ДОПОВІДІ
НАЦІОНАЛЬНОЇ АКАДЕМІЇ НАУК УКРАЇНИ

1 • 2012

ФІЗИКА

УДК 538.915.538.945

Академик НАН Украины **В. М. Локтев, В. М. Турковский**

К теории псевдощелевого состояния в низкоразмерных сверхпроводниках с анизотропным параметром порядка

На основе теории сверхпроводящих фазовых флуктуаций приводятся аргументы в пользу того, что температурное "закрытие" (либо "открытие") щели (а также псевдощели) в электронном спектре сверхпроводников с анизотропным параметром порядка может происходить в конечном интервале температур так, что каждая ее фурье-компонента имеет "свою" температуру исчезновения (появления).

Как известно, теория меднооксидных высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) сталкивается со значительными трудностями, связанными с необходимостью учета в ней разнообразных и разнородных особенностей купратов: сильные межэлектронные корреляции, пониженная размерность магнитных и электронных свойств, анизотропия сверхпроводящего (СП) параметра порядка, существование псевдощели, неупорядоченность и т. д. Одновременное и последовательное включение в теорию большинства из них практически препятствует ее развитию, а их выбор для конкретного исследования диктуется той или иной его целью. Ниже делается попытка показать, что, базируясь на теории фазовых флуктуаций при учете низкой размерности электронного движения и анизотропии СП параметра порядка, удается достаточно естественным образом обосновать возможность такого необычного явления, как постепенное исчезновение ("закрытие") псевдощели, происходящее в $\mathbf{k}$-пространстве по дугам поверхности Ферми от ее так называемых нодальных точек, в которых СП щель равна нулю, к M-точкам ($(\pm\pi, 0)$ либо $(0, \pm\pi)$) зоны Бриллюэна квадратной решетки, в конечном интервале температур.

Можно считать установленным [1], что последовательное описание СП в $2D$ металлах с произвольной концентрацией носителей требует не двух, как обычно, а трех самосогласованных уравнений. Два из них хорошо известны: одно — это уравнение, определяющее параметр порядка, или щель, в общем случае может быть записано в виде [2]

$$\Delta(\mathbf{k}) = \frac{V_{\text{attr}}}{N}\gamma_l(\mathbf{k})\sum_{\mathbf{q}}\gamma_l(\mathbf{q})\frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{d\varepsilon}{\exp(\varepsilon/T)+1}\,\mathrm{Im}\,\mathrm{Tr}\,\widehat{\tau}_1\widehat{G}_{\mathbf{q}}(\varepsilon), \tag{1}$$

в котором

$$\widehat{G}_{\mathbf{q}}(\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \xi(\mathbf{k})\widehat{\tau}_1 - \Delta(\mathbf{k})\widehat{\tau}_3} \tag{2}$$

— мацубаровская фермионная функция Грина в представлении Намбу; в ней

$$\xi(\mathbf{k}) = \frac{W}{2} - \frac{W}{4}(\cos k_x a + \cos k_y a) - \mu \tag{3}$$

— одночастичный спектр ферми-возбуждений в квадратной решетке с постоянной a, характеризующийся зоной шириной W и отсчитывающийся от химического потенциала μ; $\Delta(\mathbf{k}) = \Delta_l(T)\gamma_l(\mathbf{k})$ — СП параметр порядка в различных (для полноты) орбитальных, обозначаемых индексом l, каналах спаривания так, что в s-канале ($l = 0$) $\gamma_s(\mathbf{k}) = 1$, в p-канале ($l = 1$) $\gamma_p(\mathbf{k}) = \sin k_x a$, наконец, в d-канале ($l = 2$), имеющем место в ВТСП, $\gamma_d(\mathbf{k}) = \cos k_x a - \cos k_y a$; $\omega_n = (2n+1)\pi T$ — ферми-частоты; $\widehat{\tau}_j$ — матрицы Паули; V_{attr} — параметр, отвечающий притяжению между фермионами.

Другое уравнение, как сказано выше, также имеет стандартную форму —

$$n_f = 1 - \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{\exp(\varepsilon/T) + 1} \operatorname{Im}\operatorname{Tr}\widehat{\tau}_3 \widehat{G}_{\mathbf{q}}(\varepsilon) \tag{4}$$

и задает связь между числом n_f подвижных (допированных) носителей (в медноoксидных ВТСП — это, как правило, дырки) в зоне проводимости с дисперсией (3) и их химическим потенциалом, который, вообще говоря, не совпадает с энергией Ферми (см. [1]).

Уравнения (1) и (4) с учетом выражений (2) и (3) путем интегрирования по энергетической переменной ε могут быть сведены к более привычному виду:

$$\frac{1}{V_{\mathrm{attr}}} = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2}\gamma_l^2(\mathbf{k})\frac{\operatorname{th}[E(\mathbf{k})/2T]}{2E(\mathbf{k})}; \qquad n_f = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2}\left[1 - \frac{\xi(\mathbf{k})}{E(\mathbf{k})}\operatorname{th}\frac{E(\mathbf{k})}{2T}\right], \tag{5}$$

в котором $E(\mathbf{k}) = \sqrt{\xi^2(\mathbf{k}) + |\Delta(\mathbf{k})|^2}$ — энергия квазичастичного возбуждения в СП состоянии (в ВТСП она равна нулю в так называемых нодальных точках $|k_x| = |k_y| = k_{\mathrm{F}}$, где $\mathbf{k}_{\mathrm{F}}$ — импульс Ферми).

Система (4), казалось бы, полна и есть ни что иное, как среднеполевые уравнения теории БКШ. Их решение в $2D$ случае хотя и описывает величины щели (или амплитуды параметра порядка) и химического потенциала для разных значений T при данном n_f, но не может (даже приближенно) дать правильную оценку температуры СП перехода, поскольку таковая полностью (до нуля) подавляется присутствием (и учетом) длинноволновых фазовых флуктуаций параметра порядка [3]. В $2D$ системах осуществляется, однако, другой переход — Березинского–Костерлица–Таулесса (BKT), при $T = T_{BKT}$ соответствующий изменению закона пространственного ослабления корреляций от экспоненциального (при $T > T_{BKT}$) до степенного (в области $T < T_{BKT}$). Наиболее подробно такой переход изучен на примере спиновой XY-модели, гамильтониан которой в длинноволновом приближении имеет вид [4]: $H_{XY} = (J/2)\Sigma_{\mathbf{n},\boldsymbol{\rho}}(\theta_{\mathbf{n}} - \theta_{\mathbf{n}+\boldsymbol{\rho}})^2$, где J — обменная константа, а $\theta_{\mathbf{n}}$ и $\theta_{\mathbf{n}+\boldsymbol{\rho}}$ — фазы единичных векторов спинов на ближайших узлах $\mathbf{n}$ и $\mathbf{n}+\boldsymbol{\rho}$. Температура перехода БКТ определяется равенством

$$T_{BKT} = \pi\frac{J}{2}. \tag{6}$$

В СП металле параметр порядка является комплексным (двухкомпонентным) и в общем случае может быть представлен выражением (см., к примеру, [5]): $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Delta(\mathbf{r}) \times \times \exp[i\theta(\mathbf{R})]$, где $\mathbf{R}$ и $\mathbf{r}$ — векторы, соответственно, центра масс и относительного движения двух частиц, образующих пару. В том же, длинноволновом, приближении кинетическая часть термодинамического потенциала СП системы фактически однозначно сводится к гамильтониану H_{XY}, однако обменный параметр "превращается" в СП жесткость, которая представляет собой не константу, а некоторую функцию, зависящую от параметров T_c, μ и $\Delta_l(T_c)$. При этом уравнение (ср. (6))

$$T_c = \frac{\pi}{2} J(T_c, \mu, \Delta_l(T_c)) \tag{7}$$

естественным образом дополняет систему (5), которая тем самым становится действительно замкнутой, самосогласованно включая все искомые неизвестные — щель, химический потенциал и критическую температуру.

Для анизотропного параметра порядка явное выражение для функции $J(T_c, \mu, \Delta_l(T_c))$ может быть найдено в полной аналогии с s-случаем [6] (см. также [1]); оно имеет вид:

$$J(T_c, \mu, \Delta_l(T_c)) = \frac{W}{16} T_c \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \left[\operatorname{Tr} \widehat{\tau}_3 \widehat{G}_{\mathbf{k}}(\omega_n) e^{i\delta\omega_n \widehat{\tau}_3} + \frac{W}{8} \mathbf{k}^2 \operatorname{Tr} \widehat{G}^2_{\mathbf{k}}(\omega_n) \right] =$$
$$= \frac{W}{16} \left[n_f - \frac{W}{16 T_c} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{1}{\operatorname{ch}^2[E(\mathbf{k})/2T]} \right] \qquad (\delta \to 0),$$

откуда в соответствии с (7) получаем сравнительно простое уравнение, определяющее истинную температуру СП перехода в $2D$ металле с произвольной плотностью носителей:

$$T_c = \frac{\pi}{32} W \left[n_f - \frac{W}{16 T_c} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{1}{\operatorname{ch}^2[E(\mathbf{k})/2T]} \right]. \tag{8}$$

Решение самосогласованной системы трех уравнений, выписанных в (5) и (8), для s-канала с квадратичной дисперсией $\xi(\mathbf{k}) \sim \mathbf{k}^2$ квазичастиц удается найти аналитически [6]. Тогда $\Delta_s(0) \sim \sqrt{n_f}$, $T_c \sim n_f$, а химпотенциал μ всегда отрицателен, когда число фермионов достаточно мало (в пределе $n_f \to 0$). Однако для дисперсии более общего вида (например, (3)), а тем более анизотропного параметра порядка искомое решение можно получить только численно. Оно задает поведение соответствующих искомых величин T_c, μ и $\Delta_l(T_c)$ как функций n_f. С другой стороны, из уравнения (1) нетрудно найти амплитуду СП щели $\Delta_l(T)$, по которой — из условия $\Delta_l(T_c^{\mathrm{MF}}) = 0$ — и среднеполевую температуру перехода в l-канале. Последняя, как подчеркивалось, не отвечает какому-либо наблюдаемому фазовому переходу, поскольку в $2D$ системе не может быть других переходов, кроме перехода BKT[1]. В металле с притяжением между фермионами такой переход оказывается сверхпроводящим, несмотря на то, что спонтанного нарушения симметрии системы в целом при этом не происходит [6] (подробнее см. [1]).

[1]Уместно заметить, что в $2D$ XY-модели температура T_c^{MF} обычно не рассматривается, но если бы была введена, то отвечала бы некоторой, сравнительно узкой, области формирования средних узельных спинов (вернее, их модулей). Будучи при этом достаточно высокой (в квадратной решетке $T_c^{\mathrm{MF}} \sim 4J$), она показывает, когда и где (т. е. выше T_c^{MF}) спиновую систему действительно можно считать парамагнитной.

Обращает на себя внимание уже отмечавшаяся ранее [7, 8] полная симметрия поведения зависимостей $\Delta_s(0)$ и μ от n_f относительно точки $n_f = 1$ (полузаполненная зона проводимости). Возможность беспорогового образования связанных (локальных) пар фермионов в s-состоянии является причиной того, что химический потенциал для всех значений V_{attr}/W и достаточно малых n_f (либо $2 - n_f$, когда происходит смена знака эффективной массы частиц) оказывается, как упоминалось, отрицательным, что прямо указывает на существование в этом случае кроссовера от формирования конденсата по сценарию Бозе–Эйнштейна к СП типа БКШ [9, 10]. Видно также, что для всех значений n_f выполняется неравенство $T_c < T_c^{\mathrm{MF}}$, причем найденные зависимости близки к тем, что приведены выше для s-случая: $T_c^{\mathrm{MF}} \sim \sqrt{n_f}$, а $T_c \sim n_f$. При этом, если каноническое отношение теории БКШ $2\Delta_s(0)/T_c^{\mathrm{MF}}$ практически не изменяется (исключая область предельно малых концентраций) при уменьшении n_f, то, как легко убедиться, использование в нем температуры T_c дает для соответствующего отношения обратное поведение, поскольку $\Delta_s(0)/T_c \sim 1/\sqrt{n_f}$. Иными словами, в области слабого допинга и для измеряемых величин $\Delta_s(0)$ и T_c отношение $2\Delta_s(0)/T_c$ демонстрирует рост по мере уменьшения n_f.

В каналах с анизотропными p- и d-спариваниями качественная картина та же. Отличие касается лишь возможности кроссовера, поскольку для его осуществления необходимы локальные пары с конечным значением орбитального момента, а они могут формироваться лишь пороговым по величине V_{attr}/W образом [11, 12]. Вследствие этого область отрицательных μ при малых n_f возникает в анизотропных случаях только при сравнительно больших отношениях W/V_{attr} (> 1). Для небольших же и умеренных величин V_{attr}/W в системе могут образовываться исключительно куперовские p- и d-пары, чей химический потенциал положителен и практически совпадает с энергией Ферми. При этом здесь также $T_c < T_c^{\mathrm{MF}}$, причем отношения $2\Delta_p(0)/T_c^{\mathrm{MF}}$ и $2\Delta_d(0)/T_c^{\mathrm{MF}}$ превышают таковые для s-канала, что свидетельствует в пользу того, что изотропный конденсат является более стабильным относительно тепловых воздействий, нежели конденсаты анизотропные. Область между температурами T_c^{MF} и T_c, где СП флуктуации некогерентны и быстро затухают, а модуль параметра порядка, или щель в спектре, сохраняется, следует считать псевдощелевой. По достижении температуры T_c^{MF} (в ряде публикаций (например, [13, 14]) она получила название температуры T_{scf} подавления СП флуктуаций) щель в квазичастичном спектре как физически наблюдаемый параметр исчезает, хотя фазового перехода ни в точке T_c^{MF}, ни в ее окрестности не происходит.

Необходимо иметь в виду, что между температурами T_c и T_c^{MF} существует еще одно важное качественное различие, определяемое анизотропным характером электронного спектра СП фазы. Она возникает путем фазового перехода, регистрируемого либо по обращению в нуль электрического сопротивления, либо по эффекту Мейсснера–Оксенфельда, при температуре $T = T_c$, которая при этом является единой и общей для системы и всех её возбуждений. В то же время такое утверждение нельзя в полной мере отнести к температуре T_c^{MF}, ибо, как и в s-случае, ей не отвечает какой-либо фазовый переход. Тем не менее, возникает вопрос — одна ли температура отвечает формированию всех фурье-компонент параметра порядка. Другими словами, можно предположить, что величина T_c может оказаться такой, что для одних направлений $\mathbf{k}$ имеет место неравенство $T_c \leqslant |\Delta(\mathbf{k})|$, а для других — $T_c > |\Delta(\mathbf{k})|$, включая для некоторых $T_c \gg |\Delta(\mathbf{k})|$. Еще более существенным представляется вопрос, для всех ли направлений $\mathbf{k}$ начнет формироваться (либо исчезать) модуль параметра порядка. Наиболее простой (и, в известном смысле, качественный) ответ на подобный вопрос может быть найден на основе использования канонического соотношения БКШ, в чем легко убедиться, "переписав" его следующим образом:

$$\frac{2\Delta_l(0)}{T_c^{\mathrm{MF}}} = \frac{2|\Delta(\mathbf{k})|}{T_c^{\mathrm{MF}}(\mathbf{k})}. \qquad (9)$$

Если принять это соотношение, то из него прямо следует, что коль скоро параметр порядка анизотропен, то каждая его фурье-компонента может иметь "свою" температуру "закрытия", которая, следует снова подчеркнуть, никакому реальному переходу в системе не отвечает.

Соотношение (9) содержит некоторую температуру $T_c^{\mathrm{MF}}(\mathbf{k}) \equiv T_c^{\mathrm{MF}}|\gamma_l(\mathbf{k})|$, или, что по существу то же самое, температуру $T_{\mathrm{scf}}(\mathbf{k})$. Как и T_c^{MF}, она не может отвечать (и не отвечает) температуре какого-либо фазового перехода, нося лишь оценочный характер. Формула (9), тем не менее, может быть полезной, так как показывает, что анизотропия квазичастичного спектра $2D$ сверхпроводника может себя проявлять и при изменении температуры. Важно, что по мере роста температуры наблюдаемая щель исчезает постепенно от нодальной точки, где $\Delta(\mathbf{k}) = 0$ при всех T, по направлению к M-точкам, для которых и щель, и соответствующая им температура T_c^{MF} максимальны. При этом поведение, соответствующее бесщелевому (а по существу — "беспсевдощелевому", поскольку речь идет об уже нормальной фазе) спектру, будут по мере возрастания T демонстрировать все большие дуги, или части поверхности Ферми, со всеми $\mathbf{k}_{\mathrm{F}}$, для которых $T \geqslant T_c^{\mathrm{MF}}(\mathbf{k}_{\mathrm{F}})$. Подобная картина, выражающаяся в постепенном температурном исчезновении щели для разных направлений $\mathbf{k}$, начиная с нодальных точек, наблюдается в фотоэлектронных спектроскопических экспериментах с угловым разрешением (см. обзоры [15, 16] и цитированную в них литературу). В связи со сказанным возникает вопрос об экспериментальном измерении отношения типа (9), чтобы понять, в какой мере теория БКШ и ее следствия могут быть перенесены на случай низкоразмерных анизотропных сверхпроводников с псевдощелью.

Таким образом, можно утверждать, что последовательный учет СП фазовых флуктуаций параметра порядка позволяет дать качественную интерпретацию наблюдаемой в купратных системах ВТСП анизотропии псевдощели и ее исчезновению в конечном и достаточно большом интервале температур.

Работа одного из авторов (В. М. Локтева) выполнялась при частичной поддержке Целевой программы фундаментальных исследований Отделения физики и астрономии НАН Украины.

1. *Loktev V., Quick R., Sharapov S.* Phase fluctuations and pseudogap phenomena // Phys. Rep. – 2001. – **349**, No 1. – P. 1–123.
2. *Schrieffer J. R.* Theory of superconductivity. – New York: Benjamin, 1964. – 282 p.
3. *Паташинский А. З., Покровский В. Л.* Флуктуационная теория фазовых переходов. – Москва: Наука, 1975. – 255 с.
4. *Изюмов Ю. А., Ю. Н. Скрябин Ю. Н.* Статистическая механика магнитоупорядоченных систем. – Москва: Наука, 1987. – 261 с.
5. *Loktev V. M., Turkowskii V. M.* Doping dependent superconducting properties of two-dimensional metals with different types of inter-particle coupling. – 2004. – **30**, No 3. – P. 247–260.
6. *Гусынин В. П., Локтев В. М., Шарапов С. Г.* Фазовая диаграмма $2D$ металлической системы с переменным числом носителей // Письма в ЖЭТФ. – 1997. – **65**, № 2. – С. 170–175.
7. *Горбар Э. В., Гусынин В. П., Локтев В. М.* Спаривание и сверхпроводящие свойства $2D$ ферми-систем с притяжением // Физика низких температур. – 1993. – **19**, № 11. – С. 1171–1178.
8. *Гусынин В. П., Локтев В. М., Шарапов С. Г.* Функция Грина $2D$ ферми-системы, испытывающей топологический фазовый переход // Письма в ЖЭТФ. – 1999. – **69**, № 2. – 126–131.
9. *Randeria M., Duan J.-M., Shieh L.* Bound states, Cooper pairing and Bose-condensation in two dimensions // Phys. Rev. Lett. – 1989. – **62**, No 9. – 981–984.

10. *Randeria M.* BCS-Bose crossover // Bose–Einstein condensation / Eds. A. Griffin, D. W. Snoke and S. Stringari. – New York: Cambridge University Press, 1995. – P. 355–374.
11. *Гайдидей Ю. Б., Локтев В. М.* Двухэлектронные возбуждения в антиферродиэлектриках типа K_2NiF_4 // Укр. физ. журн. – 1974. – **19**, № 7. – С. 253–260.
12. *Kagan M. Yu., Rice T. M.* Superconductivity in two-dimensional tJ-model at low electron density // J. Phys. C. – 1994. – **6**, No 20. – P. 3771–3780.
13. *Tallon J. L.* Antiferromagnetic correlations and pseudogap in HTS cuprates // Advances in Superconductivity / Eds. T. Yamashita and K. Tanabe. – Tokyo: Springer, 2000. – P. 185–187.
14. *Naqib S. H., Cooper J. R., Tallon J. L., Panagopoulas C.* Temperature dependence of electrical resistivity of high-T_c cuprates – from pseudogap to overdoped regions // Physica C. – 2003. – **387**, No 3–4. – P. 365–372.
15. *Damascelli A., Hussain Z., Shen Z.-X.* Angle-resolved photoemission studies of the cuprate superconductors // Rev. Mod. Phys. – 2003. – **75**, No 2. – P. 473–541.
16. *Norman M. R.* The challenge of unconventional superconductivity // Science. – 2011. – **332**, No 6026. – P. 196–200.

Институт теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова НАН Украины, Киев

Поступило в редакцию 15.09.2011

Академік НАН України **В. М. Локтєв, В. М. Турковський**

До теорії псевдощілинного стану у низькорозмірних надпровідниках з анізотропним параметром порядку

На основі теорії надпровідних фазових флуктуацій наводяться аргументи на користь того, що температурне "закриття" (або "відкриття") щілини (а також псевдощілини) в електронному спектрі надпровідників з анізотропним параметром порядку може відбуватися у скінченному інтервалі температур так, що кожна її фур'є-компонента має "свою" температуру зникнення (появи).

Academician of the NAS of Ukraine **V. M. Loktev, V. M. Turkowsky**

On the theory of a pseudogap state in low-dimensional superconductors with anisotropic order parameter

Based on the phase fluctuation theory, the arguments are given that the temperature "closing" ("opening") of the gap (or pseudogap) in the electronic spectrum of superconductors with anisotropic order parameter can take place in a finite range of temperatures in such a manner that each its Fourier transform has "own" temperature of disappearing (appearing).