3 привлекалась для объяснения поведения $T_c(n_f)$ и в работе [33], где, однако, считалось, что последнее существенно базируется на спиновых корреляционных функциях.

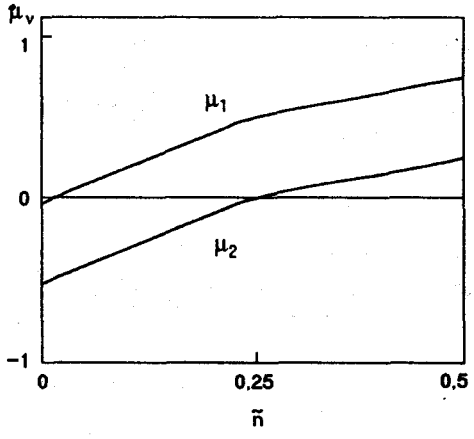

Рис. 5. Зависимости $\mu_\nu(n_f)$ (обозначения см. рис. 1) для $4\pi/(mV_{\text{intra}}) = 9$; $4\pi/(mV_{\text{inter}}) = 21$.

Трехслойные системы

Расчет матричных элементов оператора $\hat{V}^{-1}$ (7)–(9) для подобных систем дает

$$(V^{-1})_{11} = (V^{-1})_{33} = \frac{5}{2}\,\frac{1}{2\sqrt{2}+3}\,V^{-1}_{\text{intra}} + \frac{1}{2}\,V^{-1}_{\text{inter}}\ ;$$

$$(V^{-1})_{22} = \frac{1}{2}\,V^{-1}_{\text{intra}}\ ;$$

$$(V^{-1})_{12} = (V^{-1})_{21} = (V^{-1})_{23} = (V^{-1})_{32} =$$

$$= \frac{1}{2}\,\frac{\sqrt{2}+1}{2\sqrt{2}+3}\,V^{-1}_{\text{intra}}\ ; \qquad (15)$$

$$(V^{-1})_{31} = (V^{-1})_{13} =$$

$$= \frac{5}{2}\,\frac{1}{2\sqrt{2}+3}\,V^{-1}_{\text{intra}} - \frac{1}{2}\,V^{-1}_{\text{inter}}\ ,$$

а $\mu_{1,3} = \mu \pm \varepsilon_0/\sqrt{2}$, $\mu_2 = \mu$. Некоторая неэквивалентность второй зоны двум другим следует из выделенности средней плоскости, имеющей, в отличие от крайних плоскостей, две соседние. Из (15) видно, что никаким выбором величин V_{intra} и V_{inter} исходных взаимодействий нельзя добиться диагональности матрицы V^{-1}, как это удается сделать в случае двух слоев. Тем не менее ради возможности получить аналитическое решение сделаем допущение, что и в данном случае имеет смысл система (10), в которой отсутствует межзонная динамическая связь (недиагональные элементы матрицы V^{-1}), и параметры порядка связаны только условием сохранения полного числа частиц (уравнение для μ). Тогда снова, вводя энергии ε_{bv} связанных состояний, легко найти решения типа (12) и (13), из которых более важными являются значения n_f начала заполнения второй и третьей зон:

$$n_1 = (m/6\pi)(\sqrt{2}\,\varepsilon_0 + |\varepsilon_{b1}| - |\varepsilon_{b2}|)\ ,$$

$$n_2 = (m/3\pi)\left[(3/\sqrt{2})\,\varepsilon_0 + (1/2)\,|\varepsilon_{b2}| - (1/2)\,|\varepsilon_{b1}|\right].$$

Из них можно сделать заключение, что в трехзонном случае эти концентрации зависят от параметров V_{intra} и V_{inter}, даже если зоны одинаковы.

В свою очередь, это означает, что поведение щелей в данном случае уже не столь однозначно задает поведение $T_c(n_f)$. Поэтому, полагая более интересной и доступной для экспериментального изучения именно эту зависимость, проанализируем ее с учетом всех элементов матрицы (15) при

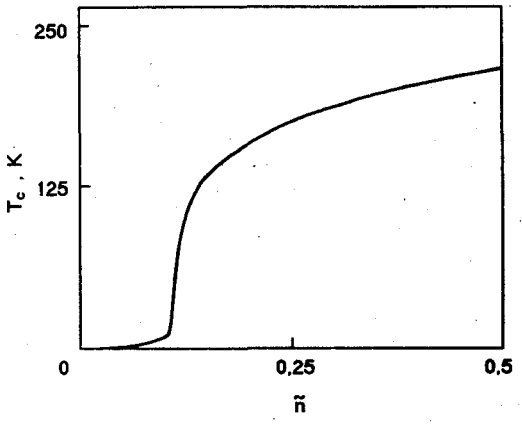

Рис. 6. Зависимость $T_c(n_f)$ при $m_\nu = m$, $\tilde{n} = 3\pi n_f/m$; $W = 8\varepsilon_0$ для $4\pi/(mV_{\text{intra}}) = 9$; $4\pi/(mV_{\text{inter}}) = 9$.

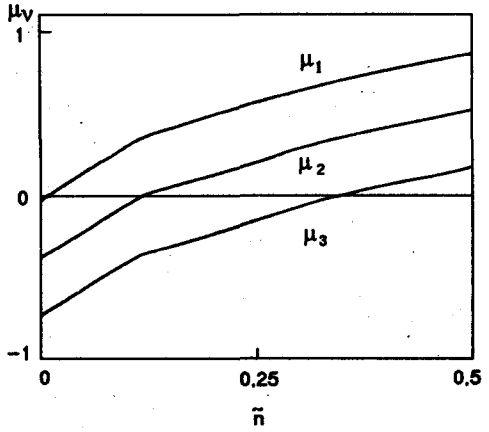

Рис. 8. Зависимости $\mu_\nu(n_f)$ (обозначения см. рис. 6) для $4\pi/(mV_{\text{intra}}) = 9$; $4\pi/(mV_{\text{inter}}) = 21$.

наиболее характерных соотношениях между V_{inter} и V_{intra}:

1) $V_{\text{intra}} \approx V_{\text{inter}} > 0$. Тогда численный расчет демонстрирует (рис. 6) наличие «ступеньки» при $n_f = n_1$, но при заполнении третьей зоны немонотонность практически не проявляется и в целом зависимость $T_c(n_f)$ подобна имеющей место в двухплоскостной структуре.

2) $V_{\text{intra}} \gg V_{\text{inter}} > 0$. Поведение $T_c(n_f)$ и значение химического потенциалов носителей в каждой из трех зон в точке $T = T_c$ показаны на рис. 7, 8. Видно, что функция $T_c(n_f)$ имеет два отчетливо выраженных немонотонных участка, соответствующих областям $n_f = n_1$ и $n_f = n_2$; функции же $\mu_\nu(n_f)$ при этих значениях концентрации фермионов испытывают лишь слабые изломы. Наиболее существенны и информативны здесь знаки μ_ν; в частности, видно, что при $n_f = n_1$ величины $\mu_1(n_f) > 0$, $\mu_2(n_f) \approx 0$, а $\mu_3(n_f) < 0$. Это означает, что первая «ступенька» в зависимости $T_c(n_f)$ лежит в области существования куперовских пар в первой зоне, локальных — в третьей и пар промежуточного радиуса — во второй. В то же время вторая «ступенька» на кривой $T_c(n_f)$ обнаруживает себя при таких значениях n_f, при которых $\mu_{1,2}(n_f) > 0$, а $\mu_3(n_f) \approx 0$. Следовательно, здесь конденсаты первых двух зон состоят из куперовских пар, а конденсат третьей зоны находится в режиме кроссовера от локальных пар (т.е. пар в координатном пространстве) к куперонам (парам в пространстве импульсов).

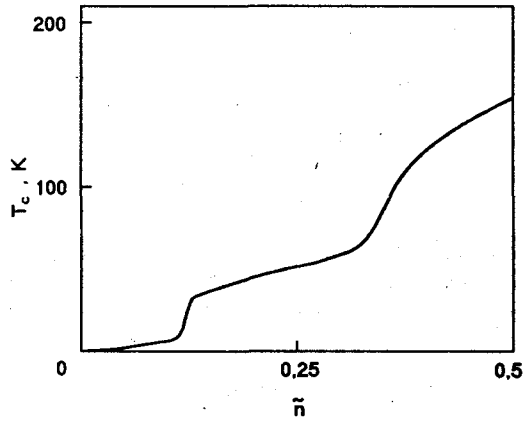

Рис. 7. Зависимость $T_c(n_f)$ (обозначения см. рис. 6) для $4\pi/(mV_{\text{intra}}) = 9$; $4\pi/(mV_{\text{inter}}) = 21$.

Таким образом, наши расчеты свидетельствуют о том, что и в трехслойных металлических системах функция $T_c(n_f)$ может быть существенно немонотонной с числом перегибов равным двум (в общем случае $N_{\text{pl}} - 1$). Экспериментальное изучение таких зависимостей, а также спектр СП фазы в слоистых купратах с $N_{\text{pl}} > 2$ стало бы важным этапом исследований ВТСП вообще, так как позволило бы с большей степенью определенности судить о взаимосвязи между структурой этих соединений и их электронным спектром.

Заключение

Полученные результаты хотя и относятся к весьма упрощенной модели, достаточно убедительно демонстрируют зависимость СП характеристик слоистых систем от положения уровня Ферми и того, сколько зон он пересекает. В частности, было показано, что его вхождение в каждую из зон по мере насыщения мультислойной среды носителями вызывает увеличение T_c; при этом максимально достижимая величина последней тем больше, чем

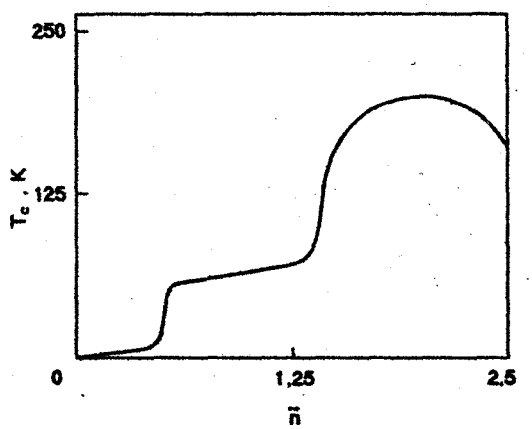

Рис. 9. Зависимость $T_c(n_f)$ при $m_v = m$, $\tilde{n} = 3\pi n_f/m$; $W = 2\varepsilon_0$ для $4\pi/(mV_{\text{intra}}) = 9$, $4\pi/(mV_{\text{inter}}) = 21$.

больше в системе зон, или число слоев. Казалось бы, это прямое подтверждение «правила Чу». Эксперимент же, как говорилось во Введении, демонстрирует подобный рост лишь до $N_{\text{pl}} = 3, 4$, затем $T_c(N_{\text{pl}})$, достигнув своего наибольшего для данной системы значения, начинает спадать. Возникает вопрос: может ли наблюдаемое поведение быть обеспечено на основе предложенной модели? Принципиально ответ является утвердительным и опирается он на достаточно простое обстоятельство, связанное с конечностью ширин зон.

Действительно, зависимость $T_c(n_f)$ уже в однослойном металле такова, что критическая температура, пройдя через максимум при половинном заполнении ($n_f = mW/2\pi$) зоны, начинает падать по мере дальнейшего увеличения n_f [26]. В известном смысле та же тенденция должна быть присуща и многослойному металлу, если увеличение числа N_{pl} вызывает такой рост полной концентрации $N_{\text{pl}}n_f$, что она станет порядка единицы. При столь большой количестве носителей появляется возможность практически полного заполнения одной из зон (нижайшей), хотя величина n_f для каждой из плоскостей может все еще оставаться относительно малой. Заполненная более чем наполовину зона начнет давать «отрицательный» вклад в T_c, и рост последней тем самым будет компенсироваться. Трудно, разумеется, добиться такого заполнения в купратных системах с малым числом слоев, но в многослойной структуре ситуация меняется кардинально, и достичь соответствующих концентраций, по-видимому, удается. Пример такого поведения для трехслойной системы показан на рис. 9, где отчетливо виден участок падения T_c, вызванного высокой степенью заполнения первой зоны. В итоге можно утверждать, что рост T_c как функции N_{pl} мог бы быть обеспечен лишь для систем с чрезвычайно широкими зонами; конечность последних служит предпосылкой для ограничения такого роста, который сначала должен смениться участком слабого изменения, а затем падения T_c, если число носителей продолжает увеличиваться.

Мы выражаем признательность П. И. Фомину и участникам его семинара за обсуждение работы и критические замечания.

1. J. G. Bednorz and K. A. Müller, *Z. Phys.* B64, 189 (1986).
2. M. K. Wu, I. R. Ashburn, C. J. Torng, P. H. Hor, R. L. Meng, L. Gao, Z. J. Huang, Y. Q. Wang, and C. W. Chu, *Phys. Rev. Lett.* 58, 908 (1987).
3. H. Maeda, Y. Tanaka, M. Fukutomi, and T. Asano, *Jpn. J. Appl. Phys.* 27, L209 (1988).
4. Z. Z. Cheng and A. M. Herman, *Nature* 332, 55 (1988); 332, 138 (1988).
5. R. M. Haren, C. T. Prewitt, R. J. Angel, H. L. Ross, L. W. Finger, C. G. Hadidiacos, D. K. Veblen, P. I. Heaney, P. H. Hor, R. L. Meng, Y. Y. Xue, Y. Q. Wang, Y. Y. Sun, Z. J. Huang, L. Gao, J. Bechtold, and C. W. Chu, *Phys. Rev. Lett.* 60, 1174 (1988).
6. S. S. P. Parkin, V. Y. Lee, E. M. Engler, A. I. Nazzal, T. C. Huang, G. Gorman, R. Savoy, and R. Beyers, *Phys. Rev. Lett.* 60, 2359 (1988).
7. M. Kikuchi, S. Nakajima, Y. Syono, K. Hiraga, T. Oku, D. Sindo, N. Kobayashi, H. Iwasaki, and Y. Muto, *Physica* C158, 79 (1989).
8. S. Nikajima, M. Kikuchi, Y. Syono, T. Oku, D. Shindo, K. Hiraga, N. Kobayashi, H. Iwasaki, and Y. Muto, *Physica* C158, 471 (1989).
9. H. Ihara, R. Sagce, N. Hirabayashi, M. Terada, M. Jo, K. Hayashi, M. Jokowoto, Y. Kimura, and T. Shimomura, *Nature* 333, 510 (1989).
10. K. Pool, *Science* 240, 146 (1988).
11. T. Kurakawa, X. Ampo, and C. Tajama, *Superconductivity: Physica, Chemistry, Technol.* 3, 773 (1990).
12. M. R. De Guire, N. P. Banzal, D. E. Farrell, V. Finan, C. J. Kim, B. J. Hills, and C. J. Allen, *Physica* C179, 333 (1991).
13. Е. В. Антипов, *Новости ВТСП* 6, 2 (1993).
14. S. M. Lourerio, E. V. Antipov, M. F. Gorins, B. Soulete, M. Perroux, R. Argoud, O. Cheoshe, J. L. Tholence, and J. J. Capponi, in: *Abstracts Int. Conf. M²S–HTSC IV, 5–9 July, 1994*, Crenoble (France) (1994), p. 38.
15. J. M. Wheatby, T. C. Hsu, and P. W. Anderson, *Phys. Rev.* B37, 5897 (1988).
16. C. H. Eab and T. M. Tang, *Phys. Rev.* 40, 4427 (1988).
17. S. S. Jha, *Phase Trans.* 19, 3 (1989).
18. П. И. Фомин, В сб.: *Физика многочастичных систем*, А. С. Давыдов (ред.), Наукова думка, Киев (1990), Вып. 17, с. 1.
19. A. S. Davydov and S. P. Kruchinin, *Physica* C179, 561 (1991).
20. R. J. Cava, *Int. J. Mod. Phys.* B1, 813 (1987).
21. M. Randeria, J.-M. Duan, and L.-Y. Shieh. *Phys. Rev. Lett.* 62, 981 (1989).
22. Э. В. Горбар, В. П. Гусынин, В. М. Локтев, *ФНТ* 19, 1171 (1993).
23. М. Е. Палистрант, В. М. Вокалюк, *СФХТ* 3, 1805 (1990).
24. М. Е. Палистрант, Ф. Г. Кочорбэ, В кн.: *Квантово-полевые методы исследования ВТСП и неупорядоченных систем*, Кишинев, Штиинца (1992), с. 3.
25. N. Kristoffel, P. Konsin, and T. Ord, *Revista Nuovo Cimento*, 17, 1 (1994).
26. Э. В. Горбар, В. П. Гусынин, В. М. Локтев, *СФХТ* 6, 483 (1992).
27. K. Miyake, *Progr. Theor. Phys.* 69, 1784 (1983).
28. В. А. Москаленко, *ФММ* 8, 503 (1959).

29. H. Suhl, B. T. Matthias, and L. R. Walher, *Phys. Rev. Lett.* 3, 552 (1959).
30. И. К. Янсон, А. Э. Рыбальченко, В. В. Фисун, Н. Л. Бобров, М. А. Оболенский, Н. Б. Брандт, В. В. Мощалков, Ю. Д. Третьяков, А. Р. Кауль, И. Э. Грабой, *ФНТ* 13, 537 (1987).
31. V. A. Gasparov, M. R. Mkrtchyan, M. A. Obolensky, and A. V. Bondarenko, *High-T_c* Upd. 8, 1 (1994).
32. И. О. Кулик, *ФНТ* 8, 209 (1983).
33. L. A. Maksimov, A. F. Barabanov, and A. Y. Mikheenkov, in: «*Shongly Correlated System*», Abstracts Int. Senimar, September 22–24, 1994 , JINR, Dubna, Russia (1994), p. 24.

Electronic spectrum and critical temperature of the HTSC with several cuprate layers in a cell

E. V. Gorbar, V. M. Loktev, and S. G. Sharapov

Basing on the model microscopic Lagrangian of a multilayered system of fermi-particles with attraction, the equations for superconducting gaps, critical temperature T_c and chemical potential have been obtained for arbitrary carrier density and number of layers in the multilayeres metal. Cooper pairs coexist with local ones, which leads to a non-uniform growth of T_c of the multilayered conductor studied, for example, in the bilayered compaund $YBa_2Cu_3O_{6+\delta}$ with changing δ.

Примечание при корректуре (3 февраля 1995 г.)

Когда настоящая статья была сдана в печать, мы узнали о работах Ф. Г. Когорбэ, М. Е. Палистрант (ЖЭТФ 104, 3084 (1993): ТМФ 96, 459 (1993)), в которых при описании наблюдаемого в эксперименте излома зависимости $\mu(T)$ вблизи T_c уравнения БКШ для двухзонной модели дополнялись уравнениями для химического потенциала.