

К вопросу о плазмонном механизме высокотемпературной сверхпроводимости в слоистых кристаллах и двумерных системах

Э.А. Пашицкий, В.И. Пентегов

Институт физики НАН Украины, пр. Науки, 46, г. Киев, 03028, Украина
E-mail: pashitsk@iop.kiev.ua

Статья поступила в редакцию 13 августа 2007 г.

Проведен детальный сравнительный анализ выполненных в разных приближениях численных расчетов экранированного кулоновского и запаздывающего электрон-плазмонного взаимодействий в квазидвумерных слоистых кристаллах и двумерных (2D) системах с квазиакустическим или корневым спектром плазмонов. Показано, что даже в рамках простейшего приближения хаотических фаз эффективное притяжение, обусловленное обменом виртуальными плазмонами, может обеспечить переход в сверхпроводящее состояние с относительно высокой критической температурой T_c . Протяженные седловые особенности, характерные для 2D зонного спектра слоистых кристаллов купратных металлооксидных соединений, а также многочастичные кулоновские корреляции, описываемые кулоновскими вершинами (трехполосниками), способствуют существенному повышению максимальных значений T_c , которые согласуются с экспериментальными данными для высокотемпературных сверхпроводников. Показано, что плазмонный механизм приводит к куперовскому спариванию как в d -волновом, так и в s -волновом куперовских каналах, однако обменно-корреляционные эффекты подавляют сверхпроводимость в s -волновом канале. Проведенные расчеты указывают также на возможность получения за счет плазмонного механизма сверхпроводимости достаточно высоких T_c в 2D системах (типа графена).

Проведено детальний порівняльний аналіз виконаних у різних наближеннях чисельних розрахунків екранованої кулонівської і запізненої електрон-плазмонної взаємодії у квазидвовимірних шаруватих кристалах і двовимірних (2D) системах із квазіакустичним або корневим спектром плазмонів. Показано, що навіть у рамках найпростішого наближення хаотичних фаз ефективно притягання, що обумовлено обміном віртуальними плазмонами, може забезпечити перехід у надпровідний стан з відносно високою критичною температурою T_c . Протяжні сідлові особливості, що характерні для 2D зонного спектру шаруватих кристалів купратних металлооксидних сполук, а також багаточастинкові кулонівські кореляції, що описуються кулонівськими вершинами (трьохполосниками), сприяють істотному підвищенню максимальних значень T_c , які узгоджуються з експериментальними даними для высокотемпературних надпровідників. Показано, що плазмонний механізм призводить до куперівського спарювання як в d -хвильовому, так і в s -хвильовому куперівських каналах, однак обмінно-кореляційні ефекти пригнічують надпровідність в s -хвильовому каналі. Проведені розрахунки вказують також на можливість отримання за рахунок плазмонного механізму надпровідності досить високих T_c в 2D системах (типу графена).

PACS: 71.45.Gm Обмен, корреляции, диэлектрические и магнитные характеристики, плазмоны;
74.20.-z Теории и модели сверхпроводящего состояния;
74.72.-h Высокотемпературные сверхпроводящие соединения.

Ключевые слова: плазмонный механизм, экранированное кулоновское взаимодействие, спектр плазмонов, слоистые кристаллы, 2D системы, многочастичные кулоновские и обменные корреляции.

1. Введение

Несмотря на проводившиеся в течение двадцати лет интенсивные экспериментальные и теоретические исследования высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП), открытой в 1986 г. Беднорцом и Мюллером [1] в купратных металлооксидных соединениях (МОС), воп-

рос о механизме этого явления до настоящего времени остается дискуссионным.

Начиная с предложенной Андерсоном [2,3] концепции о «резонансных валентных связях» в двумерных (2D) слоях CuO_2 в купратных МОС, теоретические исследования механизма ВТСП пошли по пути примене-

ния дискретных узельных 2D моделей типа модели Хаббарда или $(t-J)$ -модели (см. обзоры [4,5]). Основанием для использования таких моделей в приближении сильной связи (tight-binding approximation) послужили первоначальные экспериментальные данные, полученные для керамических образцов купратных МОС (см., например, [6]), согласно которым эффективная масса носителей тока (дырок) в этих керамиках аномально велика, а их концентрация аномально мала по сравнению с металлами. Это привело к заключению об аномально узких зонах, о туннелировании почти локализованных носителей заряда между узлами кристаллической решетки и о наличии сильных межэлектронных обменных и кулоновских корреляций, что предопределило применение узельных моделей для описания ВТСП.

Однако после появления высококачественных монокристаллических образцов купратных МОС оказалось, что такие кристаллы, характеризующиеся слоистой или слоисто-цепочечной структурой, обладают сильной анизотропией проводимости и эффективной массы носителей тока. При этом значение продольной эффективной массы m_{\parallel}^* в плоскости слоев не превышает массу свободного электрона m_e и гораздо меньше поперечной эффективной массы m_{\perp}^* в направлении оси c , перпендикулярной слоям. Таким образом, стало ясно, что эмпирические данные о большой эффективной массе $m^* \gg m_e$ носителей тока в керамиках со случайной ориентацией отдельных кристаллитов являются следствием преобладающего вклада «тяжелой» поперечной массы m_{\perp}^* в усредненное по направлениям значение m^* .

В слоистых кристаллах купратных МОС с металлическим типом проводимости вдоль слоев безразмерный параметр плотности определяется как $r_s = \sqrt{2}(a_B^* k_F)$, где $a_B^* = \varepsilon_{\infty}/e^2 m_{\parallel}^*$ — эффективный борковский радиус в плоскости $a-b$ (здесь и далее полагаем постоянную Планка $\hbar = 1$), ε_{∞} — оптическая диэлектрическая проницаемость кристалла, которая определяется межзонными электронными переходами, а $k_F = \sqrt{2\pi\bar{n}d}$ — импульс Ферми при средней объемной концентрации носителей \bar{n} и расстоянии d между слоями. При выборе типичных для купратных МОС значений параметров $\bar{n} \approx 5 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$, $d = c \approx 10^{-7} \text{ см}$, $m_{\parallel}^* \approx m_e$ и $\varepsilon_{\infty} \approx 4-8$ получаем оценку $r_s \approx 1,5-3$, что соответствует достаточной высокой металлической плотности носителей тока в слоях CuO_2 (в обычных 3D металлах значение $r_s \approx (4\pi\bar{n}/3)^{1/3} a_B^* \leq 6$).

Отсюда следует, что для описания квазидвумерного движения электронов (дырок) в слоистых купратных МОС применим обычный ферми-жидкостной подход в рамках зонной теории анизотропного квазидвумерного металла со слабо гофрированной цилиндрической поверхностью Ферми (ПФ), что подтвердили зонные рас-

четы [7,8] и эксперименты по фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES-метод) [9].

В связи с этим обсуждалась (например, в [10]) возможность ВТСП за счет обычного электрон-фоонного взаимодействия (ЭФВ) в приближении сильной связи (strong coupling approximation), а в целом ряде работ (см. обзоры [11,12]) в рамках модели почти антиферромагнитной квазидвумерной ферми-жидкости рассматривался спин-флуктуационный механизм куперовского спаривания носителей тока в слоистых купратных МОС, обусловленный обменом виртуальными квантами коллективных возбуждений спиновой плотности (парамагнонами). С помощью такого «парамагонного» механизма ВТСП удалось описать d -волновую симметрию анизотропного сверхпроводящего (СП) параметра порядка в высокотемпературных сверхпроводниках, которая ранее была предсказана в рамках модели Хаббарда (см., например, [13]) и экспериментально наблюдалась в монокристаллах YBaCuO [14].

Однако следует иметь в виду, что спиновые флуктуации превалируют только в недодопированных купратных МОС вблизи границы с диэлектрической антиферромагнитной фазой, тогда как в оптимально допированных купратах с металлической проводимостью и максимальной критической температурой $T_c \geq 90 \text{ К}$ фазового перехода в СП состояние важную роль должны также играть кулоновские ферми-жидкостные эффекты и коллективные возбуждения зарядовой плотности (плазмоны).

Возможность куперовского спаривания носителей тока за счет обмена виртуальными плазмонами с квазиакустическим законом дисперсии, существование которых в многокомпонентных ферми-жидкостных системах с существенно разными фермиевскими скоростями разных типов носителей заряда было предсказано Пайнсом [15], обсуждалась задолго до открытия ВТСП. Впервые такой плазмонный механизм сверхпроводимости за счет электрон-плазмонного взаимодействия (ЭПВ) рассматривался в работах [16–20] для переходных металлов, многодолинных полупроводников и полуметаллов, а в [21–23] — для слоистых полупроводниковых структур.

После открытия ВТСП в купратных МОС со слоистой (LaBaCuO) или слоисто-цепочечной (YBaCuO) кристаллической структурой и квазидвумерным электронным спектром в целом ряде работ [24–29] обсуждался вопрос о роли ЭПВ в куперовском спаривании носителей тока (дырок) в купратных МОС в предположении о наличии «тяжелых» носителей заряда в узких зонах, а также в связи с квазиакустическим законом дисперсии плазменных колебаний электронной плотности в слоистых кристаллах [30].

В дальнейшем, когда с помощью ARPES-экспериментов были [31,32] обнаружены протяженные седловые особенности (СО) в квазидвумерном зонном спектре купратных МОС, в работах [33–40] рассматривалось влияние акустических плазмонов (АП), возникающих вследствие сильной анизотропии электронного спектра в плоскости $2D$ слоев, на экранированное кулоновское взаимодействие (ЭКВ) между электронами. При этом было показано, что обусловленная такими низкочастотными длинноволновыми АП импульсная зависимость статического экранированного кулоновского отталкивания с минимумом при малых передаваемых импульсах, аналогично анизотропному электрон-магнетонному взаимодействию [11–13] с максимальным отталкиванием в углах $2D$ зоны Бриллюэна (ЗБ), может способствовать d -волновому куперовскому спариванию носителей тока с достаточно высокой критической температурой СП перехода.

В настоящей работе для квазидвумерных слоистых кристаллов и $2D$ систем проведен детальный сравнительный анализ выполненных в разных приближениях численных расчетов межэлектронного взаимодействия, в основе которого лежит ЭКВ, включающее эффективное притяжение за счет запаздывающего ЭПВ, обусловленного обменом виртуальными плазмонами с квазиакустическим или корневым спектром. Показано, что даже в рамках простейшего приближения хаотических фаз (ПХФ) такое притяжение, при учете протяженных СО в $2D$ электронном спектре слоистых кристаллов купратных МОС, может обеспечить куперовское спаривание носителей тока как с d -волновой, так и s -волновой симметрией параметра порядка и с достаточно высокой критической температурой. Учет многочастичных кулоновских корреляций и, в частности, кулоновских вершин (трехполюсников), которые в данном случае, в отличие от ЭФВ, играют важную роль [25,36], приводит к значительному повышению максимальных значений $T_c \geq 100$ К, а концентрационная зависимость критической температуры удовлетворительно согласуется с экспериментальными данными для купратных МОС.

Следует отметить, однако, что пренебрежение обменными корреляциями (по аналогии с ЭФВ [41]), приводит к более высоким значениям T_c в куперовском s -канале по сравнению с d -каналом. Как показано в настоящей работе, учет части диаграмм с пересекающимися линиями ЭКВ в аномальной собственно-энергетической части, которые описывают обменные корреляции и могут быть просуммированы в «лестничном» приближении, слабо влияет на значение T_c^d в d -канале и, в то же время, существенно понижает T_c^s в s -канале, так что $T_c^d \approx T_c^s$. При этом максимальные значения $T_{c\max}^{s,d} \geq 140$ К при $\epsilon_\infty = 4$ существенно превышают экс-

периментальные значения $T_{c\max} \approx 90$ К для YBaCuO, тогда как при $\epsilon_\infty = 6$ максимальная критическая температура понижается до значения $T_{c\max}^{s,d} \geq 90$ К, близкого к экспериментальному.

Квазиизотропное ЭФВ усиливает притяжение в s -канале, тогда как обменное взаимодействие электронов с флуктуациями спиновой плотности (парамагнонами) усиливает притяжение в d -канале, так что наблюдаемая в высокотемпературных сверхпроводниках d -волновая симметрия СП параметра порядка является результатом конкуренции взаимодействий электронов с фононами, плазмонами и парамагнонами.

Проведенные расчеты указывают также на возможность получения достаточно высоких T_c в $2D$ системах (типа графена) за счет плазмонного механизма сверхпроводимости с анизотропным куперовским спариванием.

2. Спектр плазмонов и спектральная функция флуктуаций зарядовой плотности в слоистых кристаллах и $2D$ системах

Как известно, в $2D$ металлах спектр плазмонов $\omega_{pl}(q)$ в зависимости от $2D$ импульса q не имеет энергетической щели при $q \rightarrow 0$ и является корневым [42]: $\omega_{pl}(q) = \sqrt{2\pi e^2 n_{2D} q/m_e}$, где n_{2D} – число электронов на единицу площади. Это связано с тем, что матричный элемент неэкранированного кулоновского отталкивания между электронами в $2D$ металле имеет вид $V_c(q) = 2\pi e^2/q$, в отличие от $3D$ металла, где $V_c(q) = 4\pi e^2/q^2$ и $\omega_{pl}(0) \neq 0$.

В слоистых кристаллах с металлическими $2D$ слоями, расположенными периодически вдоль оси $c \parallel \hat{z}$ с периодом c , кулоновский матричный элемент без учета туннелирования электронов между слоями имеет вид [43]:

$$V_c(\mathbf{q}_{\parallel}, q_z) = \frac{2\pi e^2}{q_{\parallel}} \frac{\text{sh } q_{\parallel} c}{\text{ch } q_{\parallel} c - \cos q_z c}, \quad (1)$$

где \mathbf{q}_{\parallel} и q_z — продольная и поперечная составляющие передаваемого импульса \mathbf{q} .

В рамках ПХФ плазменная ветвь в простом слоистом кристалле с одним проводящим $2D$ слоем в элементарной ячейке определяется нулями реальной части продольной электронной диэлектрической проницаемости:

$$\epsilon_e(\mathbf{q}, \omega) = \epsilon_\infty + V_c(\mathbf{q}_{\parallel}, q_z) \Pi_e(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega), \quad (2)$$

где $\Pi_e(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega)$ — поляризационный оператор электронов с $2D$ спектром в слоях, зависящий от продольного передаваемого импульса \mathbf{q}_{\parallel} и частоты ω .

В связи с этим спектр плазмонов в таком простом слоистом кристалле в длинноволновом приближении описывается выражением [30]:

$$\omega_{\text{pl}}(q_{\parallel}, q_z) = \left[\frac{2\pi e^2 n_s}{\varepsilon_{\infty} m_{\parallel}^*} \frac{q_{\parallel} \text{sh} q_{\parallel} c}{\text{ch} q_{\parallel} c - \cos q_z c} + q_{\parallel}^2 v_F^2 \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (3)$$

где n_s — концентрация электронов в $2D$ слое, а v_F — их ферми-скорость. При $q_{\parallel} \rightarrow 0$ частота уменьшается от значения $\Omega_{\text{pl}} = \sqrt{4\pi e^2 n_s / \varepsilon_{\infty} m_{\parallel}^*} c$ при $q_z = 0$ до значения $\omega_{\text{pl}} \approx q_{\parallel} [\pi e^2 n_s c / \varepsilon_{\infty} m_{\parallel}^* + v_F^2]^{1/2}$ при $q_z = \pi/c$. Спектр плазмонов, а также область квантового затухания Ландау в слоистом кристалле показаны на рис. 1,а.

Особый интерес представляют слоистые кристаллы с несколькими проводящими слоями в элементар-

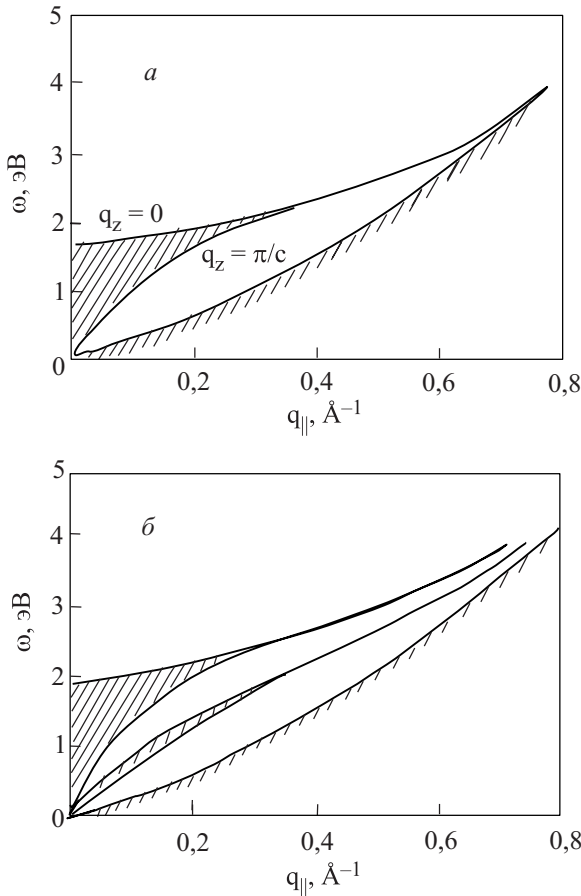


Рис. 1. Дисперсия плазмонов в слоистом кристалле с одним проводящим слоем в элементарной ячейке в зависимости от продольного импульса q_{\parallel} при непрерывном изменении поперечного импульса q_z в пределах от $q_z = 0$ до $q_z = \pi/c$. Нижняя кривая является верхней границей области квантового затухания Ландау (а). Дисперсия плазмонов в слоистом кристалле с двумя проводящими слоями в элементарной ячейке. В области между нижней границей плазмонной полосы и верхней границей области затухания находится дополнительная квазиакустическая плазменная ветвь, связанная с антифазными коллективными колебаниями электронной плотности в разных подрешетках, образованных $2D$ слоями, сдвинутыми друг относительно друга на расстояние $d < c$ [45] (б).

ной ячейке, к числу которых относятся такие купратные МОС, как YBaCuO , BiSrCaCuO , TlBaCaCuO и HgBaCaCuO . В случае кристалла с двумя $2D$ слоями в ячейке, наряду с кулоновским взаимодействием в одной подрешетке $V_{11} = V_c$ (см. (1)), следует учитывать взаимодействие электронов в разных подрешетках, сдвинутых на расстояние $d < c$, которое описывается матричным элементом [44,45]:

$$V_{12}(\mathbf{q}_{\parallel}, q_z) = \frac{2\pi e^2}{q_{\parallel}} \frac{\text{sh} q_{\parallel}(c-d) + e^{iq_z c} \text{sh} q_{\parallel} d}{\text{ch} q_{\parallel} c - \cos q_z c}. \quad (4)$$

В слоистом кристалле с двумя $2D$ слоями в элементарной ячейке плазменные ветви соответствуют нулям реальной части эффективной диэлектрической проницаемости, которая учитывает кулоновские взаимодействия как внутри подрешеток, так и между разными подрешетками (в отсутствие туннелирования электронов между слоями):

$$\tilde{\varepsilon}_e(\mathbf{q}_{\parallel}, q_z, \omega) = \varepsilon_1(\mathbf{q}_{\parallel}, q_z, \omega) \varepsilon_2(\mathbf{q}_{\parallel}, q_z, \omega) - |V_{12}(\mathbf{q}_{\parallel}, q_z)|^2 \Pi_1(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega) \Pi_2(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega), \quad (5)$$

где

$$\varepsilon_i(\mathbf{q}_{\parallel}, q_z, \omega) = \varepsilon_{\infty} + V_{ii}(\mathbf{q}_{\parallel}, q_z) \Pi_i(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega) \quad (i = 1, 2); \quad (6)$$

$V_{ii}(\mathbf{q}_{\parallel}, q_z, \omega)$ и $\Pi_i(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega)$ — матричный элемент и поляризационный оператор i -й подрешетки. В случае эквивалентных $2D$ слоев в подрешетках $V_{11} = V_{22} = V_c$ и $\Pi_1 = \Pi_2 = \Pi_e$. При этом, наряду с плазмонной полосой типа (3), возникает более низкочастотная квазиакустическая ветвь плазменных колебаний (рис. 1,б), которая соответствует противофазным колебаниям электронной плотности в разных подрешетках [45].

Важной характеристикой спектра плазмонов является их спектральная функция, которая для простых слоистых кристаллов и $2D$ систем определяется соотношением

$$S_{\text{pl}}(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left\{ \frac{V_c(\mathbf{q})}{\varepsilon_e(\mathbf{q}, \omega)} \right\}. \quad (7)$$

На приведенных ниже рисунках показаны результаты численных расчетов в рамках ПХФ спектральной функции плазмонов для простых слоистых кристаллов и $2D$ систем с разными электронными спектрами. Вычисления поляризационного оператора $\Pi_e(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega)$ проводились в мацубаровском представлении [46] при $T = 100$ К с последующим численным аналитическим продолжением на вещественную ось ω с помощью метода многоточечных аппроксимаций Паде, предложенного в [47].

На рис. 2,а показана частотная зависимость спектральной функции (7), усредненной по поперечному

импульсу q_z в пределах первой ЗБ от $q_z = -\pi/c$ до $q_z = \pi/c$:

$$S_{pl}(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega) = \langle S_{pl}(\mathbf{q}_{\parallel}, q_z, \omega) \rangle_{q_z} = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left\{ \frac{\alpha \text{sh} q_{\parallel} c}{[[2\alpha \Pi_e(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega) \text{sh} q_{\parallel} c + q c h q_{\parallel} c]^2 - q_{\parallel}^2]^{1/2}} \right\}, \quad (8)$$

введено обозначение $\alpha = 2\pi e^2/\epsilon_{\infty}$. Расчет проведен для простого слоистого кристалла с квадратной решеткой с периодом a в плоскости слоев и $2D$ зоной проводимости, спектр которой в приближении сильной связи имеет вид

$$E(k_x, k_y) = \frac{W}{4} (\cos k_x a + \cos k_y a), \quad (9)$$

где W – ширина зоны проводимости. Как видим, в спектре плазмонов появляются два острых пика, которые соответствуют особенностям плотности состояний на оптической (высокочастотный пик) и квази-акустической (низкочастотный пик) границах области

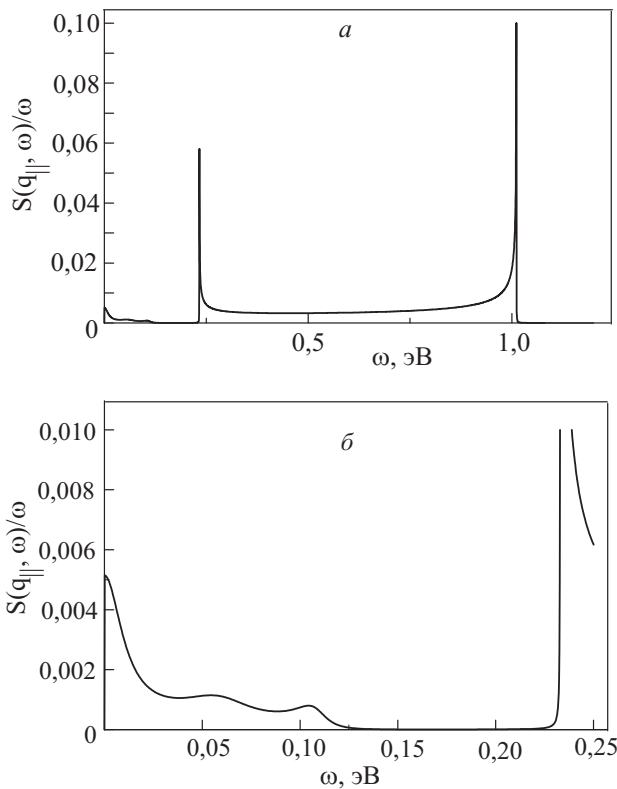


Рис. 2. Усредненная по поперечному импульсу q_z спектральная функция плазмонов (8), деленная на ω , для слоистого кристалла с одной подрешеткой проводящих слоев и зонным спектром (9). Высокочастотный и низкочастотный плазмонный пики соответствуют максимумам плотности состояний на верхней и нижней границах области дисперсии плазменных колебаний (3) (а). Низкочастотная область спектра плазмонов, на которой более детально показана структура функции $S_{pl}(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega)/\omega$ вблизи нулевой частоты (б). Расчеты проведены при $\mathbf{q}_{\parallel} = (\pi/32a, \pi/32a)$.

дисперсии плазмонов по q_z (см. рис. 1,а). Кроме того, функция $S_{pl}(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega)/\omega$ имеет небольшой пик при $\omega = 0$ (см. рис. 2,б), который связан с нулем диэлектрической проницаемости, лежащим в области сильного затухания плазмонов.

На рис. 3,а представлена спектральная функция простого слоистого кристалла с сильно анизотропным в плоскости слоев $2D$ спектром электронов, который характеризуется наличием протяженных СО вдоль кристаллографических осей \mathbf{a} и \mathbf{b} и имеет соответствующую им гигантскую сингулярность Ван Хофа в электронной плотности состояний (ПС). В качестве такого спектра использовалась дисперсия верхней (антисвязывающей) ветви зонного спектра YBaCuO, рассчитанного в работе [7], с шириной зоны проводимости $W \approx 2,6$ эВ. Как видно на рис. 3,а, плазмонные пики для зонного спектра [7] сдвинуты в сторону более низких частот по сравнению со спектром на рис. 2,а (при тех же импульсах \mathbf{q}_{\parallel}), а низкочастотный максимум функции $S_{pl}(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega)/\omega$ сдвинут в область конеч-

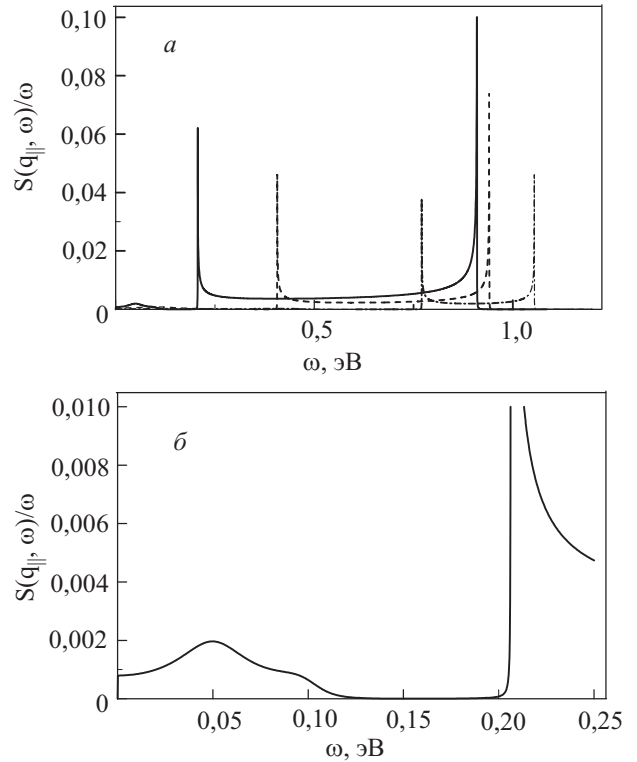


Рис. 3. Зависимость функции $S_{pl}(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega)/\omega$ от ω при разных значениях \mathbf{q}_{\parallel} для плазмонов в слоистом кристалле с одной подрешеткой и с анизотропным зонным спектром, который соответствует дисперсии антисвязывающей ветви зоны проводимости в YBaCuO [7]. Сплошная кривая — $\mathbf{q}_{\parallel} = (\pi/32a, \pi/32a)$, штриховая кривая — $\mathbf{q}_{\parallel} = (\pi/16a, \pi/16a)$, штрих-пунктирная кривая — $\mathbf{q}_{\parallel} = (\pi/8a, \pi/8a)$ (а). Структура спектра плазмонов в низкочастотной области, которая соответствует дополнительной квазиакустической плазменной ветви, обусловленной наличием протяженных СО [36,37] (б).

ных частот $\omega \neq 0$. При этом, как показано на рис. 3,б, в низкочастотной области существует горизонтальное «плато», а максимум при $\omega \approx 0,05$ эВ соответствует дополнительной акустической ветви слабо затухающих плазмонов, существование которой, как отмечалось в [36,37], обусловлено наличием протяженных СО в электронном спектре купратных слоев.

$$\tilde{S}_{pl}(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left\{ \frac{\alpha \left[\text{sh} q_{\parallel} c + 2 \frac{\alpha}{q_{\parallel}} \Pi_e(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega) \text{sh} q_{\parallel} (c-d) \text{sh} q_{\parallel} d \right]}{\left[\left[2\alpha \Pi_e(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega) \left(\text{sh} q_{\parallel} c + \frac{\alpha}{q_{\parallel}} \Pi_e(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega) \text{sh} q_{\parallel} (c-d) \text{sh} q_{\parallel} d \right) + q c \text{sh} q_{\parallel} c \right]^2 - q_{\parallel}^2 \right]^{1/2}} \right\}. \quad (10)$$

Как видим, наряду с упомянутыми выше двумя плазменными пиками, сдвинутыми в сторону более высоких частот, по сравнению с простыми слоистыми кристаллами (см. рис. 2,а и 3,а), в низкочастотной области наблюдаются два дополнительных узких пика, связанных с антифазными колебаниями электронной плотности в разных подрешетках (см. рис. 1,б), а также слабый максимум, обусловленный сильной анизотропией 2D зонного спектра с протяженными СО [36,37]. Следует подчеркнуть, что в отсутствие туннелирования электронов между слоями не происходит расщепление зон на связывающую и антисвя-

На рис. 4 показана усредненная по q_z спектральная функция плазмонов для слоистого кристалла с двумя подрешетками металлических 2D слоев с анизотропным зонным спектром [7], которая в данном случае определяется выражением

зывающую ветви, в отличие от реального кристалла YBaCuO с двумя проводящими слоями CuO₂ в элементарной ячейке. Тем не менее для удобства сравнения в качестве модельного спектра при расчете спектральной функции на рис. 4 был выбран тот же самый спектр антисвязывающей зоны, рассчитанный в [7] для YBaCuO.

Наконец, на рис. 5 для сравнения показана спектральная функция $S_{pl}(q_{\parallel}, \omega)/\omega$ для 2D металла с анизотропным спектром антисвязывающей зоны [7]. Как видно, в этом случае существует только один плазмонный пик, более детальная структура которого показана на вставке. Слабый низкочастотный максимум связан с наличием протяженных СО в зонном спектре (так же, как и на рис. 3 и 4).

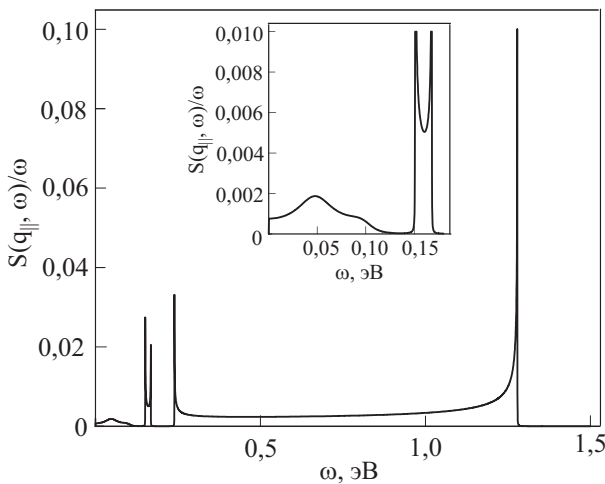


Рис. 4. Спектральная функция плазмонов в слоистом кристалле с двумя подрешетками 2D слоев и зонным спектром [7] при $\mathbf{q}_{\parallel} = (\pi/32a, \pi/32a)$. На вставке – более детальный вид низкочастотной области плазменного спектра. Здесь, наряду с особенностями, обусловленными наличием протяженных СО, видна также структура дополнительных пиков, связанных с антифазными колебаниями электронной плотности в разных подрешетках.

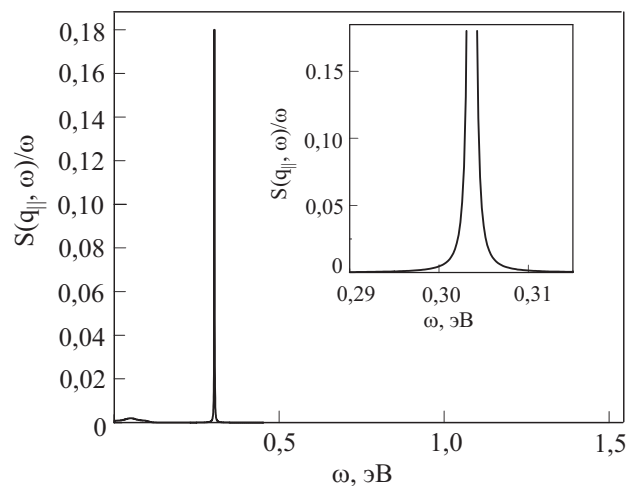


Рис. 5. Спектральная функция плазмонов в 2D металле с анизотропным зонным спектром [7] при $\mathbf{q}_{\parallel} = (\pi/32a, \pi/32a)$. На вставке более детально показан основной плазмонный пик.

3. Плазмонный механизм куперовского спаривания электронов и критическая температура перехода в сверхпроводящее состояние

Для вычисления критической температуры T_c и ее зависимости от положения уровня Ферми (УФ), т.е. от концентрации вырожденных носителей тока (электронов или дырок) в $2D$ зоне проводимости, будем использовать стандартный метод приближения сильной связи в теории сверхпроводимости [48,49] с запаздывающим ЭКВ в качестве основного межэлектронного

взаимодействия, ответственного за плазмонный механизм куперовского спаривания электронов.

При этом будем учитывать квазидвумерность электронного спектра в слоистых кристаллах МОС и сильную анизотропию зонного спектра в плоскости $2D$ слоев CuO_2 , обусловленную наличием протяженных СО в зонном спектре квазичастиц.

В этом случае усредненное по поперечному импульсу q_z уравнение Элиашберга [49] для анизотропного СП параметра порядка $\Delta(\mathbf{k}_{\parallel}, \omega)$ в проводящих $2D$ слоях CuO_2 при $T \rightarrow T_c$ имеет следующий вид (постоянную Больцмана k_B , так же, как и постоянную Планка \hbar , полагаем равной единице):

$$Z_c(\mathbf{k}_{\parallel}, \omega)\Delta(\mathbf{k}_{\parallel}, \omega) = \int d^2\mathbf{q}_{\parallel} \int_0^{\infty} \frac{d\omega'}{\omega'} \text{Re} \Delta(\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}, \omega') \left[K_{\text{pl}}^+(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega', \omega; T_c) - \langle V_c(\mathbf{q}_{\parallel}) \rangle \text{th} \left(\frac{\omega'}{2T_c} \right) \right] \Gamma_c^2(\mathbf{q}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel}; \omega', \omega), \quad (11)$$

где Z_c — ренормализационный фактор приближения сильной связи:

$$Z_c(\mathbf{k}_{\parallel}, \omega) = 1 - \frac{1}{\omega} \int d^2\mathbf{q}_{\parallel} \int_0^{\infty} d\omega' K_{\text{pl}}^-(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega', \omega; T_c) \Gamma_c(\mathbf{q}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel}; \omega', \omega); \quad (12)$$

Γ_c — нормальная кулоновская вершинная функция, описывающая многочастичные эффекты локального поля (см. ниже), а K_{pl}^{\pm} — ядра электрон-плазмонного взаимодействия (ЭПВ), определяющиеся соотношениями

$$K_{\text{pl}}^{\pm}(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega', \omega; T_c) = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} d\omega'' S_{\text{pl}}(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega'') \left\{ \left[\text{th} \left(\frac{\omega'}{2T_c} \right) + \text{cth} \left(\frac{\omega''}{2T_c} \right) \right] \left(\frac{1}{\omega' + \omega'' + \omega + i\delta} \pm \frac{1}{\omega' + \omega'' - \omega - i\delta} \right) - \left[\text{th} \left(\frac{\omega'}{2T_c} \right) - \text{cth} \left(\frac{\omega''}{2T_c} \right) \right] \left(\frac{1}{\omega' - \omega'' + \omega + i\delta} \pm \frac{1}{\omega' - \omega'' - \omega - i\delta} \right) \right\}. \quad (13)$$

Заметим, что нормальная кулоновская вершина Γ_c входит в уравнении (11) во второй степени, что связано с учетом аномальных кулоновских вершин в первом порядке по $\Delta(\mathbf{k}_{\parallel}, \omega)$ при $T \rightarrow T_c$. При этом, по аналогии с ЭФВ [41], здесь не учитываются диаграммы с пересекающимися линиями взаимодействия (приближенный учет таких диаграмм, которые в случае ЭКВ не малы, проводится ниже).

В уравнении (11) для разделения запаздывающего ЭПВ и статического кулоновского отталкивания использовано известное соотношение Крамерса–Кронига для комплексной диэлектрической проницаемости [50], которое можно записать в виде

$$\frac{V_c(\mathbf{q}_{\parallel}, q_z)}{\varepsilon_e(\mathbf{q}_{\parallel}, q_z, \omega)} = V_c(\mathbf{q}_{\parallel}, q_z) + \int_0^{\infty} d\omega' \frac{S_{\text{pl}}(\mathbf{q}_{\parallel}, q_z, \omega')}{\omega' - \omega - i\delta}. \quad (14)$$

Из (11) и (13) следует, что на ферми-поверхности, когда энергия квазичастиц $\omega \rightarrow 0$ при $T \rightarrow T_c$, для достаточ-

но высокочастотных пиков в усредненной по q_z спектральной функции плазмонов $S_{\text{pl}}(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega'')$ с учетом полюса подынтегрального выражения в (11) при $\omega' = 0$ ядро K_{pl}^+ , согласно (13), с хорошей точностью приводится к виду

$$K_{\text{pl}}^+(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega', 0; T_c) = \lambda_{\text{pl}}(\mathbf{q}_{\parallel}) \text{th} \left(\frac{\omega'}{2T_c} \right), \quad (15)$$

где

$$\lambda_{\text{pl}}(\mathbf{q}_{\parallel}) = \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\omega} S_{\text{pl}}(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega). \quad (16)$$

Как видим, параметр взаимодействия $\lambda_{\text{pl}}(\mathbf{q}_{\parallel})$, который характеризует интенсивность ЭПВ, определяется функцией $S_{\text{pl}}(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega)/\omega$, показанной на рис. 2–5.

Для численного решения интегрального уравнения (11) будем использовать мацубаровское представление [46], проводя суммирование по мнимым дискретным фермионным и бозонным частотам $i\omega_n = i(2n+1)\pi T_c$ и $i\nu_n = i2n\pi T$ ($n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$). Интегрирование по пере-

даваемому $2D$ импульсу \mathbf{q}_{\parallel} в пределах первой ЗБ с периодическими граничными условиями также заменим суммированием по дискретным значениям $q_x = \pi k/(Na)$ и $q_y = \pi l/(Na)$ ($k, l = -N+1, \dots, -1, 0, 1, \dots, N$).

В качестве межэлектронного взаимодействия используем усредненный по поперечному импульсу q_z матричный элемент экранированного кулоновского взаимодействия, который для простого слоистого кристалла с

одним слоем в элементарной ячейке при учете эффектов запаздывания равен

$$\tilde{V}_c(\mathbf{q}_{\parallel}, \nu_n) = \left\langle \frac{V_c(\mathbf{q})}{\varepsilon_{\infty} + V_c(\mathbf{q})\tilde{\Pi}_e(\mathbf{q}_{\parallel}, \nu_n)} \right\rangle_{q_z}, \quad (17)$$

где $\tilde{\Pi}_e(\mathbf{q}_{\parallel}, \nu_n)$ — перенормированный поляризационный оператор электронов при $T \neq 0$:

$$\tilde{\Pi}_e(\mathbf{q}_{\parallel}, \nu_n) = -\frac{2T}{a^2 N^2} \sum_{\omega_n} \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} G(\mathbf{k}_{\parallel}, \omega_n) G(\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}, \omega_n + \nu_n) \Gamma_c(\mathbf{k}_{\parallel}, \omega_n; \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}, \omega_n + \nu_n), \quad (18)$$

N^2 — полное число дискретных значений импульса в пределах первой ЗБ, а $G(\mathbf{k}_{\parallel}, \omega_n)$ — одноэлектронная функция Грина:

$$G(\mathbf{k}_{\parallel}, \omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - E(k) + \mu - \Sigma_c(\mathbf{k}_{\parallel}, \omega_n)}. \quad (19)$$

Здесь μ — химический потенциал, связанный с $2D$ концентрацией электронов n_e в слое соотношением

$$n_e = \frac{1}{a^2} \left(\frac{2T}{N^2} \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} \sum_{\omega_n > 0} \text{Re} G(\mathbf{k}_{\parallel}, \omega_n) + \frac{1}{2} \right), \quad (20)$$

а $\Sigma_c(\mathbf{k}_{\parallel}, \omega_n)$ — кулоновская часть собственной энергии электронов

$$\Sigma_c(\mathbf{k}_{\parallel}, \omega_n) = -\frac{T}{a^2 N^2} \sum_{\omega'_n} \sum_{\mathbf{k}'_{\parallel}} \tilde{V}_c(\mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{k}'_{\parallel}, \omega_n - \omega'_n) G(\mathbf{k}'_{\parallel}, \omega'_n) \Gamma_c(\mathbf{k}_{\parallel}, \omega_n; \mathbf{k}'_{\parallel}, \omega'_n). \quad (21)$$

Заметим, что для проведения вычислений во всем объеме ЗБ необходимо учитывать периодичность решетки, так что матричный элемент неэкранированного кулоновского взаимодействия V_c , вычисленный в базисе блоховских электронных функций, должен зависеть не только от передаваемого импульса $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$, но и от электронных импульсов \mathbf{k} и \mathbf{k}' . Тем не менее, как было показано в [51,52], периодичность блоховских множителей может быть приближенно учтена путем замены $V_c(\mathbf{q})$ в (17) следующим модельным периодическим кулоновским потенциалом:

$$V_c(\mathbf{q}_{\parallel}, q_z) = \frac{2\pi e^2}{Q(\mathbf{q}_{\parallel})} \frac{\text{sh} Q(\mathbf{q}_{\parallel})c}{\text{ch} Q(\mathbf{q}_{\parallel})c - \cos q_z c}, \quad (22)$$

где

$$Q(\mathbf{q}_{\parallel}) = \frac{2}{a} \sqrt{\sin^2 \left(\frac{q_x a}{2} \right) + \sin^2 \left(\frac{q_y a}{2} \right)}. \quad (23)$$

При $q_{\parallel} = \sqrt{q_x^2 + q_y^2} \rightarrow 0$ выражение (22) сводится к (1).

Для вычисления кулоновской вершины Γ_c воспользуемся аппроксимацией Намбу [53]:

$$\Gamma_c(\mathbf{k}_{\parallel}, \omega_n; \mathbf{q}_{\parallel}, \nu_m) = \frac{1}{2} [Z_c(\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}, \omega_n + \nu_m) + Z_c(\mathbf{k}_{\parallel}, \omega_n)], \quad (24)$$

которая удовлетворяет тождествам Уорда [54,55] при $q \rightarrow 0$ для заряженной ферми-жидкости. Здесь Z_c — кулоновский ренормализационный фактор электронного спектра, учитывающий эффекты запаздывания в ЭПВ:

$$Z_c(\mathbf{k}_{\parallel}, \omega_n) = 1 - \frac{\text{Im} \Sigma_c(\mathbf{k}_{\parallel}, \omega_n)}{\omega_n}. \quad (25)$$

Система уравнений (17)–(25), определяющая нормальную собственную энергию электронов Σ_c и перенормировку электронного спектра за счет многочастичных кулоновских корреляций, решалась методом итераций с помощью быстрого разложения Фурье на решетке, содержащей $N \times N$ точек в $2D$ зоне Бриллюэна ($N = 64$) и до 2048 точек на мнимой частотной оси.

Этот же метод использовался для решения линейризованного при $T \rightarrow T_c$ интегрального уравнения для аномальной собственной энергии электронов (параметра порядка)

$$\Phi_c(\mathbf{k}_{\parallel}, \omega_n) = -\frac{T}{a^2 N^2} \sum_{\omega'_n} \sum_{\mathbf{k}'_{\parallel}} \tilde{V}_c(\mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{k}'_{\parallel}, \omega_n - \omega'_n) |G(\mathbf{k}'_{\parallel}, \omega'_n)|^2 \Gamma_c(\mathbf{k}_{\parallel}, \omega_n; \mathbf{k}'_{\parallel}, \omega'_n) \Phi_c(\mathbf{k}'_{\parallel}, \omega') \Gamma_c(\mathbf{k}'_{\parallel}, \omega'_n; \mathbf{k}_{\parallel}, \omega_n). \quad (26)$$

Заметим, что уравнение (11) является результатом аналитического продолжения (26) на вещественную частотную ось.

При решении уравнения (26) симметрия СП параметра порядка $\Phi_c(\mathbf{k}_{\parallel}, \omega_n)$ выбиралась в соответствии с различными неприводимыми представлениями группы симметрии $2D$ кристаллической решетки купратных слоев CuO_2 . Для каждого из этих представлений при разных температурах T и электронных концентрациях $x = n_e a^2$ (в расчете на элементарную ячейку) с помощью метода итераций вычислялись максимальные собственные значения $\Lambda(T, x)$ ядра матричного уравнения (26). Критическая температура СП перехода T_c , как функция концентрации x , определялась из условием $\Lambda(T_c, x) = 1$. Вычисления проводились при $\epsilon_{\infty} = 4$ для антисвязывающей ветви зонного спектра YBaCuO , рассчитанного в [7].

На рис. 6 показаны полученные в рамках ПХФ концентрационные зависимости критической температуры T_c в d -волновом канале куперовского спаривания за счет ЭПВ для разных типов слоистых кристаллов и $2D$ систем. Как видим, наличие протяженных СО в зонном спектре $2D$ слоев в кристаллах с одним слоем в элементарной ячейке, благодаря более низкочастотному плазмонному спектру (рис. 3), приводит к значительному повышению T_c (кривая 2) по сравнению со слоистым кристаллом с простой зоной и с более жестким плазмонным спектром (рис. 2) при той же ширине зоны проводимости $W \approx 2,6$ эВ (кривая 1).

В то же время, при наличии двух слоев в элементарной ячейке слоистого кристалла без учета туннелирования электронов между слоями и расщепления зоны проводимости на связывающую и антисвязывающую ветви максимум T_c существенно понижается (кривая 3) за счет того, что в целом плазмонный спектр, несмотря на появление дополнительных низкочастотных пиков (рис. 4), связанных с антифазными колебаниями носителей тока в разных подрешетках, становится более жестким, чем в однослойном кристалле (ср. рис. 2 и 3).

С другой стороны, в $2D$ системе со сравнительно низкочастотным плазмонным пиком (рис. 5) значение T_c заметно выше (кривая 4), чем в простом слоистом кристалле с таким же зонным спектром (кривая 2). Это указывает на то, что в проводящих $2D$ системах, примером которых может служить моноатомный слой графита (графен), в принципе, при оптимальном уровне допирования возможна сверхпроводимость с достаточно высокими T_c за счет плазмонного механизма куперовского спаривания.

Следует подчеркнуть, что в интегральных уравнениях для нормальной и аномальной собственно-энергетических частей в случае ЭПВ необходимо учитывать кулоновские вершины Γ_c , для которых, в отличие от фононных вершин Γ_{ph} , не выполняется теорема Мигдала [56]. В результате этого поправки к собственной энергии и вершине Γ_c уже в первом порядке по взаимодействию приводят к существенному повышению T_c по сравнению с ПХФ. Влияние многочастичных кулоновских корреляций на величину T_c в слоистом кристалле с одним слоем в элементарной ячейке иллюстрируют кривые 1 и 2 на рис. 7.

Кривая 3 на рис. 7 демонстрирует результаты проведенного в [39,40] расчета T_c , в котором самосогласованно учитываются эффекты перенормировки собственной энергии электронов и вершинной части Γ_c , вычисляемой в приближении Намбу [53]. Как видим, в этом случае достигается весьма высокое максимальное значение критической температуры ($T_c \geq 140$ К), но существенно изменяется концентрационная зависимость T_c по сравнению с ПХФ. При этом T_c обращается в нуль в точке $x = x_0$, соответствующей совмещению УФ с гигантской сингулярностью Ван Хофа в

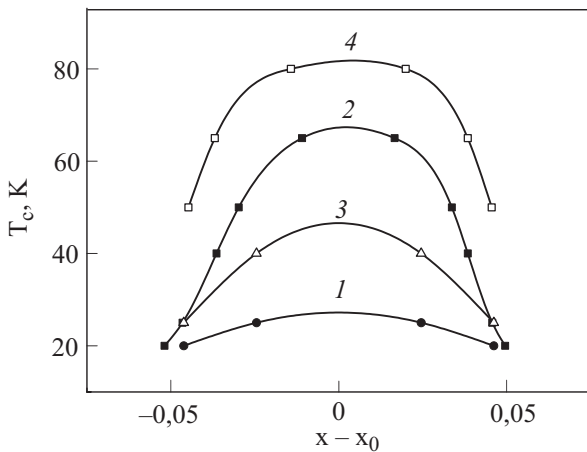


Рис. 6. Рассчитанные в рамках ПХФ концентрационные зависимости критической температуры перехода в СП состоянии T_c^d в $d_{x^2-y^2}$ -куперовском канале для слоистого кристалла с одним проводящим слоем в элементарной ячейке с зонным спектром (9) (кривая 1), а также для кристаллов с одним (кривая 2) и двумя (кривая 3) проводящими слоями в элементарной ячейке с зонным спектром антисвязывающей ветви [7]. Кривая 4 демонстрирует зависимость $T_c^d(x)$ для $2D$ металла с зонным спектром [7]. Здесь x — безразмерная концентрация дырок (в расчете на одну ячейку), а значение $x = x_0$ соответствует положению УФ на протяженных СО.

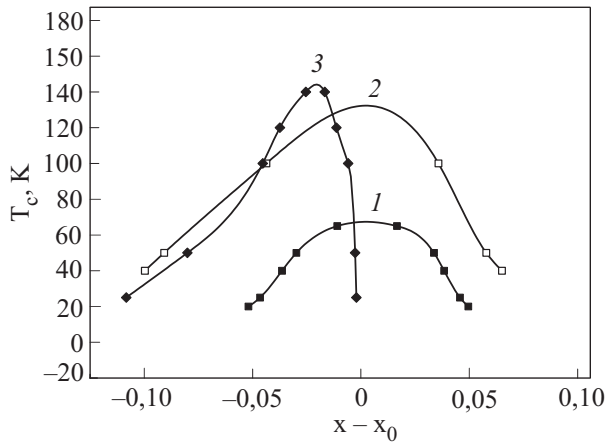


Рис. 7. Концентрационные зависимости T_c^d , вычисленные в разных приближениях для слоистого кристалла с одним слоем в ячейке и анизотропным спектром [7]: ПХФ (см. кривую 2 на рис. 6) (1); ПХФ с учетом перенормировки собственной энергии и кулоновской вершины в первом порядке по взаимодействию (2); полный самосогласованный расчет [39,40] с учетом перенормировки собственной энергии и кулоновской вершины (но без учета обменных корреляций) (3).

электронной ПС, которая обусловлена протяженными СО. Аналогичная концентрационная зависимость T_c была получена аналитически в [35] как следствие корневой особенности ПС для квазиодномерного электронного спектра вблизи протяженных СО.

4. Конкуренция между *s*- и *d*-волновыми симметриями параметра порядка при плазмонном механизме сверхпроводимости

Приведенные в предыдущем разделе результаты самосогласованных вычислений критической температуры в *d*-волновом куперовском канале T_c^d показывают, что плазмонный механизм при учете многочастичных кулоновских корреляций и сильной анизотропии зонного спектра в плоскости слоев за счет протяженных СО может обеспечить сверхпроводимость с весьма высокими $T_c^d \geq 140$ К (см. кривую 3 на рис. 7).

Аналогичные расчеты критической температуры T_c^s в *s*-волновом канале куперовского спаривания за счет ЭПВ, показывают, что T_c^s заметно выше, чем T_c^d во всех рассмотренных приближениях: в рамках ПХФ (кривые 1 и 1' на рис. 8,а), при учете поправок первого порядка по взаимодействию (кривые 2 и 2' на рис. 8,а) и при последовательном самосогласованном расчете (рис. 8,б).

Однако, как отмечалось выше, в проведенных вычислениях T_c на основе интегрального уравнения (26), не учитывались диаграммы с пересекающимися линиями ЭКВ (рис. 9,а,б), которые описывают обменные корреляции между электронами.

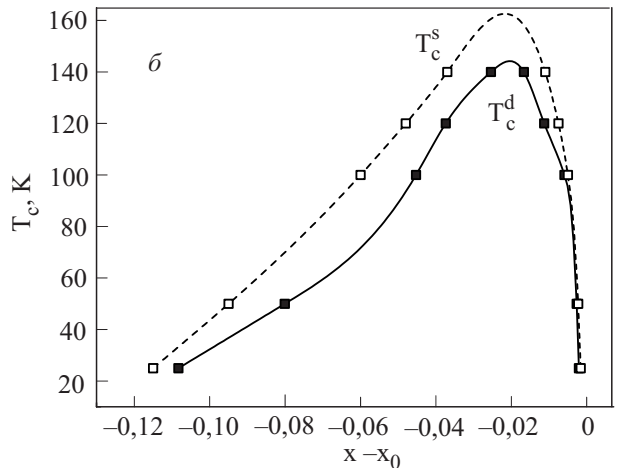
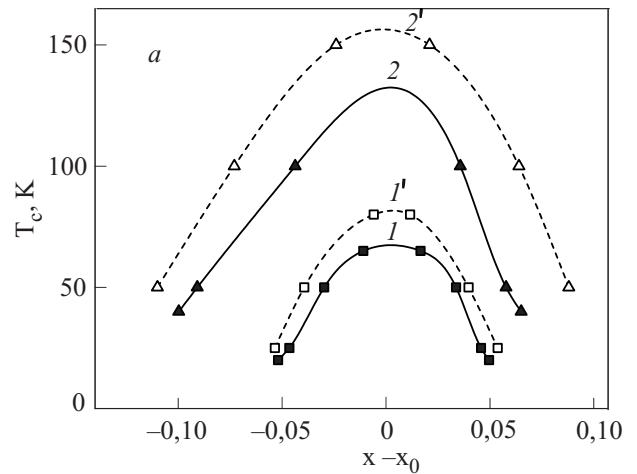


Рис. 8. Концентрационные зависимости критической температуры T_c для слоистого кристалла с одним слоем в ячейке и зонным спектром [7], вычисленные в *d*-волновом (сплошные кривые) и *s*-волновом (штриховые кривые) куперовских каналах в рамках ПХФ (кривые 1 и 1') и с учетом поправок в первом порядке по взаимодействию (кривые 2 и 2') (а). Концентрационные зависимости T_c^d (сплошная кривая) и T_c^s (штриховая кривая), полученные на основе самосогласованных расчетов для зонного спектра [7] без учета обменных корреляций (зависимость $T_c^d(x)$ соответствует кривой 3 на рис. 7) (б).

В работе [52] был предложен приближенный способ учета таких диаграмм путем приведения их к последовательности простых «лестничных» диаграмм (рис. 9,в), в которых роль «перекладин» играет усредненное по передаваемому импульсу статическое ЭКВ.

Концентрационные зависимости T_c в *d*-волновом и *s*-волновом куперовских каналах с учетом суммирования таких дополнительных диаграмм показаны на рис. 10,а. Как видим, в этом случае $T_c^d \approx T_c^s$, т.е. обменные эффекты почти не влияют на спаривание в *d*-канале, но понижают T_c в *s*-канале. Тем не менее максимальное значение $T_{c\max}^d$ все еще несколько ниже, чем $T_{c\max}^s$, и значительно превышает экспериментально наблюдаемое значение $T_{c\max} \approx 90$ К в YBaCuO [6].

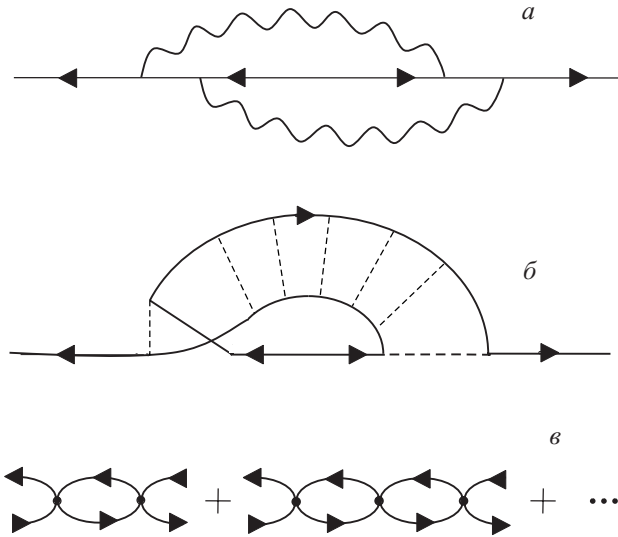


Рис. 9. Диаграммы с пересекающимися линиями взаимодействия, которые описывают обменно-корреляционные эффекты в аномальной собственно-энергетической части: простейшая диаграмма с двумя пересекающимися линиями запаздывающего ЭКВ (а); диаграмма высшего порядка по ЭКВ (б); последовательность «лестничных» диаграмм с локальным взаимодействием (жирные точки), роль которого играет усредненное по импульсам статическое ЭКВ (в).

Одной из возможных причин столь высоких значений T_c^d и T_c^s (рис. 10,а) может быть заниженная величина оптической диэлектрической проницаемости кристалла $\epsilon_\infty = 4$, которая существенно влияет как на интенсивность запаздывающего ЭПВ, так и на величину статического ЭКВ. В связи с этим были проведены самосогласованные расчеты T_c при $\epsilon_\infty = 6$ для d -волнового и s -волнового куперовских каналов. Результаты этих расчетов показаны на рис. 10,б. Как видим, увеличение параметра ϵ_∞ в полтора раза понижает максимальные значения T_c в обоих каналах до значений, близких к экспериментальному значению $T_{c\max} \approx 90$ К для YBaCuO. При этом немонотонные концентрационные зависимости $T_c^{s,d}$ также вполне удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными [6].

Наблюдаемая в реальных кристаллах купратных МОС $d_{x^2-y^2}$ -симметрия СП параметра порядка соответствует условию $T_c^d > T_c^s$, которое в рамках использованного выше приближения не выполняется. Однако при более последовательном рассмотрении обменных эффектов, в частности, при учете (наряду с дальнедействующим ЭКВ) локального хаббардовского взаимодействия электронов с противоположными спинами на узлах кристаллической решетки [52], которое способствует d -волновому куперовскому спариванию, следует ожидать усиления эффективного притяжения в d -волновом канале и существенного повышения T_c^d .

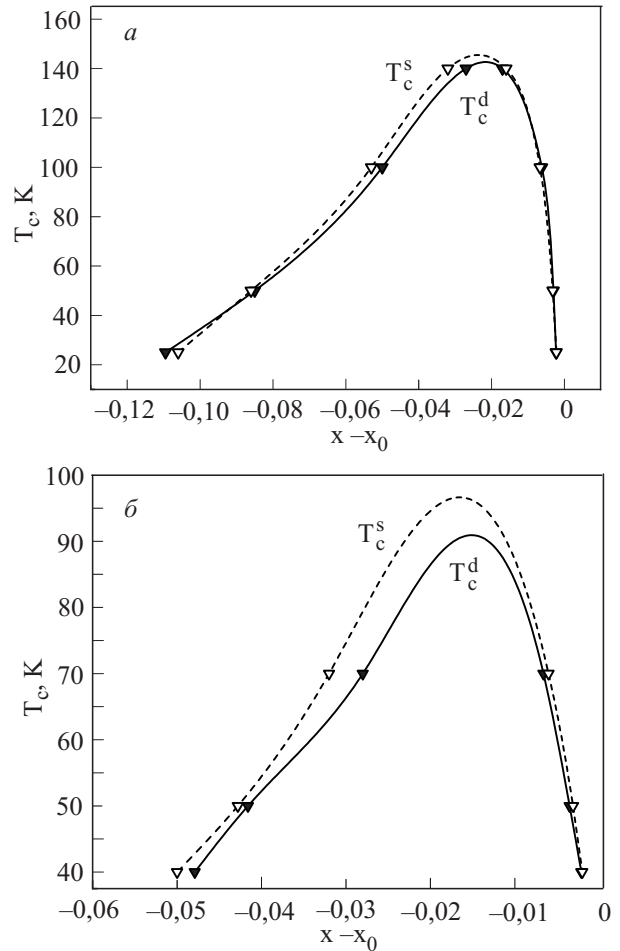


Рис. 10. Концентрационные зависимости T_c^d (сплошная кривая) и T_c^s (штриховая кривая), полученные для $\epsilon_\infty = 4$ (а) и $\epsilon_\infty = 6$ (б) с помощью самосогласованных численных расчетов при учете «лестничных» диаграмм (см. рис. 9,в), приближенно описывающих обменные эффекты.

С другой стороны, следует иметь в виду, что наряду с дальнедействующим запаздывающим ЭКВ и хаббардовским отталкиванием на узле, в купратных МОС присутствует обычное ЭФВ, которое содержит изотропную в плоскости 2D слоев составляющую и, следовательно, должно усиливать сверхпроводимость в s -волновом куперовском канале. Кроме того, ЭФВ в кристаллах купратных МОС, как было показано в [57], может содержать также анизотропную составляющую, которая возникает за счет оптических колебаний ионов кислорода O^{2-} и способствует d -волновому спариванию. Однако, судя по малой величине изотопического эффекта по кислороду в купратных МОС [58–60], такая анизотропная добавка к константе ЭФВ невелика. В связи с этим можно заключить, что d -волновая симметрия СП параметра порядка в купратных МОС, соответствующая условию $T_c^d > T_c^s$, является результатом конкуренции между дальнедействующим кулоновским, запаздывающим электрон-плазмонным, электрон-магнетонным (обменным) и электрон-фононным

взаимодействиями. Для подтверждения этого вывода необходимы более детальные теоретические исследования и численные расчеты.

5. Заключение

В настоящей работе проведен сравнительный анализ результатов численных расчетов критической температуры СП перехода, выполненных в различных приближениях для механизма куперовского спаривания за счет экранированного кулоновского и запаздывающего электрон-плазмонного взаимодействий в слоистых кристаллах купратных МОС и $2D$ металлах с квазиакустическим спектром плазмонов. Показано, что при самосогласованном учете многочастичных кулоновских корреляций и особенностей квазидвумерного зонного спектра электронов с характерными для купратных МОС протяженными СО, запаздывающее ЭПВ в таких системах способно обеспечить достаточно высокие максимальные значения T_c как в s -волновом, так и d -волновом куперовских каналах. Такой плазмонный механизм сверхпроводимости позволяет объяснить, наряду с высокими $T_{c\max} \geq 100$ К при оптимальном допировании, такие особенности явления ВТСП в купратных МОС, как немонотонная зависимость T_c от уровня допирования, отсутствие сверхпроводимости в передопированных образцах, слабый изотопический эффект. Заметим в связи с этим, что изотопический эффект в купратных МОС наблюдается только по кислороду и меди (в $\text{La}_{2-x}(\text{Ba,Sr})_x\text{CuO}_4$ с $T_{c\max} \approx 36$ К), тогда как при замене изотопов других элементов, входящих в состав купратных МОС, показатель изотопического сдвига T_c равен нулю. Это объясняется тем обстоятельством, что максимальные частоты фононов, связанных с колебаниями тяжелых атомов (La, Ba, Sr, Y, Bi, Tl, Hg), не превышают характерную величину $\pi T_{c\max}$ и поэтому не вносят сколько-нибудь заметный вклад в ЭФВ (см. [50]). Только частоты оптических колебаний сравнительно легких ионов кислорода и меди могут превышать величину $\pi T_{c\max} \geq (100 - 300)$ К, которая достигается в купратных МОС за счет нефононных механизмов ВТСП и, в частности, благодаря плазмонному механизму куперовского спаривания, рассмотренному в настоящей работе (см. также [33–40]).

Отметим, что высокие значения T_c достигаются за счет ЭПВ уже в рамках простой однозонной модели, в которой спектр электронов соответствует антисвязывающей ветви расчетного спектра YBaCuO [7]. Учет расщепления зоны проводимости за счет многослойной структуры элементарной ячейки, характерной для купратных МОС, и его влияния на T_c в рамках плазмонного механизма сверхпроводимости требует дополнительного рассмотрения. Кроме того, наиболее последовательным представляется предложенный в [52] подход с одновременным учетом дальнедействующего кулонов-

ского и локального хаббардовского взаимодействий [52], однако эти вопросы выходят за рамки настоящей работы и будут рассмотрены отдельно.

Наконец, представляют самостоятельный интерес результаты, полученные в данной работе для $2D$ систем с корневым законом дисперсии плазмонов, для которых запаздывающее ЭПВ может также обеспечить достаточно высокие T_c (при условии, что $2D$ система имеет макроскопические продольные размеры). Разумеется, эти результаты, полученные для кристаллической структуры и зонного спектра купратных МОС, не могут быть непосредственно применены к описанию такой $2D$ системы, как графен, гексагональная кристаллическая структура которого обладает осью симметрии 3-го порядка. Тем не менее спектр $2D$ плазмонов в графене определяется, прежде всего, двумерностью системы, а не симметрией кристаллической решетки, и качественно не отличается от плазмонного спектра в $2D$ кристалле с квадратной решеткой. С другой стороны, в зонном спектре графена так же, как и в купратных МОС вблизи ПФ существуют протяженные СО в трех главных кристаллографических направлениях [61], что должно способствовать повышению T_c в графене в анизотропном s -волновом канале.

Работа выполнялась в рамках научно-исследовательской темы ВЦ 139/38 Президиума НАН Украины.

1. J.G. Bednorz and K.A. Müller, *Z. Phys.* **B64**, 189 (1986).
2. P.W. Anderson, *Science* **59**, 16 (1987).
3. P.W. Anderson, *The Theory of Superconductivity in the High- T_c Cuprates*, Princeton Univ. Press, Princeton (1997).
4. E. Dagotto, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 763 (1994).
5. D.J. Scalapino, *Phys. Rep.* **250**, 329 (1995).
6. *Физические свойства высокотемпературных сверхпроводников*. Д.М. Гинзберг (ред.), Мир, Москва (1990).
7. O.K. Andersen, O. Jepsen, A.I. Liechtenstein, and I.I. Mazin, *Phys. Rev.* **B49**, 4145 (1994).
8. A.I. Liechtenstein, O. Gunnarsson, O.K. Andersen, and R.M. Martin, *Phys. Rev.* **B54**, 12505 (1996).
9. A. Damascelli, Z. Hussain, and Z.-X. Shen, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 473 (2003).
10. Е.Г. Максимов, *УФН* **170**, 1033 (2000).
11. P. Monthoux, A.V. Balatsky, and D. Pines, *Phys. Rev.* **B46**, 14803 (1992).
12. P. Monthoux and D. Pines, *Phys. Rev.* **B47**, 6069 (1993).
13. N.E. Bickers, D.J. Scalapino, and S.R. White, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 961 (1989).
14. D.A. Wollman, D.J.V. Harlingen, J. Giapintzakis, and D.M. Ginsberg, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 797 (1995).
15. D. Pines, *Can. J. Phys.* **34**, 1379 (1956).
16. H. Fröhlich, *Proc. Phys. Soc.* **C1**, 544 (1968).
17. Э.А. Пашицкий, *ЖЭТФ* **55**, 2387 (1968).
18. Э.А. Пашицкий, В.М. Черноусенко, *ЖЭТФ* **60**, 1483 (1971).
19. Э.А. Пашицкий, В.Л. Макаров, С.Д. Терещенко, *ФТТ* **16**, 276 (1974).
20. Б.Т. Гейликман, *УФН* **109**, 65 (1973).

21. Э.А. Пашицкий, *ЖЭТФ* **56**, (1969).
22. Э.А. Пашицкий, Ю.А. Романов, *УФЖ* **15**, 1596 (1970).
23. А.М. Габович, Д.Г. Моисеев, Э.А. Пашицкий, С.К. Уварова, *ФНТ* **1**, 984 (1975).
24. J. Ruvalds, *Phys. Rev.* **B35**, 8869 (1987).
25. Э.А. Пашицкий, В.Л. Винецкий, *Письма в ЖЭТФ* **46**, 124 (1987).
26. Э.А. Пашицкий, *УФЖ* **33**, 737 (1988).
27. Э.А. Пашицкий, *ФТТ* **31**, 46 (1989).
28. Э.А. Пашицкий, *СФХТ* **3**, 2669 (1990).
29. Э.А. Пашицкий, *Письма в ЖЭТФ* **57**, 648 (1993).
30. V.Z. Kresin and H. Morawitz, *Phys. Rev.* **B37**, 7854 (1988).
31. A. Abrikosov, J.C. Campuzano, and K. Gofron, *Physica C* **214**, 73 (1993).
32. K. Gofron, J.C. Campuzano, A.A. Abrikosov, M. Lindross, A. Bansil, H. Ding, D. Koelling, and B. Dabrowski, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 3302 (1994).
33. Э.А. Пашицкий, В.И. Пентегов, А.В. Семенов, *ФНТ* **22**, 479 (1996).
34. Э.А. Пашицкий, В.И. Пентегов, А.В. Семенов, *ФНТ* **23**, 140 (1997).
35. Э.А. Пашицкий, В.И. Пентегов, Э. Абрахам, *Письма в ЖЭТФ* **67**, 473 (1998).
36. Э.А. Пашицкий, В.И. Пентегов, А.В. Семенов, Э. Абрахам, *Письма в ЖЭТФ* **69**, 703 (1999).
37. Э.А. Пашицкий, В.И. Пентегов, *ФНТ* **27**, 140 (2001).
38. E.A. Pashitskii and V.I. Pentegov, in: *Models and Methods in High-Temperature Superconductivity: Some Frontal Aspects*, J.K. Srivastava and S.N. Rao (eds.), Nova Science Publishers, Hauppauge, New York (2003), v. 1, p. 299.
39. Э.А. Пашицкий, В.И. Пентегов, *УФЖ* **50**, A77 (2005).
40. E.A. Pashitskii and V.I. Pentegov, *Int. J. Mod. Phys.* **B19**, 107 (2005).
41. О. Долгов, Е.Г. Максимов, *Труды ФИАН* **148**, 3 (1982).
42. F. Stern, *Phys. Rev. Lett.* **18**, 546 (1967).
43. A.L. Fetter, *Ann. Phys.* **88**, 1 (1974).
44. A. Griffin, *Phys. Rev.* **B38**, 8900 (1988).
45. A. Griffin and A.J. Pindor, *Phys. Rev.* **B39**, 11503 (1989).
46. T. Matsubara, *Prog. Theor. Phys.* **14**, 351 (1955).
47. H.J. Vidberg and J. Serene, *J. Low Temp. Phys.* **29**, 179 (1977).
48. Г.М. Элиашберг, *ЖЭТФ* **38**, 966 (1960).
49. Г.М. Элиашберг, *ЖЭТФ* **39**, 1437 (1960).
50. *Проблема высокотемпературной сверхпроводимости*, В.Л. Гинзбург, Д.А. Киржниц (ред.), Наука, Москва (1977).
51. Э.А. Пашицкий, Ю.М. Малозовский, А.В. Семенов, *УФЖ* **36**, 6 (1991).
52. E.A. Pashitskii, V.I. Pentegov, D. Manske, and I. Eremin, *J. Supercond.* **17**, 421 (2004).
53. Y. Nambu, *Phys. Rev.* **117**, 648 (1960).
54. J.C. Ward, *Phys. Rev.* **78**, 182 (1950).
55. J.M. Luttinger and J.C. Ward, *Phys. Rev.* **118**, 1417 (1960).
56. А.Б. Мигдал, *ЖЭТФ* **34**, 1438 (1958).
57. A. Sherman, *Phys. Rev.* **B55**, 582 (1997).
58. H.J. Bornemann and D. E. Morris, *Phys. Rev.* **B44**, 5322 (1991).
59. J.P. Franck, J. Jung, M.A.K. Mohamed, S. Gyga, and G.I. Sproule, *Phys. Rev.* **B44**, 5318 (1991).
60. D.J. Pringle, G.V.M. Williams, and J.L. Tallon, *Phys. Rev.* **B62**, 12527 (2000).
61. J.L. McChesney, A. Bostwick, T. Ohta, K.V. Emtsev, T. Seyler, K. Horn, and E. Rotenberg, *arXiv:0705.3264* (2007).

On the plasmon mechanism of high- T_c superconductivity in layered crystals and two-dimensional systems

E.A. Pashitskii and V.I. Pentegov

Reported is the detailed comparative analysis of the screened Coulomb and retarded electron-plasmon interactions, calculated numerically in various approximations for quasi-two-dimensional layered crystals and two-dimensional (2D) systems with quasi-acoustic or square-root plasmon spectra. It is shown that even in the simplest case of random phase approximation the effective attraction due to the exchange of virtual plasmons may lead to the rather high critical temperature T_c . Further significant increase in T_c , with maximum values in agreement with experimental data for high-temperature superconductors, is ensured by the extended saddle points, which are typical of the 2D band spectra of the layered crystals of cuprate metal-oxides, and many-body Coulomb correlations in these systems, described by three-point Coulomb vertices. It is shown that the plasmon mechanism leads to the Cooper pairing both in d -wave and s -wave channels, though the exchange-correlation effects suppress superconductivity in the s -wave channel. The calculations also suggest that the plasmon mechanism of superconductivity may produce sufficiently high T_c in 2D systems (like graphene).

PACS: 71.45.Gm Exchange, correlation, dielectric and magnetic response functions, plasmons; **74.20.-z** Theories and models of superconducting state; **74.72.-h** Cuprate superconductors.

Keywords: plasmon mechanism, screened Coulomb interaction, plasmon spectrum, layered crystals, 2D systems, many-body Coulomb and exchange correlations.