Физика низких температур, 1996, т. 22, № 5, с. 499–502

Влияние немагнитных примесей и дефектов на сверхпроводящие парные корреляции с s^*- и $d_{x^2-y^2}$-симметрией и локализация конденсата куперовских пар в высокотемпературных сверхпроводниках

В. Ф. Елесин, А. В. Крашенинников, Л. А. Опенов

Московский государственный инженерно-физический институт (Технический университет), Россия, 115409, г. Москва, Каширское шоссе, 31

Методом точной диагонализации численно рассчитаны парные корреляционные функции в кластере Cu_4O_8. Показано, что при дырочном допировании кластера парные корреляции с s-симметрией отсутствуют, а корреляции в s^*-канале значительно сильнее, чем в $d_{x^2-y^2}$-канале. Исследовано влияние андерсоновского беспорядка с мерой W на корреляции с s^*- и $d_{x^2-y^2}$-симметрией. Обнаружено, что рост W приводит к существенно более быстрому подавлению корреляций в $d_{x^2-y^2}$-канале по сравнению с s^*-каналом. При электронном допировании корреляции с s- и $d_{x^2-y^2}$-симметрией отсутствуют, а корреляции с s^*-симметрией слабо зависят от W. Полученные результаты совместно с представлением о локализации куперовских пар позволяют дать непротиворечивую интерпретацию влияния немагнитных примесей и дефектов на ВТСП p- и n-типов.

Методом точної діагоналізації чисельно розраховано парні кореляційні функції в кластері Cu_4O_8. Показано, що при дірковому допіюванні кластера парні кореляції з s-симетрією відсутні, а кореляції в s^*-каналі значно сильніші, ніж в $d_{x^2-y^2}$-каналі. Досліджено вплив андерсонівського непорядку з мірою W на кореляції з s^*- і $d_{x^2-y^2}$-симетрією. Виявлено, що зростання W приводить до істотно більш швидкого пригнічення кореляцій в $d_{x^2-y^2}$-каналі порівняно з s^*-каналом. При електронному допіюванні кореляції з s- і $d_{x^2-y^2}$-симетрією відсутні, а кореляції з s^*-симетрією слабо залежать від W. Отримані результати разом з уявленням про локалізацію куперівських пар дозволяють дати несуперечну інтерпретацію щодо впливу немагнітних домішок і дефектів на ВТНП p- і n-типів.

Экспериментально доказано, что в высокотемпературных сверхпроводниках (ВТСП) при температуре сверхпроводящего перехода T_c формируется сверхпроводящий конденсат, образованный куперовскими парами в синглетном состоянии. Таким образом, с достаточно большой степенью определенности установлено, что явление высокотемпературной сверхпроводимости может быть описано в рамках теории БКШ (но не модели БКШ, относящейся лишь к сверхпроводникам с фононным механизмом спаривания). Однако ключевой вопрос о природе эффективного притяжения квазичастиц в куперовской паре остается пока невыясненным. Решению этого вопроса во многом препятствует неоднозначность экспериментальных данных о симметрии парной волновой функции, т.е. о симметрии сверхпроводящего параметра порядка $\Delta(\mathbf{k})$ в кристаллографической плоскости a,b (в слоях CuO_2). Установлено, впрочем, что $\Delta(\mathbf{k})$ в ВТСП, в отличие от обычных сверхпроводников, характеризуется сильной анизотропией. Поэтому в литературе дискутируются следующие возможные типы $\Delta(\mathbf{k})$: анизотропная s-волна и d-волна.

В большинстве моделей нефононного механизма ВТСП (например, в спин-флуктуационной [1]) допускается лишь $d_{x^2-y^2}$-симметрия $\Delta(\mathbf{k})$. Однако $d_{x^2-y^2}$-симметрию очень трудно согласовать с экспериментами по воздействию немагнитных примесей и дефектов на T_c ВТСП. Действительно, согласно теории [2], сверхпроводимость в $d_{x^2-y^2}$-канале полностью подавляется при критическом значении обратного времени релаксации импульса носителей $1/\tau_c \approx T_{c0}$, где T_{c0} — величина T_c в «чистом» образце (здесь и далее мы полагаем постоянные Планка и Больцмана равными единице), тогда как из эксперимента [3] следует, что $1/\tau_c \approx E_F >> T_{c0}$, где E_F — энергия Ферми. Таким образом, ВТСП гораздо менее чувствительны к атомному разупо-

© В. Ф. Елесин, А. В. Крашенинников, Л. А. Опенов, 1996

рядочению, чем можно было бы ожидать в рамках $d_{x^2-y^2}$-волновой картины сверхпроводимости.

Аналитическое рассмотрение нефононных моделей сверхпроводимости ВТСП, а также моделирование воздействия немагнитных примесей и дефектов на электронную структуру этих соединений оказывается крайне сложным из-за необходимости учета сильных кулоновских корреляций. В этой ситуации большое значение приобретают численные расчеты «из первых принципов», основанные на методах Монте-Карло [4–6] и точной диагонализации [4,7–13].

Исходя из этого целью настоящей работы был расчет методом точной диагонализации парных корреляторов (дающих в кластерных расчетах информацию о симметрии щели) для s-, s^*- и $d_{x^2-y^2}$-каналов спаривания, а также численное исследование воздействия немагнитных примесей и дефектов на парные корреляции.

Для описания системы коррелированных носителей зарядов в плоскости CuO_2 нами использовалась модель Эмери [14]. Влияние немагнитных примесей и дефектов моделировалось диагональным андерсоновским беспорядком. Для численного решения многоэлектронного уравнения Шредингера $(H_E + H_A)\Psi = E\Psi$, где H_E — гамильтониан Эмери; H_A — гамильтониан Андерсона, использовался алгоритм Ланцоша (подробнее см. [4]). Рассматривался двухмерный кластер Cu_4O_8 [7–10] с периодическими граничными условиями. Исследовались случаи дырочного (пять дырок в кластере) и электронного (три дырки в кластере) допирований [7].

Численно найдя многоэлектронную волновую функцию Ψ основного состояния, мы рассчитывали коррелятор в α-канале спаривания ($\alpha = s$, s^* и $d_{x^2-y^2}$) по формулам [5]

$$P_\alpha = \sum_{\mathbf{r},\mathbf{r}'} \langle \Delta_\alpha^+(\mathbf{r})\, \Delta_\alpha(\mathbf{r}+\mathbf{r}') \rangle ,$$

$$\overline{P}_\alpha = N_0^{-1} \times$$

$$\times \sum_{\mathbf{r},\mathbf{r}',\vec{\rho},\vec{\rho}'} g_\alpha(\vec{\rho})\, g_\alpha(\vec{\rho}\,') \langle C^+_{\mathbf{r},\uparrow} C_{\mathbf{r}+\mathbf{r}',\uparrow} \rangle \langle C^+_{\mathbf{r}+\vec{\rho},\downarrow} C_{\mathbf{r}+\mathbf{r}'+\vec{\rho}\,',\downarrow} \rangle ,$$

где

$$\Delta_\alpha^+(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N_0}} \sum_{\vec{\rho}} g_\alpha(\vec{\rho})\, C^+_{\mathbf{r},\uparrow}\, C^+_{\mathbf{r}+\vec{\rho},\downarrow} ,$$

суммирование по $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}'$ проводится по всем элементарным ячейкам, число которых равно N_0 (для плоскости CuO_2 — число атомов меди). Оператор $C^+_{\mathbf{r},\sigma}$ описывает рождение частицы с проекцией спина σ в элементарной ячейке с координатой $\mathbf{r}$. Вид функции $g_\alpha(\vec{\rho})$ определяется симметрией парного состояния. Для s-спаривания $g_\alpha(\vec{\rho}) = 1$ при $\vec{\rho} = 0$ и $g_\alpha(\vec{\rho}) = 0$ при других значениях $\vec{\rho}$. Для s^*-спаривания $g_\alpha(\vec{\rho}) = 1$ при $\vec{\rho} = \pm a\mathbf{e}_x$; $\vec{\rho} = \pm a\mathbf{e}_y$ и $g_\alpha(\vec{\rho}) = 0$ при других значениях $\vec{\rho}$. Для $d_{x^2-y^2}$-спаривания $g_\alpha(\vec{\rho}) = 1$ при $\vec{\rho} = \pm a\mathbf{e}_x$; $g_\alpha(\vec{\rho}) = -1$ при $\vec{\rho} = \pm a\mathbf{e}_y$ и $g_\alpha(\vec{\rho}) = 0$ при других значениях $\vec{\rho}$. Положительные значения разности $P_\alpha - \overline{P}_\alpha$ можно рассматривать как свидетельство наличия в кластере сверхпроводящих корреляций [4,5].

В отсутствие атомного разупорядочения нами было обнаружено, что в широком диапазоне значений параметров модели Эмери как при дырочном, так и при электронном допировании парные корреляции с s-симметрией в кластере Cu_4O_8 отсутствуют, но имеются корреляции в s^*-канале. В случае дырочного допирования корреляции с $d_{x^2-y^2}$-симметрией также имеют место, но они значительно слабее, чем в s^*-канале.

Полученные результаты свидетельствуют о s^*-спаривании избыточных носителей (как дырок, так и электронов) в плоскости CuO_2 , хотя при дырочном допировании $d_{x^2-y^2}$-канал также дает некоторый вклад в сверхпроводящие корреляции. Заметим, что экспериментальных данных, которые можно было бы интерпретировать в пользу $d_{x^2-y^2}$-симметрии $\Delta(\mathbf{k})$ в ВТСП n-типа, насколько нам известно, вообще не существует. Более высокая (по сравнению с ВТСП n-типа) T_c в ВТСП с дырочным допированием может быть следствием наличия в $\Delta(\mathbf{k})$ «примеси» $d_{x^2-y^2}$-волны, т.е. реальная симметрия ВТСП p-типа может оказаться смешанной.

Однако в полный парный коррелятор, наряду со сверхпроводящими взаимодействиями, в конечной системе могут давать вклад и другие взаимодействия, например магнитные. Поэтому представляется важным оценить долю сверхпроводящих взаимодействий в парном корреляторе, что можно сделать на основе расчетов этих характеристик при наличии атомного разупорядочения в системе.

На рис. 1 изображены типичные зависимости парных корреляторов в $d_{x^2-y^2}$- и s^*-каналах спаривания от параметра беспорядка W. Корреляторы нормированы на их значения в отсутствие беспорядка. Принципиальное различие зависимостей корреляторов от параметра беспорядка в d- и s^*-каналах состоит в том, что коррелятор с s^*-симметрией (g_{s^*}) остается неизменным в пределах погрешно-

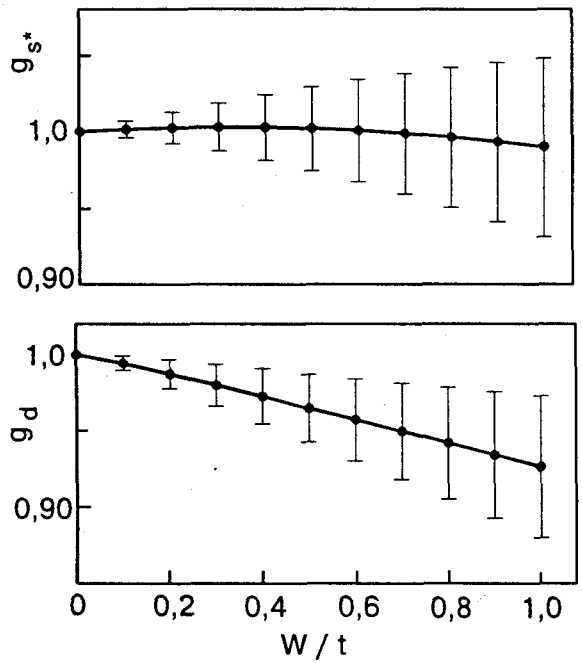

Рис. 1. Зависимости средних значений нормированных парных корреляторов $g_\alpha = (P_\alpha - \bar{P}_\alpha)/P_\alpha - \bar{P}_\alpha)_{W=0}$ и среднеквадратичных отклонений $D_\alpha = D(P_\alpha - \bar{P}_\alpha)/(P_\alpha - \bar{P}_\alpha)_{W=0}$ от параметра андерсоновского беспорядка W/t при дырочном допировании и следующих значениях параметров модели Эмери: $\varepsilon/t = 2$, $U_d/t = 6$, $U_p/t = 2{,}5$, $V/t = 1{,}5$.

сти, тогда как коррелятор в d-канале (g_d) существенно уменьшается уже при малых значениях W. На основе полученных зависимостей и с учетом предположения о том, что эффекты конечности размеров кластера дают одинаковый вклад в обоих каналах (подробнее см. [12]), нам удалось оценить вклад от сверхпроводящих взаимодействий в полный парный коррелятор, который для различных наборов параметров модели Эмери составлял 10–30%. Как следует из наших расчетов, $1/\tau_c$ для d-канала оказывается на порядок меньшим, чем для s^*-канала.

Для количественных оценок влияния немагнитных примесей и дефектов на ВТСП мы в рамках теории БКШ аналитически рассчитали зависимости T_c от $1/\tau$ и остаточного сопротивления ρ_0 для s^*- и d-каналов спаривания. Отметим, что величина ρ_0 может быть определена непосредственно из экспериментальных данных и связана с $1/\tau$ соотношением $1/\tau = (\omega_{pl}^2/4\pi)\,\rho_0$, где ω_{pl} — плазменная частота (в расчетах мы полагали $\omega_{pl} = 1{,}2$ эВ). На рис. 2 рассчитанные зависимости сопоставлены с экспериментальными данными по влиянию ионного облучения на T_c тонких пленок $YBa_2Cu_3O_7$. Из рис. 2 видно, что для сверхпроводника с d-спариванием значение ρ_0, соответствующее исчезновению сверхпроводимости, составляет 50 мкОм·см, что по крайней мере на порядок меньше экспериментально наблюдаемой величины. Таким образом, при реалистичных значениях ω_{pl} зависимость критической температуры от ρ_0 не может быть описана в рамках предположения о d-спаривании.

Вместе с тем, наилучшее соответствие теории с экспериментом достигается для сверхпроводников с s^*-симметрией параметра порядка, но только в диапазоне $\rho_0 < 300$ мкОм·см ($0{,}6 < T_c/T_{c0} < 1$). При этом параметр анизотропии (являющийся количественным выражением анизотропии $\Delta(\mathbf{k})$ [15]) $\chi = 0{,}2$. Отметим, что величина $\chi \approx 0{,}2$ согласуется со значениями $\chi \approx 0{,}3$ (которое следует из [16] для $YBa_2Cu_3O_{7-x}$) и $\chi \approx 0{,}1$ (которое получено в [17] для $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$). Расхождение теории с экспериментом при малых значениях T_c/T_{c0} обусловлено, по-видимому, недостаточностью приближений теории БКШ. Однако при малых значениях T_c/T_{c0} линейная зависимость T_c от ρ_0 может быть описана в рамках предположения о возможности локализации бозе-конденсата куперовских пар в хаотическом поле, созданном дефектами [18]. Отметим, что критические значения ρ_0, предсказываемые теорией [18], оказываются близкими к экспериментальным данным и составляют $\rho_0 \sim 1\,000$ мкОм·см.

Полученные результаты совместно с представлением о локализации куперовских пар позволяют

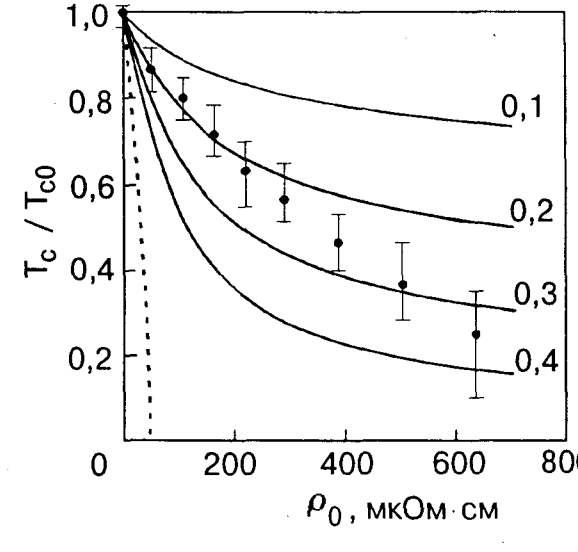

Рис. 2. Зависимости критической температуры T_c пленок $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ от остаточного сопротивления ρ_0. Точки — экспериментальные данные, сплошные линии — теоретические кривые для s^*-канала спаривания, пунктирные — для d-канала. Цифры у кривых — значения параметра анизотропии χ.

дать непротиворечивую интерпретацию влияния немагнитных примесей и дефектов на ВТСП p- и n-типов, а также на основании полученных результатов сделать вывод о s^*-симметрии сверхпроводящего параметра порядка в ВТСП с электронным допированием и, предположительно, смешанной $s^* + d$-симметрии (с преобладанием s^*-канала спаривания) в ВТСП с дырочным допированием.

Работа поддерживается Научным советом по проблеме ВТСП и выполнена в рамках проекта № 94031 Государственной программы «Высокотемпературная сверхпроводимость». Работа поддержана также грантом № M67300 Международного фонда и правительства России.

1. P. Monthoux and D. Pines, *Nuovo Cimento* **D15**, 181 (1993).
2. R. J. Radtke, K. Levin, H. B. Schüttler, and M. R. Norman, *Phys. Rev.* **B48**, 653 (1993).
3. В. Ф. Елесин, И. А. Руднев, *СФХТ* **4**, 2055 (1991).
4. E. Dagotto, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 763 (1994).
5. A. Moreo, *Phys. Rev.* **B45**, 5059 (1992).
6. В. Ф. Елесин, В. А. Кашурников, *ЖЭТФ* **106**, 1773 (1994).
7. В. Ф. Елесин, В. А. Кашурников, Л. А. Опенов, А. И. Подливаев, *ЖЭТФ* **99**, 237 (1991).
8. В. Ф. Елесин, В. А. Кашурников, Л. А. Опенов, А. И. Подливаев, *ЖЭТФ* **101**, 682 (1992).
9. V. F. Elesin, V. A. Kashurnikov, L. A. Openov, and A. I. Podlivatv, *Physica* **C195**, 171 (1992).
10. V. F. Elesin, V. A. Kashurnikov, L. A. Openov, and A. I. Podlivatv, *Solid State Commun.* **89**, 22 (1994).
11. V. F. Elesin, V. A. Kashurnikov, A. V. Krasheninnikov, and A. I. Podlivaev, *Physica* **C222**, 127 (1994).
12. В. Ф. Елесин, А. В. Крашенинников, Л. А. Опенов, *ЖЭТФ* **106**, 1459 (1994).
13. В. Ф. Елесин, А. В. Крашенинников, Л. А. Опенов, *ЖЭТФ* **107**, 2092 (1995).
14. V. J. Emery, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2794 (1987).
15. A. A. Abrikosov, *Physica* **C214**, 107 (1993).
16. J. Giapintzakis, D. M. Ginsberg, M. A. Kirk, and S. Ockers, *Phys. Rev.* **B50**, 15967 (1994).
17. А. В. Крашенинников, Л. А. Опенов, В. Ф. Елесин, *Письма в ЖЭТФ* **62**, 53 (1995).
18. В. Ф. Елесин, *ЖЭТФ* **105**, 168 (1994).

Influence of nonmagnetic impurities and defects on superconducting pairing correlations with s^*- and $d_{x^2-y^2}$-symmetry and localization of Cooper pairs condensate in high-T_c superconductors

V. F. Elesin, A. V. Krasheninnikov, and L. A. Openov

The pairing correlation function in the Cu_4O_8 cluster have been calculated by exact diagonalization. It has been shown that under hole doping there are no pairing correlations with s-symmetry and that the correlations with s^*-symmetry are considerably stronger than the correlations with $d_{x^2-y^2}$-symmetry. The influence of Anderson disorder with degree W on pairing correlations with s^*- and $d_{x^2-y^2}$-symmetry has been investigated. The enhancement of the disorder has been found to result in significantly faster weakening of the correlations in the $d_{x^2-y^2}$-channel than in the s^*-channel. Under electron doping the correlations with s- and $d_{x^2-y^2}$-symmetry are absent and correlations with s^*-symmetry are weakly dependent on W. The results obtained, along with the hypotheses for the localization of Cooper pairs condensate, provide a self-consistent picture of the influence of nonmagnetic impurities and defects on p- and n-type high-T_c superconductors.