ЖЭТФ, 1997, том 111, вып. 1, стр. 298–317

О ПРИРОДЕ АНИЗОТРОПНОЙ СТРУКТУРЫ ЩЕЛИ В ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКАХ: КОНКУРЕНЦИЯ МЕЖДУ *s*- И *d*-ТИПАМИ СИММЕТРИИ

Э. А. Пашицкий, В. И. Пентегов

Институт физики Национальной академии наук Украины
252650, Киев, Украина

Поступила в редакцию 28 мая 1996 г.,
после переработки 1 августа 1996 г.

Показано, что наблюдаемая с помощью экспериментов по фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением анизотропная структура щели в высокотемпературных сверхпроводниках на основе слоистых купратных металлооксидов является следствием сильной анизотропии электронного спектра в плоскости слоев, возникающей благодаря гибридизации перекрывающихся широких и аномально узких зон. В зависимости от значений констант электрон-фононного взаимодействия и кулоновского отталкивания, которое при определенных условиях в значительной степени компенсируется притяжением за счет электрон-плазмонного взаимодействия, может реализоваться либо $d_{x^2-y^2}$-, либо s_{xy}-симметрия сверхпроводящего параметра порядка. В случае нарушенной исходной C_{v4}-симметрии зонного спектра в монокристаллах Bi(2212) со сверхрешеткой или Y(123) с одномерными цепочками могут наблюдаться аномальные температурные зависимости анизотропной щели, радикально отличающиеся от стандартной зависимости $\Delta(T)$ в теории БКШ.

1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время в экспериментах [1–6] по фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES-метод) в монокристаллах слоистых купратных металлооксидных соединений типа $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+x}$ и $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ наблюдалась сильная анизотропия электронного спектра и сверхпроводящей щели в плоскости слоев CuO_2. В частности, в купратных металло-оксидных соединениях с дырочным типом проводимости $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ (123), $YBa_2Cu_4O_{8-\delta}$ (124), $Bi_2Sr_2CuO_{6+x}$ (2201) и $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+x}$ (2212) вблизи уровня Ферми с помощью ARPES-метода [1, 6] были обнаружены так называемые «плоские» (бездисперсионные) зоны шириной менее 45 мэВ в окрестности симметричных Y- и M-точек вблизи краев зоны Бриллюэна[1)]. Более точные измерения [7, 8] с использованием поляризованных пучков синхротронного излучения с высокой разрешающей способностью по энергии (менее 3 мэВ) показали, что эти зоны представляют собой седловины с бесконечной эффективной массой в направлениях Γ–M для висмутовых и Γ–Y для иттриевых кристаллов и с квазиодномерным электронным спектром с конечной положительной эффективной массой в перпендикулярных направлениях. Согласно [9, 10], именно такие квазиодномерные участки спектра и связанные

[1)] В соединении $Nd_{2-x}Ce_xCuO_4$ с электронным типом проводимости «плоские» зоны вблизи уровня Ферми отсутствуют [1].

с ними корневые особенности Ван-Хова в электронной плотности состояний являются причиной высоких критических температур сверхпроводящего перехода $T_C \geq 100$ К благодаря обычному куперовскому спариванию за счет электрон-фононного взаимодействия. Однако ширина наблюдавшихся в [7, 8] седловых участков спектра ниже уровня Ферми, соответствующая энергии Ферми $E_{F1} \approx 20$–30 мэВ, сравнима по порядку величины с шириной сверхпроводящей щели в высокотемпературных сверхпроводниках ($\Delta_0 \geq 20$ мэВ при $T \to 0$) и гораздо меньше характерной энергии высокочастотных (ВЧ) оптических фононов, соответствующих колебаниям ионов кислорода ($\tilde{\omega}_{ph} \geq 50$ мэВ) в купратных металло-оксидных соединениях. Поэтому кулоновское отталкивание между электронами в данном случае не ослабляется, по сравнению с электрон-фононным взаимодействием, за счет большого логарифма Боголюбова–Толмачева $\ln(E_{F1}/\tilde{\omega}_{ph})$, как в обычных сверхпроводниках [11], и эффективная константа связи равна $\lambda = (\lambda_{ph} - \mu_C)$, где λ_{ph} — безразмерная константа электрон-фононного взаимодействия, а μ_C — константа кулоновского отталкивания. Учитывая слабую экранировку последнего, а также нулевой вклад процессов переброса в электрон-фононном взаимодействии из-за малой величины Ферми-импульса $k_{F1} < \pi/a$, трудно ожидать высокой T_c, которая с учетом корневой особенности плотности состояний определяется выражением $T_c \approx E_1\lambda^2$ (см. [9]), без какого-либо дополнительного механизма притяжения, в значительной степени компенсирующего большую величину μ_C. Роль такого притяжения может играть, в частности, рассматривавшееся ранее в [12–14] запаздывающее электрон-плазмонное взаимодействие с низкочастотными (НЧ) коллективными возбуждениями акустическими плазмонами электронной плотности с акустическим законом дисперсии [15].

В фотоэмиссионных экспериментах [16] с высокой разрешающей способностью по углу в монокристалле Bi(2212) была обнаружена анизотропная структура сверхпроводящей щели в плоскости слоев ($\mathbf{a} - \mathbf{b}$) с максимумами разной величины в направлениях Г–M, Г–X и Г–Y и с глубокими минимумами (провалами почти до нуля) в некоторых промежуточных направлениях. Как отмечалось в [17, 18], такая зависимость Δ от угла θ не согласуется с моделью d-волнового куперовского спаривания носителей тока за счет их взаимодействия с флуктуациями спиновой плотности [19–21], которая предсказывает существование максимумов модуля щели в направлениях Г–M и нулевые значения Δ в направлениях Г–$X(Y)$.

В работе [17] наблюдавшаяся в [16] анизотропная структура сверхпроводящей щели $\Delta(\theta)$ в монокристалле $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+x}$ анализировалась на основе феноменологической модели БКШ с потенциалом межэлектронного взаимодействия специального вида, который отражает свойства симметрии кристаллической решетки и может быть представлен как линейная комбинация расщепленных (сепарабельных) потенциалов $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \sum_i \tilde{V}_i \eta_i(\mathbf{k}) \eta_i(\mathbf{k}')$, где функции $\eta_i(\mathbf{k})$ образуют базис неприводимого представления группы симметрии C_{v4}. В [17] было показано, что наилучшее согласие с экспериментом [16] достигается в случае синглетного s_{xy}-волнового спаривания с параметром щели $\Delta(\mathbf{k}) \sim \cos k_x \cos k_y$, хотя такая аппроксимация не может описать асимметрию $\Delta(\theta)$ в разных квадрантах зоны Бриллюэна, связанную со сверхрешеткой в направлении Г–Y с волновым вектором $\mathbf{Q} \approx 0.21(\pi/a, \pi/a)$, где a — постоянная решетки в плоскости слоев[2)]. К аналогичному выводу приходят авторы работы [18] в результате детального анализа различных типов куперовского спаривания, в том числе $d_{x^2-y^2}$-волнового

[2)] Заметим, что впервые на существование сверхструктуры в Bi(2212) было указано в [22].

спаривания с анизотропной щелью $\Delta(\mathbf{k}) \sim \cos k_x - \cos k_y$ в поле периодического потенциала сверхрешетки и с учетом межслоевого анизотропного s^*-спаривания, когда $\Delta(\mathbf{k}) \sim \cos k_x + \cos k_y$.

Однако в недавних публикациях [23, 24] было сообщено о допущенной в [16–18] ошибке в постановке ARPES-эксперимента и в интерпретации экспериментальных данных. Дело в том, что измерение сверхпроводящей щели в X-квадранте зоны Бриллюэна проводилось при поляризации синхротронного излучения вдоль направления Г–X, а правила отбора для матричных элементов запрещают фотоэмиссию электронов в направлении Г–X при такой поляризации. Поэтому наблюдавшийся в [16] максимум щели в этом направлении является артефактом, который обусловлен появлением паразитных рефлексов («духов»), связанных с процессами переброса на периодических искажениях кристалла (сверхрешетке) в направлении Г–Y.

Проведенные в [24] более точные измерения щели в X- и Y-квадрантах зоны Бриллюэна с поляризацией света соответственно вдоль направлений Г–Y и Г–X показали, что сверхпроводящая щель равна нулю вдоль диагоналей зоны Бриллюэна, что указывает на $d_{x^2-y^2}$-симметрию параметра порядка. Независимым аргументом в пользу d-волнового типа куперовского спаривания в высокотемпературных сверхпроводниках являются также результаты интерференционных туннельных экспериментов по наблюдению спонтанных джозефсоновских токов в системах типа СКВИД [25–27] и генерации полуцелых квантов магнитного потока в кольцах с нечетным числом слабых связей [28, 29].

Следует, однако, подчеркнуть, что $d_{x^2-y^2}$-симметрия сверхпроводящего параметра порядка сама по себе еще не является однозначным указанием на какой-либо конкретный механизм куперовского спаривания носителей тока и, в частности, не может служить доказательством предложенного в [19–21] механизма высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) за счет обмена виртуальными квантами возбуждений спиновой плотности (парамагнонами) в почти антиферромагнитной ферми-жидкости.

В настоящей работе показано, что наблюдавшиеся в монокристаллах Bi(2212) и Y(123) протяженные седловые аномалии вблизи краев зоны Бриллюэна [7–9] могут быть следствием гибридизации перекрывающихся широких и узких $2D$-зон вблизи уровня Ферми. Это приводит к сильной анизотропии цилиндрической ферми-поверхности, которую можно условно разделить на «электронные» и «дырочные» участки с положительной и отрицательной кривизной (эффективной массой). При этом в результате конкуренции между электрон-электронным притяжением (за счет электрон-фононного и электрон-плазмонного взаимодействий) и кулоновским отталкиванием могут реализовываться случаи как $d_{x^2-y^2}$-, так и s_{xy}- (или s^*-) симметрии щели, а благодаря зависимости констант связи от концентрации носителей возможен переход от одного типа симметрии к другому по мере допирования. Показано также, что в случае нарушения C_{v4}-симметрии электронного спектра за счет возникновения сверхрешетки в Bi(2212) или упорядоченных одномерных ($1D$) цепочек в Y(123) может наблюдаться аномальная температурная зависимость щели, радикально отличающаяся от стандартной зависимости ΔT в теории БКШ [11].

2. СТРУКТУРА ЗОННОГО СПЕКТРА В МОНОКРИСТАЛЛАХ Bi(2212) И Y(123)

Прежде всего покажем, что наблюдавшиеся в фотоэмиссионных экспериментах [7–9] седловые участки вблизи M- и Y-точек зоны Бриллюэна в электронном спектре монокристаллов Bi(2212) и Y(123) в весьма узкой области энергий (менее 30 мэВ) могут быть следствием гибридизации перекрывающихся широкой и аномально узкой $2D$-зон. Действительно, предположим, что вблизи уровня Ферми, наряду с достаточно широкой зоной проводимости (шириной более 1 эВ), которая обусловлена перекрытием и гибридизацией $d_{x^2-y^2}$-орбиталей ионов меди и $p_{x,y}$-орбиталей ионов кислорода в плоскости слоев CuO_2 [30] и характеризуется следующим законом дисперсии (рис. 1):

$$E_1(k_x, k_y) = -t_1(\cos k_x a + \cos k_y b - 2) + \tilde{t}_1(\cos k_x a \cos k_y b - 1), \tag{1}$$

где a и b — постоянные решетки в плоскости слоев, существует гораздо более узкая зона (шириной менее 0.1 эВ), обусловленная, например, слабым перекрытием $d_{3z^2-r^2}$-орбиталей ионов меди Cu^{2+}, с аналогичным законом дисперсии

$$E_2(k_x, k_y) = -t_2(\cos k_x a + \cos k_y b - 2) + \tilde{t}_2(\cos k_x a \cos k_y b - 1) + E_0, \tag{2}$$

где $t_2 \ll t_1$ и $\tilde{t}_2 \ll \tilde{t}_1$, а E_0 — расстояние между минимумами перекрывающихся зон ($E_0 > 0$). Тогда возникающий в результате гибридизации зон (1) и (2) электронный спектр определяется выражением

$$E_\pm(k_x, k_y) = \frac{1}{2}\left[E_1(k_x, k_y) + E_2(k_x, k_y)\right] \pm \sqrt{\frac{1}{4}\left[E_1(k_x, k_y) - E_2(k_x, k_y)\right]^2 + |V_h|^2}, \tag{3}$$

где V_h — матричный элемент взаимодействия (расталкивания) пересекающихся ветвей.

На рис. 2*а* показана зависимость энергии от k_x и k_y для нижней ветви $E_-(k_x, k_y)$ гибридного спектра (3), а на рис. 2*б* — ее закон дисперсии вдоль трех главных направлений зоны Бриллюэна при значениях параметров, обеспечивающих наилучшее (в рамках данной модели) согласие с экспериментом [7, 8]. Верхняя гибридная ветвь $E_+(k_x, k_y)$ лежит выше уровня Ферми и поэтому не должна проявляться в фотоэлектронных спектрах (она может наблюдаться только в спектрах обратной фотоэлектронной эмиссии).

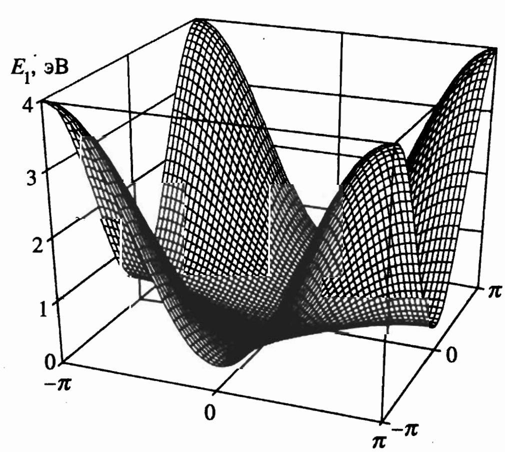

Рис. 1. Дисперсия широкой $2D$-зоны $E_1(k_x, k_y)$ в купратных слоях CuO_2 при $t_1 = 1$ эВ, $\tilde{t}_1 = 0.8$ эВ

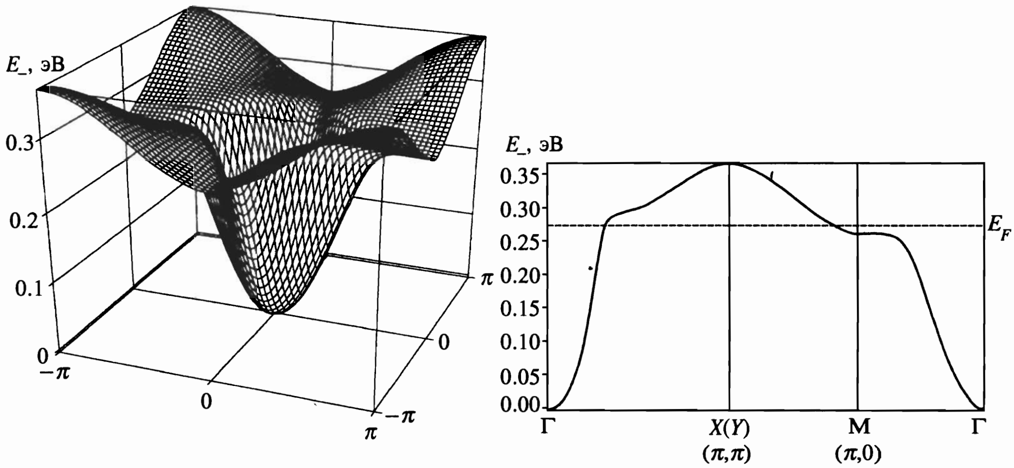

Рис. 2. *а* — Дисперсия нижней гибридной ветви $E_-(k_x, k_y)$ при $t_1 = 1$ эВ, $\tilde{t}_1 = 0.8$ эВ, $E_0 = 0.3$ эВ, $t_2 = 0.016$ эВ, $\tilde{t}_2 = 0.032$ эВ, $|V_h| = 0.025$ эВ. *б* — Дисперсия нижней ветви в трех главных направлениях зоны Бриллюэна

Как видно из рис. 2*а, б*, в электронном спектре имеются вытянутые вдоль направлений Г–M седловины с бесконечно большой эффективной массой вблизи M-точек и с конечной положительной эффективной массой в поперечных направлениях X–M–Y, если уровень Ферми расположен достаточно близко от дна седловин. В то же время, вдоль направлений Г–X и Г–Y кривизна ветви $E_-(k_x, k_y)$ и, соответственно, эффективная масса квазичастиц отрицательны. Это согласуется с вытекающим из анализа численных зонных расчетов выводом [31] о возможности изменения знака транспортной массы носителей тока на разных участках ферми-поверхности (при сохранении знака их циклотронной массы) и позволяет объяснить отрицательный знак термоэдс при положительном (дырочном) знаке константы Холла в купратных металло-оксидных соединениях [32, 33]. Таким образом, анизотропная ферми-поверхность, определяющаяся условием $E_-(k_x, k_y) = E_F$, разбивается на «электронные» и «дырочные» участки, соответствующие гибридизации разных орбиталей ионов Cu^{2+} и O^{2-} в плоскости слоев CuO_2.

Модельный спектр (3) с учетом (1) и (2) при определенном выборе параметров как качественно, так и количественно согласуется с экспериментальными данными [7–9] для Bi(2212) вблизи M-точек и для Y(123) вблизи Y-точек зоны Бриллюэна. Следует подчеркнуть, что для спектра с одной широкой $2D$-зоной (см. рис. 1) не удается получить плоские (с точностью до 10^{-3} эВ) протяженные седловые участки спектра в достаточно широких областях зоны Бриллюэна, наблюдавшиеся в [7, 8]. Такие седловые аномалии возникают только в случае пересечения и гибридизации широкой и аномально узкой $2D$-зон, относительное расположение которых зависит от многих параметров, в частности, от электростатического взаимодействия отрицательно заряженных ионных кластеров $(CuO_2)^{-2}$ с положительно заряженными ионами Ca^{2+} (или Y^{3+}) и от энергии кулоновского отталкивания электронов на одном узле, которые могут изменяться в процессе допирования (благодаря изменению степени экранирования ионов кристаллической решетки).

В монокристаллах Y(123) или Y(124) с упорядоченными вдоль оси $\mathbf{b} \parallel \mathbf{y}$ цепочками CuO вблизи X-точек зоны Бриллюэна происходит дополнительная гибридизация $2D$-зон с широкой $1D$-зоной со спектром $E_{1D}(k_y) = W_1 \cos k_y b$, так что гибридный спектр для нижней ветви (3) принимает вид

$$\tilde{E}_{\pm}(k_x, k_y) = \frac{1}{2}\left[E_{1D}(k_y) + E_{-}(k_x, k_y)\right] \pm \sqrt{\frac{1}{4}\left[E_{1D}(k_y) - E_{-}(k_x, k_y)\right]^2 + \left|\tilde{V}_h\right|^2}. \quad (4)$$

Отсюда следует, что в окрестности X-точек зоны Бриллюэна отсутствуют седловые аномалии вблизи уровня Ферми, но возрастает степень одномерности спектра в направлении Γ–Y. При этом седловины в окрестности Y-точек зоны Бриллюэна сохраняются (см. [8]). Заметим, что в [34] рассматривался эффект гибридизации $1D$-зоны E_{1D} с широкой $2D$-зоной со спектром вида (1), но существование узкой $2D$-зоны (2), которая приводит к седловым аномалиям спектра, не учитывалось.

3. СИСТЕМА УРАВНЕНИЙ ДЛЯ МНОГОКОМПОНЕНТНОГО ПАРАМЕТРА ЩЕЛИ

В условиях сильной анизотропии электронного спектра для описания сверхпроводникового состояния нельзя использовать стандартное изотропное уравнение Элиашберга [35] для щели, зависящей только от энергии ω. С другой стороны, при достаточно сильном электрон-электронном взаимодействии ($\lambda \geq 1$) неприменима модель БКШ, соответствующая приближению слабой связи ($\lambda \ll 1$). К тому же применение расщепленного потенциала $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \tilde{V}\eta(\mathbf{k})\eta(\mathbf{k}')$ или комбинации потенциалов такого вида (см. [17]) для описания анизотропной щели $\Delta(\mathbf{k})$ не имеет сколько-нибудь строгого микроскопического обоснования в теории БКШ [11].

В связи с этим представляется целесообразным воспользоваться моделью многозонного (многодолинного) сверхпроводника [36–38] с многокомпонентным параметром порядка Δ_{ij}, который определяется как совокупность щелей на разных участках анизотропной (многосвязной) цилиндрической ферми-поверхности:

$$\Delta_{ij}(\mathbf{k}, \omega) = T \sum_{\omega'} \int \frac{d^2k'}{(2\pi)^2} \sum_{l,m} W_{ij,lm}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega - \omega') F_{lm}(\mathbf{k}', \omega'), \quad (5)$$

где ω и ω' — дискретные мацубаровские частоты, $W_{ij,lm}$ — матричные элементы запаздывающего межэлектронного взаимодействия, вычисленные на волновых функциях электронов из разных зон, а F_{lm} — аномальные функции Грина. Разумеется, такой подход не может дать явную угловую зависимость анизотропной щели $\Delta(\theta)$ и учитывает только средние значения модуля щели и ее знаки на разных участках ферми-поверхности в зависимости от констант взаимодействия (см. ниже).

Если пренебречь «перекрестным» куперовским спариванием электронов с разных участков анизотропной ферми-поверхности и положить $\Delta_{ij} = 0$ при $i \neq j$, то система уравнений (5) для щелей $\Delta_i = \Delta_{ii}$ после усреднения по импульсам (в пределах каждого участка ферми-поверхности) принимает вид

$$\Delta_i(\omega) = -T \sum_{\omega'} \int d\xi \sum_j \nu_j(\xi) \tilde{W}_{ij}(\omega - \omega') F_{jj}(\xi, \omega'), \quad (6)$$

где ξ — энергия электронов, отсчитываемая от общего уровня Ферми, а ν_j и $\tilde{W}_{ij}$ — усредненные по площади j-го участка ферми-поверхности значения плотности состояний и матричных элементов $W_{ii,jj}$, которые описывают как запаздывающее межэлектронное притяжение вблизи ферми-поверхности за счет электрон-фононного взаимодействия, так и экранированное кулоновское отталкивание, причем $\tilde{W}_{ij}$ при $i \neq j$ определяет вероятность виртуальных двухчастичных переходов между разными участками ферми-поверхности.

Заметим, что «перекрестное» куперовское спаривание с $\Delta_{ij} \neq 0$ ($i \neq j$) можно не учитывать, поскольку для участков ферми-поверхности с разной кривизной оно приводит к образованию пар с конечным импульсом $q \sim \pi/a$, энергия связи которых мала или равна нулю (см. [11]). Однако система уравнений (6) справедлива только для достаточно чистых сверхпроводников, когда рассеяние носителей тока на дефектах кристаллической решетки и примесях с характерным временем τ не перемешивает электронные состояния разных участков ферми-поверхности за время куперовского спаривания, т. е. $\tau > \Delta_i^{-1}$. В случае «грязных» сверхпроводников, когда выполняется условие $\tau\Delta_i \leq 1$, необходимо учитывать процесс изотропизации щели в плоскости слоев **a**–**b** за счет упругой релаксации электронов, т. е. существование конечных недиагональных компонент параметра порядка. В дальнейшем будет рассматриваться случай чистого сверхпроводника ($\tau\Delta_{ii} \gg 1$).

Запаздывающее межэлектронное взаимодействие в уравнениях (6) на разных участках ферми-поверхности с учетом электрон-фононного взаимодействия и кулоновского отталкивания может быть представлено в виде

$$\tilde{W}_{ij}(\omega) = \left\langle |\tilde{g}_{ph}(\mathbf{k},\mathbf{k}')|^2 D_{ph}(\mathbf{k}-\mathbf{k}',\omega) + \tilde{\Gamma}_{ee}(\mathbf{k}-\mathbf{k}',\omega) \right\rangle_{ij}, \tag{7}$$

где $\tilde{g}_{ph}$ и D_{ph} — матричный элемент электрон-фононного взаимодействия и фононная функция Грина (для неполярных фононов), $\tilde{\Gamma}_{ee}$ — вершинная часть (четырехполюсник) экранированного межэлектронного кулоновского взаимодействия в многокомпонентной ферми-жидкости многозонных металлов [36], а угловые скобки $\langle \ldots \rangle_{ij}$ означают усреднение по $\mathbf{k}$ в пределах i-го и по $\mathbf{k}'$ в пределах j-го участка поверхности Ферми.

Благодаря низкой концентрации вырожденных носителей тока в $2D$-слоях CuO_2 купратных металло-оксидных соединений и, следовательно, относительно малым значениям ферми-импульса $k_F < \pi/a$, для виртуальных фононов, принимающих участие в куперовском спаривании носителей тока, не существенны процессы переброса, поскольку передаваемые импульсы $q \leq 2k_F$ лежат в пределах первой зоны Бриллюэна, в отличие от обычных поливалентных металлов с $k_F \gg \pi/a$ (в схеме расширенных зон). Поэтому в ионных кристаллах металло-оксидных соединений все фононные ветви могут быть разделены на полярные (дипольно-активные) и неполярные (как акустические, так и оптические), причем полярные оптические фононы (в частности, ВЧ кислородные колебательные моды), как и в многодолинных полупроводниках [39–41], могут быть включены в дисперсию эффективной диэлектрической проницаемости ионного кристалла.

Кроме того, как было показано в [42, 43], при наличии в слоистом кристалле аномально узкой $2D$-зоны вблизи уровня Ферми, частично заполненной почти локализованными на узлах решетки h-носителями заряда, во всем объеме зоны Бриллюэна существует слабо затухающая ветвь акустических плазмонов, которая гибридизуется с продольными оптическими фононами. Межэлектронное притяжение, обусловленное обменом виртуальными квантами гибридных фонон-плазменных колебаний, в значительной степени компенсирует кулоновское отталкивание вблизи ферми-поверхности в ионных кристаллах с большой статической диэлектрической проницаемостью. Действительно, в силу соотношения Крамерса–Кронига для обратной диэлектрической проницаемости кристалла $\tilde{\varepsilon}^{-1}(q,\omega)$ константа электрон-плазмонного взаимодействия равна [43]

$$\lambda_{pl} = -\frac{2}{\pi}\nu(0)\int\limits_0^\infty \frac{d\omega}{\omega}\left\langle V_C(q)\,\mathrm{Im}\,\tilde{\varepsilon}^{-1}(q,\omega)\right\rangle = \mu_C^\infty - \mu_C^0, \tag{8}$$

где угловые скобки $\langle\ldots\rangle$ означают усреднение по передаваемому импульсу q, $V_C(q)$ — матричный элемент неэкранированного кулоновского взаимодействия, $\mu_C^\infty = \nu(0)\langle V_C(q)/\varepsilon_\infty(q)\rangle$ и $\mu_C^0 = \nu(0)\langle V_C(q)/\varepsilon_0(q)\rangle$ — безразмерные константы кулоновского отталкивания в области высоких ($\omega \to \infty$) и низких ($\omega \to 0$) частот, а $\varepsilon_\infty(q)$ и $\varepsilon_0(q)$ — ВЧ и НЧ решеточные диэлектрические проницаемости. Как следует из (8), при условии $\varepsilon_0 \gg \varepsilon_\infty$, когда $\mu_C^0 \ll \mu_C^\infty$, константа связи $\lambda_{pl} \approx \mu_C^\infty$, т.е. электрон-плазмонное взаимодействие и полярное электрон-фононное взаимодействие почти полностью компенсируют кулоновское отталкивание.

С другой стороны, следует иметь в виду, что на «электронных» и «дырочных» участках анизотропной поверхности Ферми с разными знаками эффективной массы блоховские волновые функции зонных состояний $\Psi_{kj}(\mathbf{r}) = u_{kj}(\mathbf{r})e^{ikr}$ определяются перекрытием и гибридизацией разных орбиталей ионов Cu^{2+} и O^{2-} в слоях CuO_2, так что недиагональные матричные элементы $\tilde{W}_{i,j}$ $(i \neq j)$ должны содержать матричные элементы электрон-фононного и электрон-плазмонного взаимодействий и неэкранированного кулоновского отталкивания, вычисленные на разных (почти ортогональных) волновых функциях:

$$\tilde{g}_{ij}^{ph}(\mathbf{k},\mathbf{k}') = \sum_\nu \int d\mathbf{r}\Psi_{ki}^*(\mathbf{r})\left(\mathbf{e}_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^\nu \nabla \tilde{V}_{ei}(\mathbf{r})\right)\Psi_{k'j}(\mathbf{r}), \tag{9}$$

$$\tilde{g}_{ij}^{pl}(\mathbf{k},\mathbf{k}') = \int d\mathbf{r}\Psi_{ki}^*(\mathbf{r})\left(\frac{\tilde{V}_{ei}^C(\mathbf{r})}{Z_i\sqrt{\tilde{V}_C(q)}}\right)\Psi_{k'j}(\mathbf{r}), \tag{10}$$

$$V_{ij}^C(\mathbf{k}-\mathbf{k}') = \int d\mathbf{r}\int d\mathbf{r}'\Psi_{ki}^*(\mathbf{r})\Psi_{k'j}^*(\mathbf{r}')\frac{e^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\Psi_{k'j}(\mathbf{r}')\Psi_{ki}(\mathbf{r}), \tag{11}$$

где $\mathbf{e}_\mathbf{q}^\nu$ — вектор поляризации ν-й фононной ветви, $\tilde{V}_{ei}(\mathbf{r})$ и $\tilde{V}_{ei}^C(\mathbf{r})$ — экранированный псевдопотенциал электрон-ионного взаимодействия и его кулоновская часть, Z_i — средний заряд (валентность) иона, а $\tilde{V}_C(q)$ — матричный элемент экранированного кулоновского отталкивания (см. Приложение).

Благодаря локальности неполярного электрон-фононного взаимодействия и фактической ортогональности волновых функций на электронных и дырочных участках ферми-поверхности недиагональные матричные элементы (19) можно считать исчезающе малыми, тогда как матричные элементы нелокального (дальнодействующего) кулоновского взаимодействия (11) и электрон-плазмонного взаимодействия (10) остаются конечными.

Таким образом, безразмерные константы связи на ферми-поверхности могут быть представлены в виде

$$\tilde{\lambda}_{ii} \equiv -\nu_i \tilde{W}_{ii}(0) = \lambda_{ii}^{ph} + \lambda_{ii}^{pl} - \mu_{ii}, \quad \tilde{\lambda}_{ij} \equiv -\nu_j \tilde{W}_{ij}(0) = \lambda_{ij}^{pl} - \mu_{ij}, \tag{12}$$

где $\lambda_{ii}^{ph} = \nu_i \langle |g_{ii}^{ph}|^2 \rangle$ — константы неполярного электрон-фононного взаимодействия, $\lambda_{ij}^{pl} = \nu_j \langle |g_{ij}^{pl}|^2 \rangle$ — константы электрон-плазмонного и полярного электрон-фононного взаимодействий (с учетом гибридизации акустических плазмонов с дипольно-активными оптическими фононами), а $\mu_{ij} = \nu_j \langle V_{ij}^C \rangle$ — соответствующие константы кулоновского отталкивания при высоких энергиях $\omega \geq E_{Fi}$, причем $\lambda_{ij}^{pl} < \mu_{ij}$ (см. (8)). Отсюда следует, что $\tilde{\lambda}_{ij} < 0$, тогда как константы $\tilde{\lambda}_{ii}$ могут быть как положительными, так и отрицательными в зависимости от величины констант неполярного электрон-фононного взаимодействия λ_{ii}^{pb} и статического экранированного кулоновского отталкивания $\mu_{ii}^0 \equiv \mu_{ii} - \lambda_{ii}^{pl} > 0$.

4. СИММЕТРИЯ МНОГОКОМПОНЕНТНОГО ПАРАМЕТРА ПОРЯДКА В МОНОКРИСТАЛЛЕ Bi(2212)

Как отмечалось выше (см. также [44]), благодаря сильной гибридизации перекрывающихся широкой и аномально узкой $2D$-зон, в электронном спектре слоистого кристалла типа Bi(2212) возникают протяженные седловины в направлениях Γ–M, которые наблюдались в ARPES-экспериментах [7–9] с высокой разрешающей способностью по энергии. В результате этого при определенном уровне допирования, когда уровень Ферми расположен выше дна седловин (рис. 2), анизотропная цилиндрическая ферми-поверхность может быть разбита на четыре пары квазиодномерных «электронных» участков и четыре «дырочных» участка соответственно с положительной и отрицательной кривизной (эффективной массой). При этом плотность состояний на квазиодномерных «электронных» участках в окрестности M-точки зоны Бриллюэна имеет корневую особенность Ван-Хова, что может способствовать усилению межэлектронного взаимодействия и повышению критической температуры сверхпроводящего перехода T_c [9–10].

Если не учитывать нарушения C_{v4}-симметрии исходного спектра и ферми-поверхности за счет появления сверхрешетки в направлении Γ–Y [1], то система уравнений (6) допускает четыре типа решений:

1) щели на взаимно перпендикулярных «электронных» участках ферми-поверхности равны по абсолютной величине, но противоположны по знаку, а щели на «дырочных» участках (вдоль диагоналей зоны Бриллюэна) равны нулю; такое решение соответствует $d_{x^2-y^2}$-волновому типу куперовского спаривания;

2) щели Δ_1 на всех «электронных» участках ферми-поверхности одинаковы как по величине, так и по знаку, а щели Δ_2 на «дырочных» участках отличны от нуля, но имеют противоположный знак (сдвиг по фазе на π) по сравнению с Δ_1; такое решение соответствует s_{xy}- (либо s^*-) типу симметрии сверхпроводящего параметра порядка;

3) щели на всех участках ферми-поверхности одного знака (например $\Delta_1 > 0$ и $\Delta_2 > 0$), но различны по величине ($\Delta_1 \neq \Delta_2$) из-за разной плотности состояний, что соответствует квазиизотропному решению s-типа;

4) решение с d_{xy}-типом симметрии щели $\Delta(k) \sim \sin k_x \sin k_y$.

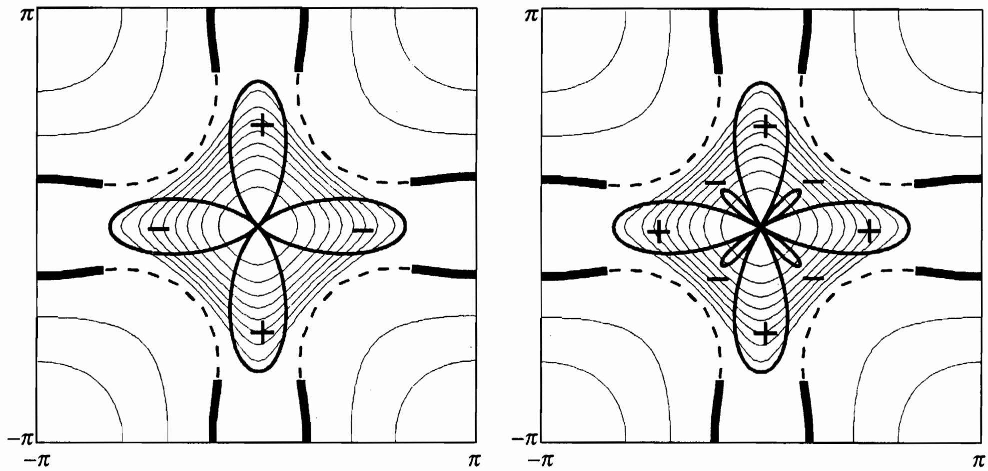

Рис. 3. *а* — Структура анизотропной сверхпроводящей щели при $d_{x^2-y^2}$-симметрии параметра порядка и линии постоянной энергии нижней гибридной ветви спектра $E_-(k_x, k_y)$. На сечении цилиндрической ферми-поверхности жирными линиями показаны «электронные» участки, а штрихами — «дырочные» участки. *б* — Структура анизотропной сверхпроводящей щели при s_{xy}-симметрии параметра порядка

Последнее решение возможно, по-видимому, лишь при расположении уровня Ферми вблизи дна седловин, когда эти участки зонного спектра, несмотря на высокую плотность состояний, вносят малый вклад в эффективную константу связи.

В случае $d_{x^2-y^2}$-типа симметрии (рис. 3*а*) система уравнений (6) в приближении слабой связи приводится к одному уравнению для модуля щели Δ_1:

$$1 = \left(\lambda_{11} - 2\lambda'_{11} + \lambda''_{11}\right) L_1 \tag{13}$$

где

$$L_1\left(|\Delta_1|\right) = \frac{1}{2} \int\limits_{-E_{F1}}^{E_{F1}} \frac{d\xi}{\sqrt{\xi^2 + |\Delta_1|^2}} \sqrt{\frac{E_{F1}}{\xi + E_{F1}}} \,\mathrm{th}\, \frac{\sqrt{\xi^2 + |\Delta_1|^2}}{2T}, \tag{14}$$

E_{F1} и λ_{11} — энергия Ферми и безразмерная константа связи на квазиодномерном «электронном» участке ферми-поверхности с корневой особенностью плотности состояний [9, 10], а λ'_{11} и λ''_{11} — константы взаимодействия между электронами на разных седловых участках ферми-поверхности вблизи M-точек зоны Бриллюэна, разделенных волновыми векторами $(\pi/a, \pi/a)$ и $(0, 2\pi/a)$ соответственно.

Заметим, что магнонному механизму куперовского спаривания в почти антиферромагнитной ферми-жидкости [11–13] соответствуют отрицательные знаки всех констант ($\lambda_{11} < 0$, $\lambda'_{11} < 0$, $\lambda''_{11} < 0$), так что сверхпроводящий переход, как следует из (13), возможен только при достаточно сильной анизотропии взаимодействия, когда модуль константы связи λ'_{11} вдоль диагонали зоны Бриллюэна удовлетворяет условию $|\lambda'_{11}| > (1/2)(|\lambda_{11}| + |\lambda''_{11}|)$.

С другой стороны, в случае преобладающего межэлектронного притяжения вблизи уровня Ферми за счет электрон-фононного и электрон-плазмонного взаимодействий на каждом из «электронных» участков ферми-поверхности, когда $\lambda_{11} = \lambda_{11}^{ph} - \mu_{11}^0 > 0$, но при кулоновском отталкивании между электронами на соседних участках ($\lambda'_{11} < 0$ и $\lambda''_{11} < 0$), куперовское d-спаривание, согласно (13), возможно при условии

$$\Lambda_d = \lambda_{11} + 2|\lambda'_{11}| - |\lambda''_{11}| > 0.$$

При этом в (14) учтено, что энергия Ферми E_{F1} при положении уровня Ферми вблизи дна седловин гораздо меньше средней энергии фононов $\tilde{\omega}_{ph} \geq 50$ мэВ, а тем более, энергии связанных (гибридных) фонон-плазменных колебаний $\tilde{\Omega} \geq 0.1$ эВ (см. [43]), так что с учетом корневой особенности плотности состояний критическая температура при d-спаривании равна по порядку величины $T_c^d \approx E_{F1}\Lambda_d^2$ (см. [9]).

В случае s-типа симметрии параметра порядка система уравнений (6) для щелей Δ_1 и Δ_2 приводится к виду

$$\Delta_1 = \Delta_1(\lambda_{11} + 2\lambda'_{11} + \lambda''_{11})L_1 + 2\Delta_2(\lambda_{12} + \lambda'_{12})L_2, \tag{15}$$

$$\Delta_2 = \Delta_2(\lambda_{22} + 2\lambda'_{22} + \lambda''_{22})L_2 + 2\Delta_1(\lambda_{21} + \lambda'_{21})L_1, \tag{16}$$

где

$$L_2\left(|\Delta_2|\right) = \int_0^{\tilde{\Omega}} \frac{d\xi}{\sqrt{\xi^2 + |\Delta_2|^2}} \operatorname{th} \frac{\sqrt{\xi^2 + |\Delta_2|^2}}{2T}, \tag{17}$$

$\tilde{\Omega}$ — энергия обрезания взаимодействия на «дырочных» участках ферми-поверхности. Предполагается, что энергия Ферми на «дырочных» участках $E_{F2} > \tilde{\Omega}$, так что константы λ_{22}, λ'_{22} и Λ''_{22}, наряду с электрон-фононным и электрон-плазмонным взаимодействием, содержат кулоновский псевдопотенциал (см. [11])

$$\mu_{22}^* = \mu_{22}\left[1 + \mu_{22}\ln(E_{F2}/\tilde{\Omega})\right]^{-1}, \tag{18}$$

тогда как в постоянные λ_{11}, λ'_{11} и λ''_{11} входит неперенормированная константа кулоновского отталкивания μ_{11}, поскольку $E_{F1} < \tilde{\Omega}$.

Анализ системы уравнений (15), (16) показывает, что для отрицательных значений перекрестных констант $\lambda_{ij} < 0$ и $\lambda'_{ij} < 0$ при $i \neq j$ $(i,j = 1,2)$, что соответствует преобладающему кулоновскому отталкиванию между «электронными» и «дырочными» участками ферми-поверхности, энергетически выгодным и обладающим более высокой критической температурой T_c^s является решение с противоположными знаками щелей Δ_1 и Δ_2 (например, $\Delta_1 > 0$ и $\Delta_2 < 0$), которое эквивалентно восьмилепестковому s_{xy}-типу симметрии сверхпроводящего параметра порядка (рис. 3б). При положительных значениях $\lambda_{ij} > 0$ и $\lambda'_{ij} > 0$ (притяжение) более выгодно решение с одинаковыми знаками Δ_1 и Δ_2, что соответствует квазиизотропному s-спариванию.

Если пренебречь для простоты корневой особенностью плотности состояний в (14) и положить $L_1 = L_2 = \ln(1.134\tilde{\Omega}/T_c^s)$ при $T \to T_c^s$, то из условия разрешимости линеаризованной при $\Delta_{1,2} \to 0$ системы уравнений (15) и (16) получим экспоненциальную формулу для T_c^s типа БКШ

$$T_c^s = 1.134\tilde{\Omega}\exp\left[-1/\Lambda_s\right], \tag{19}$$

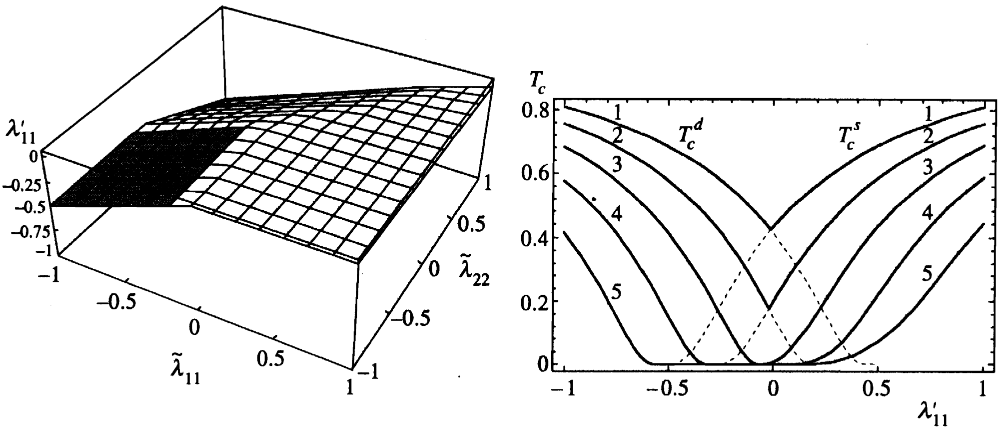

Рис. 4. *а* — Поверхность, разделяющая области d- и s-спаривания в пространстве параметров $\tilde\lambda_{11} \equiv (\lambda_{11}+\lambda''_{11})$, $\tilde\lambda_{22} \equiv (\lambda_{22}+2\lambda'_{22}+\lambda''_{22})$ и λ'_{11} при $\tilde\lambda_{12} = 0.1$. Под поверхностью $T_c^d > T_c^s$, а над поверхностью $T_c^s > T_c^d$ кроме затемненной области, выше которой в данной модели s-спаривание невозможно. *б* — Зависимости T_c^s и T_c^d от λ'_{11} при $\tilde\lambda_{22} = 0.5\tilde\lambda_{11}$ и $\tilde\lambda_{12} = 0.1$ для значений $\tilde\lambda_{11} = 1$ (кривые *1*), $\tilde\lambda_{11} = 0.5$ (кривые *2*), $\tilde\lambda_{11} = 0$ (кривые *3*), $\tilde\lambda_{11} = -0.5$ (кривые *4*), $\tilde\lambda_{11} = -1$ (кривые *5*). Штрихами показано продолжение кривых *1* и *2* в области, где соответствующие значения T_c^s и T_c^d меньше максимального значения T_c

где

$$\Lambda_s = \frac{2\left(\Lambda_{11}\Lambda_{22} - \tilde\lambda_{12}^2\right)}{(\Lambda_{11} + \Lambda_{22}) \pm \sqrt{(\Lambda_{11} - \Lambda_{22})^2 + 4\tilde\lambda_{12}^2}}, \tag{20}$$

$$\Lambda_{ii} = \lambda_{ii} + 2\lambda'_{ii} + \lambda''_{ii} \quad (i = 1, 2), \quad \tilde\lambda_{12}^2 = (\lambda_{12} + \lambda'_{12})(\lambda_{21} + \lambda'_{21}). \tag{21}$$

В (20) следует выбирать большее из двух решений, соответствующее максимальному значению T_c^s.

Сопоставление критических температур сверхпроводящего перехода T_c^d и T_c^s, вычисленных на основе соотношений (13) и (14), с одной стороны, и (15)–(17) — с другой, позволяет найти области значений параметров, при которых реализуются либо d-, либо s-симметрия щели.

На рис. 4*а* показана поверхность, которая разделяет области d- и s-спаривания в пространстве параметров $\tilde\lambda_{11} \equiv \lambda_{11} + \lambda''_{11}$, $\tilde\lambda_{22} \equiv \Lambda_{22}$ и λ'_{11} для значения константы перекрестного взаимодействия между «электронными» и «дырочными» участками ферми-поверхности $\tilde\lambda_{12} = 0.1$. Ниже этой поверхности раздела расположена область d-спаривания, в которой $T_c^s < T_c^d$, а выше — область s-спаривания, где $T_c^s > T_c^d$. (Заметим, что над затемненным участком поверхности раздела в некотором интервале значений λ'_{11} существует область, в которой нет ни s-, ни d-спаривания).

Как видим, d-спаривание возможно только при отрицательных значениях константы λ'_{11}, которая описывает взаимодействие между ближайшими соседними «электронными» участками ферми-поверхности с передаваемым импульсом $q \approx \pi\sqrt{2}/a$. Малое значение константы $\tilde\lambda_{12}$ обусловлено малостью матричного элемента $|g_{12}^{ph}|$ за счет локальности электрон-фононного взаимодействия и ортогональности волновых функций электронов на разных участках ферми-поверхности, с одной стороны, и почти полной компенсацией слабо экранированного кулоновского отталкивания запаздывающим электрон-плазмонным взаимодействием, с другой (см. (8))[3]. С ростом $\tilde{\lambda}_{12}$ граница областей s- и d-спаривания смещается в сторону больших по абсолютной величине отрицательных значений константы λ'_{11}.

В случае притяжения между электронами на одном и том же квазиодномерном (седловом) участке ферми-поверхности за счет электрон-фононного и электрон-плазмонного взаимодействий, когда $\tilde{\lambda}_{11} > 0$, для возникновения d-спаривания достаточно слабого кулоновского отталкивания между электронами на разных участках ферми-поверхности, когда $\lambda'_{11} < 0$ и $\lambda''_{11} < 0$ (но $|\lambda''_{11}| < \lambda_{11}$ и $\tilde{\lambda}_{11} > 0$). Такое отталкивание может быть следствием как электрон-магнонного взаимодействия, так и неполной компенсации экранированного кулоновского взаимодействия притяжением за счет электрон-фононного и электрон-плазмонного взаимодействий.

С другой стороны, как следует из рис. 4*а*, в случае преобладающего отталкивания в области седловин ($\tilde{\lambda}_{11} < 0$) d-спаривание возможно только при достаточно больших по абсолютной величине отрицательных значениях константы связи λ'_{11}, что соответствует анизотропному взаимодействию носителей тока с парамагнонами [19–21].

На рис. 4*б* представлены зависимости T_c^s и T_c^d от λ'_{11}, вычисленные на основании линеаризованных уравнений (13), (15) и (16) для разных значений $\tilde{\lambda}_{11}$ при $\tilde{\lambda}_{22} = 0.5\tilde{\lambda}_{11}$ и $\tilde{\lambda}_{12} = 0.1$. Видно, что при $\tilde{\lambda}_{11} < 0$ существует интервал значений константы λ'_{11}, в котором T_c^s и T_c^d равны нулю (кривые *4* и *5*). В то же время притяжение на «электронных» участках ферми-поверхности ($\tilde{\lambda}_{11} > 0$) даже на фоне отталкивания, формирующего d-симметрию щели ($\lambda'_{11} < 0$), приводит к повышению T_c по сравнению с электрон-магнонным взаимодействием, когда $\tilde{\lambda}_{11} < 0$.

Таким образом, конкуренция между притяжением (за счет электрон-фононного и электрон-плазмонного взаимодействий) и кулоновским отталкиванием в сочетании с сильной анизотропией электронного спектра в зависимости от значений параметров может приводить либо к d-, либо к s-симметрии сверхпроводящей щели. Следует заметить, что значения констант связи могут существенно меняться с изменением концентрации допированных носителей (дырок или электронов), на что указывает сильная концентрационная зависимость T_c в купратных металло-оксидных соединениях (см., например, [47]). Это означает, что по мере допирования в высокотемпературных сверхпроводниках (в частности, монокристаллах Bi(2212)) может происходить переход от одного типа симметрии параметра порядка к другому.

5. НАРУШЕНИЕ СИММЕТРИИ СПЕКТРА И ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ЩЕЛИ В МОНОКРИСТАЛЛАХ Bi(2212) И Y(123)

Как было показано в [16, 22], в монокристаллах Bi(2212) вдоль одной из диагоналей зоны Бриллюэна (в направлении Г–Y) существует длинноволновая сверхрешетка, которая нарушает C_{v4}-симметрию электронного спектра в плоскости слоев. В случае d-спаривания это не должно заметно сказываться на симметрии сверхпроводящего параметра порядка $\Delta_d(k) \sim \cos k_x a - \cos k_y a$, который равен нулю в направлениях Г–X и Г–Y.

---

[3] Ранее в модели двухзонного сверхпроводника [45, 46] предполагалось, что недиагональная межзонная константа связи максимальна.

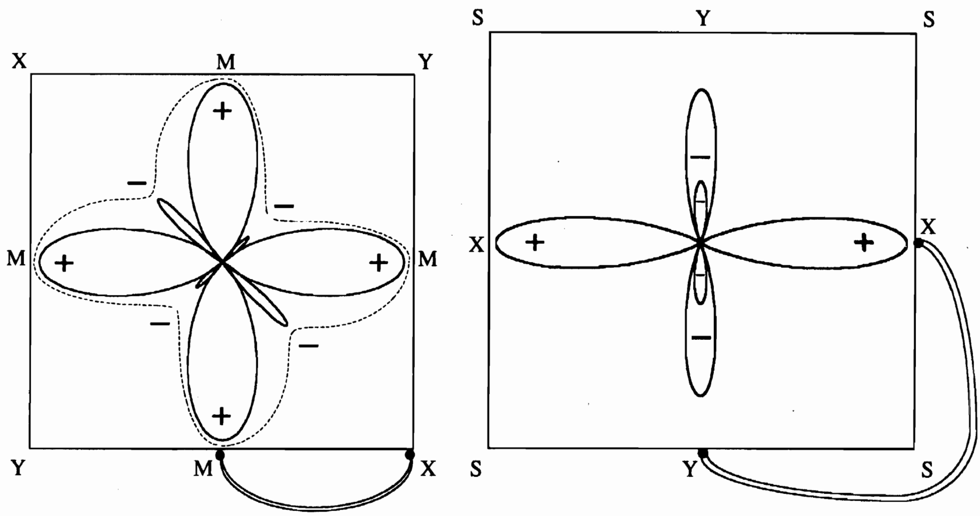

Рис. 5. *а* — Структура щели в Bi(2212) с нарушением s_{xy}-симметрии типа «бабочка» [48]. *б* — Структура анизотропной щели в Y(123), имитирующая d-спаривание

Однако в случае s_{xy}-спаривания наличие сверхрешетки должно приводить к нарушению симметрии спектра и сверхпроводящей щели, в частности, к разным значениям щели в направлениях Γ–X и Γ–Y. Именно такая симметрия спектра и щели наблюдалась в ARPES-экспериментах [3–5]. В этом случае в рамках модели анизотропного сверхпроводника с многокомпонентным параметром порядка [36–38] система уравнений (6) может быть представлена в виде ($i, j = 1, 2, 3$)

$$\Delta_1\left(1-\tilde{\lambda}_{11}L_1\right) = \Delta_2\tilde{\lambda}^*_{12}L_2 + \Delta_3\tilde{\lambda}^*_{13}L_3, \tag{22}$$

$$\Delta_2\left(1-\tilde{\lambda}^*_{22}L_2\right) = \Delta_1\tilde{\lambda}_{21}L_1 + \Delta_3\tilde{\lambda}^*_{23}L_3, \tag{23}$$

$$\Delta_3\left(1-\tilde{\lambda}^*_{33}L_3\right) = \Delta_1\tilde{\lambda}_{31}L_1 + \Delta_2\tilde{\lambda}^*_{32}L_2, \tag{24}$$

где Δ_2 и Δ_3 — щели на неэквивалентных «дырочных» участках ферми-поверхности (в направлениях Γ–X и Γ–Y), L_3 определяется выражением (17) с заменой $|\Delta_2|$ на $|\Delta_3|$, а параметры $\tilde{\lambda}^*_{ij}$ отличаются от констант $\tilde{\lambda}_{ij}$ заменой кулоновских констант μ_{ij} на псевдопотенциал $\mu^*_{ij} = \mu_{ij}[1 + \mu_{jj}\ln(E_{Fj}/\tilde{\Omega})]^{-1}$. При этом диагональные константы связи $\tilde{\lambda}_{11}$, $\tilde{\lambda}^*_{22}$ и $\tilde{\lambda}^*_{33}$ благодаря сильным электрон-фононному и электрон-плазмонному взаимодействиям являются положительными, а недиагональные $\tilde{\lambda}_{21}$ и $\tilde{\lambda}_{31}$ из-за подавления электрон-фононного взаимодействия отрицательными в силу преобладающего кулоновского отталкивания (см. (12)). Константы $\tilde{\lambda}^*_{ij}$ при $i \neq j$ ($j = 2, 3$) могут быть как отрицательными, так и положительными благодаря ослаблению отталкивания на фактор $[1 + \mu_{jj}\ln(E_{Fj}/\tilde{\Omega})]$, хотя в данном случае логарифм Боголюбова–Толмачева гораздо меньше, чем в обычных сверхпроводниках [11].

Из уравнений (22)–(24) следует, что при $\tilde{\lambda}_{11} > 0$ и $\tilde{\lambda}^*_{ii} > 0$ ($i = 2, 3$), но $\tilde{\lambda}_{21} < 0$ и $\tilde{\lambda}_{31} < 0$ (при произвольном знаке $\tilde{\lambda}^*_{ij}$), максимальные значения модулей Δ_1, Δ_2 и Δ_3

реализуются в том случае, когда знаки Δ_2 и Δ_3 противоположны знаку щели Δ_1 (например, $\Delta_2 < 0$ и $\Delta_3 < 0$ при $\Delta_1 > 0$), что соответствует нарушенной ($\Delta_2 \neq \Delta_3$) симметрии s_{xy}-типа для сверхпроводящего параметра порядка (рис. 5*а*).

Следует заметить, что такая многолепестковая структура щели с разными знаками (противоположными фазами) «лепестков» в направлениях Г–M и Г–$X(Y)$, в принципе, может приводить к эффекту генерации спонтанного магнитного потока в сверхпроводящих кольцах Bi(2212) при определенном расположении слабых (джозефсоновских) связей [29]. С другой стороны, из-за одинаковых знаков «лепестков» щели в направлениях Г–M в случае s_{xy}-симметрии в интерференционных экспериментах с туннельными контактами на взаимно перпендикулярных боковых гранях слоистого монокристалла Bi(2212) не должен наблюдаться спонтанный джозефсоновский ток, в отличие от монокристаллов Y(123) [25–27] (см. ниже). В то же время, если один из туннельных контактов расположен в направлении диагонали зоны Бриллюэна (например вдоль Г–X), то в такой цепи, в принципе, должен наблюдаться сдвиг фазы на π из-за противоположных знаков (фаз) «лепестков» параметра порядка в направлениях Г–M и Г–X (см. рис. 5*а*). Именно такие туннельные эксперименты должны дать однозначный ответ на вопрос о том или ином типе симметрии сверхпроводящего параметра порядка в Bi(2212) при разных уровнях допирования.

В монокристаллах Y(123) и Y(124) симметрия четвертого порядка C_{v4} нарушается благодаря возникновению упорядоченных $1D$-цепочек CuO вдоль оси $\mathbf{b} \parallel \mathbf{y}$ при максимальном содержании кислорода. При этом для приближенного описания структуры анизотропной сверхпроводящей щели можно использовать систему уравнений (22)–(24), если под Δ_1 и Δ_2 иметь в виду значения ширины щели на цилиндрических участках ферми-поверхности, связанных с $2D$-слоями CuO_2, за счет куперовского спаривания электронов соответственно на «берегах» квазиодномерных протяженных седловин в окрестности Y-точек зоны Бриллюэна и в области сильной гибридизации $1D$- и $2D$-зон в окрестности X-точек зоны Бриллюэна, а под Δ_3 — значение ширины щели на плоских листах ферми-поверхности, связанных с $1D$-цепочками CuO. Интеграл L_3 с учетом корневой особенности Ван-Хова в плотности состояний широкой $1D$-зоны принимает вид

$$L_3 = \frac{1}{2}\int_{-\tilde{\Omega}}^{\tilde{\Omega}} \frac{d\xi}{\sqrt{\xi^2+\Delta_3^2}} \sqrt{\frac{E_{F3}}{\xi + E_{F3}}}\, \mathrm{th}\sqrt{\frac{\xi^2+\Delta_3^2}{2T}}, \tag{25}$$

где E_{F3} — энергия Ферми электронов в $1D$-цепочках ($E_{F3} \gg \tilde{\Omega}$). Как показано в [34], щели Δ_1 и Δ_2 должны иметь разные знаки ($\Delta_1 > 0$ и $\Delta_2 < 0$), а знак основного «лепестка» щели Δ_3 в направлении Г–Y (вдоль $1D$-цепочек) совпадает со знаком Δ_2. Соответствующая этому случаю структура щели с разными знаками в направлениях Г–X и Г–Y показана на рис. 5*б*.

Следует заметить, что на возможность такой структуры щели в Y(123), имитирующей d-волновой тип симметрии сверхпроводящего параметра порядка в туннельных экспериментах [25–27], было независимо указано в [48, 49].

Для определения температурных зависимостей параметров $\Delta_1 > 0$, $\Delta_2 < 0$ и $\Delta_3 < 0$ численно решалась система нелинейных уравнений (22)–(24). На рис. 6 показаны результаты вычислений, полученные при $\tilde{\lambda}_{21} < 0$, $\tilde{\lambda}_{31} < 0$ и $\tilde{\lambda}^*_{ij} < 0$ (при $i \neq j$), но $\tilde{\lambda}_{11} > 0$ и $\tilde{\lambda}^*_{ii} > 0$ ($i = 2, 3$). Как видим, в этом случае температурные зависимости отрицатель-

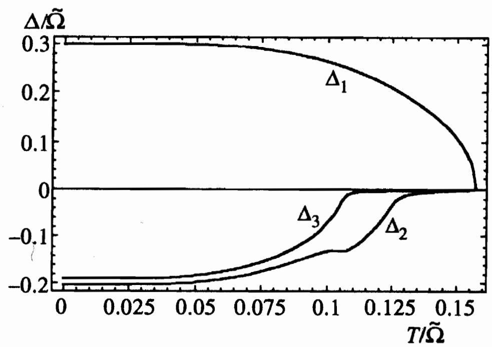

Рис. 6. Температурные зависимости положительного Δ_1 и отрицательных Δ_2 и Δ_3 параметров сверхпроводящей щели для следующих значений констант связи: $\tilde{\lambda}_{11} = 0.58$, $\tilde{\lambda}^*_{22} = 0.45$, $\tilde{\lambda}^*_{33} = 0.42$, $\tilde{\lambda}^*_{12} = -0.01$, $\tilde{\lambda}^*_{13} = -0.0$, $\tilde{\lambda}_{21} = -0.0015$, $\tilde{\lambda}^*_{23} = -0.021$, $\tilde{\lambda}_{31} = -0.001$, $\tilde{\lambda}^*_{32} = -0.001$ и при $E_{F1}/\tilde{\Omega} = 0.7$

ных щелей Δ_2 и Δ_3 радикально отличаются от зависимостей БКШ. В частности, для Δ_2 при определенном выборе параметров получается «ступенчатая» зависимость от T, качественно согласующуюся с экспериментальными данными [50]. Из рис. 6 следует, что анизотропия модуля щели $\Delta(\theta)$ зависит от температуры и возрастает по мере приближения к T_c.

6. ВЫВОДЫ

Таким образом, как показано в настоящей работе в рамках модели сверхпроводника с многокомпонентным параметром порядка, анизотропная структура сверхпроводящей щели, наблюдаемая с помощью ARPES-экспериментов в высокотемпературных сверхпроводниках на основе слоистых купратных металло-оксидных соединений, является следствием сильной анизотропии электронного спектра в плоскости слоев, которая может быть результатом гибридизации перекрывающихся широких и узких зон, с одной стороны, и конкуренции между эффективным притяжением за счет электрон-фононного и электрон-плазмонного взаимодействий и кулоновским отталкиванием, с другой стороны. В зависимости от значений констант взаимодействия может реализовываться либо d-, либо s-симметрия сверхпроводящей щели. Более того, поскольку константы связи, а также характерные энергии взаимодействия (в частности, энергия Ферми E_{F1} на седловых участках ферми-поверхности и энергия акустических плазмонов, гибридизующихся с оптическими фононами) зависят от концентрации носителей, на что указывает сильная концентрационная зависимость T_c в купратных металло-оксидных соединениях [47], по мере допирования (легирования), в принципе, возможен переход от одного типа симметрии щели к другому. Изменение симметрии параметра порядка в кристаллах Tl(2201) и Bi(2212) при изменении содержания кислорода наблюдалось недавно в работе [51].

В случае нарушенной исходной C_{v4}-симметрии зонного спектра в плоскости слоев в кристаллах Bi(2212) со сверхрешеткой или в Y(123) с упорядоченными $1D$-цепочками могут наблюдаться асимметричные структуры анизотропной сверхпроводящей щели и аномальные температурные зависимости щели, радикально отличающиеся от стандартной зависимости $\Delta(T)$ в теории БКШ.

ПРИЛОЖЕНИЕ

В случае почти локализованных на узлах кристаллической решетки «тяжелых» (h) носителей заряда в аномально узкой зоне матричный элемент электрон-плазмонного взаимодействия может быть вычислен, исходя из гамильтониана электрон-ионного взаимодействия:

$$H_{int}^{(ei)} = \sum_n \left[\delta \mathbf{R}_n \nabla \tilde{V}_{ei}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n^0) + \frac{\delta Z_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n^0)}{Z_i} \tilde{V}_{ei}^C(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n^0) \right], \tag{П.1}$$

где $\tilde{V}_{ei}$ и $\tilde{V}_{ei}^C$ — экранированный псевдопотенциал электрон-ионного взаимодействия и его кулоновская часть, $\delta \mathbf{R}_n$ — малое смещение иона из его положения равновесия $\mathbf{R}_n^0$, δZ_i — отклонение заряда иона с переменной (флуктуирующей) валентностью от его среднего значения Z_i в n-ом узле под действием продольного поля $\varphi(\mathbf{r})$ коллективных колебаний плотности h-носителей. Первый член в (П.1) описывает обычное электрон-фононное взаимодействие с акустическими и оптическими фононами в гармоническом приближении с матричным элементом (12), тогда как второй член соответствует адиабатическому электрон-плазмонную взаимодействию и с учетом уравнения Пуассона

$$\Delta \varphi(\mathbf{r}) = -4\pi e \sum_n \delta Z_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n^0)$$

в фурье-представлении, по аналогии с (12), принимает вид

$$\tilde{g}_{ij}^{pl}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \int d\mathbf{r} \Psi_{ik}^*(\mathbf{r}) \frac{(\mathbf{k} - \mathbf{k}')^2 \varphi_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}}{4\pi Z_i e} \tilde{V}_{ei}^C(\mathbf{r}) \Psi_{jk'}(\mathbf{r}), \tag{П.2}$$

где $\varphi_{\mathbf{q}}$ — фурье-компонента потенциала $\varphi(\mathbf{r})$, связанная с фурье-компонентой возмущения плотности заряда ионов $\delta Z_i(\mathbf{q})$ соотношением $q^2 \varphi_{\mathbf{q}} = 4\pi e \delta Z_i(\mathbf{q})$.

С другой стороны, операторы поля коллективных возбуждений зарядовой плотности $\hat{\varphi}_{\mathbf{q}}^+ \equiv \varphi_{\mathbf{q}}^* \hat{c}_{\mathbf{q}}^+$ и $\hat{\varphi}_{\mathbf{q}} \equiv \varphi_{\mathbf{q}} \hat{c}_{\mathbf{q}}$, где $\varphi_{\mathbf{q}}^* = \varphi_{-\mathbf{q}}$, а $\hat{c}_{\mathbf{q}}^+$ и $\hat{c}_{\mathbf{q}}$ — бозе-операторы рождения и уничтожения, связаны с операторами электронной плотности $\hat{\rho}_{\mathbf{q}} = \sum \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}$ соотношениями

$$\hat{\rho}_{\mathbf{q}} = \frac{q^2}{4\pi e} \hat{\varphi}_{\mathbf{q}} = \frac{q^2 \varphi_{\mathbf{q}}}{4\pi e} \hat{c}_{\mathbf{q}}, \quad \hat{\rho}_{-\mathbf{q}} = \frac{q^2}{4\pi e} \hat{\varphi}_{\mathbf{q}}^+ = \frac{q^2 \varphi_{\mathbf{q}}^*}{4\pi e} \hat{c}_{\mathbf{q}}^+. \tag{П.3}$$

Благодаря этому кулоновский гамильтониан

$$H_C = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} V_C(\mathbf{q}) \hat{\rho}_{\mathbf{q}} \hat{\rho}_{-\mathbf{q}} \tag{П.4}$$

в приближении самосогласованного поля с учетом адиабатической экранировки НЧ возмущений зарядовой плотности h-носителей почти свободными «легкими» (l) носителями тока в широкой зоне проводимости может быть с хорошей точностью представлен в виде, аналогичном гамильтониану Фрелиха:

$$\tilde{H}_C \cong \sum_{\mathbf{q},\mathbf{k},\sigma} \frac{q^2}{4\pi e} \varphi_{\mathbf{q}} \tilde{V}_C(\mathbf{q}) \left(\hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma} \hat{c}_{\mathbf{q}}^+ + \text{H.c.} \right), \quad \tilde{V}_C(\mathbf{q}) = \frac{4\pi e^2}{q^2 + \kappa_l^2}, \tag{П.5}$$

κ_l — обратный радиус экранирования l-носителями.

В то же время вершинная часть (четырехполюсник) запаздывающего экранированного кулоновского взаимодействия в области существования слабо затухающих акустических плазмонов ($qv_{Fh} \ll \omega \ll qv_{Fl}$) имеет вид [13, 43]

$$\Gamma_{ee}(\mathbf{q},\omega) \equiv \frac{4\pi e^2}{q^2\varepsilon(\mathbf{q},\omega)} \cong \tilde{V}_C(\mathbf{q})\frac{\omega^2}{\omega^2-\omega_{pl}^2(\mathbf{q})}, \tag{П.6}$$

где $\omega_{pl}(\mathbf{q}) \approx q\Omega_h/\sqrt{q^2+\kappa_l^2}$, а Ω_h — плазменная частота h-носителей.

По аналогии с электрон-фононным взаимодействием можно ввести плазмонную функцию Грина:

$$D_{pl}(\mathbf{q},\omega) = \frac{\omega_{pl}(\mathbf{q})}{2}\left[\frac{1}{\omega-\omega_{pl}(\mathbf{q})+i\delta} - \frac{1}{\omega+\omega_{pl}(\mathbf{q})-i\delta}\right], \tag{П.7}$$

так что выражение (П.6) принимает вид

$$\Gamma_{ee}(\mathbf{q},\omega) = \tilde{V}_C(\mathbf{q})\left[D_{pl}(\mathbf{q},\omega)+1\right]. \tag{П.8}$$

Первое слагаемое в (П.8) соответствует запаздывающему межэлектронному взаимодействию за счет обмена виртуальными акустическими плазмонами, а соответствующий эффективный гамильтониан электрон-плазмонного взаимодействия может быть представлен в виде

$$\hat{H}_{e-pl} = \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},\sigma} g_{pl}(\mathbf{q})\hat{a}^{+}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}\hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}\left(\hat{c}^{+}_{\mathbf{q}}+\hat{c}_{-\mathbf{q}}\right), \tag{П.9}$$

где $g^2_{pl}(\mathbf{q}) = \tilde{V}_C(\mathbf{q})$. Сопоставляя (П.9) и (П.5), находим

$$\frac{q^2\varphi_{\mathbf{q}}}{4\pi e} = \frac{g_{pl}(\mathbf{q})}{\tilde{V}_C(\mathbf{q})} = \frac{1}{\sqrt{\tilde{V}_C(\mathbf{q})}}, \tag{П.10}$$

откуда следует выражение (13). Заметим, что в электронных волновых функциях $\Psi_{\mathbf{k},i}(\mathbf{r})$ благодаря сингулярности кулоновской части псевдопотенциала $\tilde{V}^C_{ei}(\mathbf{r})$ в точке $r = 0$ плавные блоховские множители $u_{\mathbf{k},i}(\mathbf{r})$ могут быть с хорошей точностью заменены на $u_{\mathbf{k},i}(0)$ и вынесены из под интеграла по $\mathbf{r}$. Учитывая также, что фурье-компонента $\tilde{V}^C_{ei}(\mathbf{r})$ равна

$$\tilde{V}^C_{ei}(\mathbf{q}) = \frac{4\pi e^2 Z_i}{q^2+\kappa_l^2},$$

можем представить матричный элемент электрон-плазмонного взаимодействия в частично факторизованном виде:

$$\tilde{g}^{pl}_{ij}(\mathbf{k},\mathbf{k}') \cong u^*_{\mathbf{k},i}(0)u_{\mathbf{k},j}(0)g_{pl}(\mathbf{k}-\mathbf{k}'), \tag{П.11}$$

который отражает анизотропию зонного спектра в монокристаллах купратных металлооксидных соединений.

Литература

1. Z.-X. Shen, D. S. Dessau, B. O. Wells et al., Phys. Rev. Lett. **70**, 1553 (1993).
2. W. N. Hardy, D. A. Bonn, D. C. Morgan et al., Phys. Rev. Lett. **70**, 3999 (1993).
3. R. J. Kelley, Jian Ma, G. Quitmann et al., Phys. Rev. B **50**, 590 (1994).
4. R. J. Kelley, Jian Ma, G. Margaritondo, and M. Onellion, *Proc. of the 4th Int. Conf. M^2S HTSC*, Grenoble (France), July 1994, p. 268.
5. Jian Ma, P. Almeras, R. J. Kelley et al., Phys. Rev. B **51**, 9271 (1995).
6. D. S. Dessau, Z.-X. Shen, D. M. King et al., Phys. Rev. Lett. **71**, 2781 (1993).
7. D. M. King, Z.-X. Shen, and D. S. Dessau, Phys. Rev. Lett. **73**, 3298 (1994).
8. V. Gofron, J. C. Campuzano, A. A. Abrikosov et al., Phys. Rev. Lett. **73**, 3302 (1994).
9. A. A. Abrikosov, J. C. Campuzano, and V. Gofron, Physica C **214**, 73 (1993).
10. A. A. Abrikosov, Physica C **214**, 107 (1993); **222**, 191 (1994); **244**, 243 (1995).
11. Дж. Шриффер, *Теория сверхпроводимости*, Наука, Москва (1970).
12. H. Froehlich, Phys. Lett. A **26**, 169 (1968); J. Phys. C **1**, 544 (1968).
13. Э. А. Пашицкий, ЖЭТФ **55**, 2387 (1968); **56**, 662 (1969).
14. J. Ruvalds, Adv. Phys. **30**, 677 (1981).
15. D. Pines and J. R. Schrieffer, Phys. Rev. **124**, 1387 (1961).
16. H. Ding, J. C. Campuzano, A. F. Bellman et al., Rhys. Rev. Lett. **74**, 2784 (1995).
17. R. Ferenbacher and M. R. Norman, Phys. Rev. Lett. **74**, 3884 (1995).
18. M. R. Norman, M. Randeria, H. Ding, and J. C. Campuzano, Phys. Rev. B **52**, 615 (1995).
19. A. J. Millis, H. Monien, and D. Pines, Phys. Rev B **42**, 167 (1990).
20. P. Monthoux, A. V. Balatsky, and D. Pines, Phys. Rev. B **46**, 14803 (1992).
21. P. Monthoux and D. Pines, Phys. Rev. B **47**, 6069 (1993).
22. R. L. Withers et al., J. Phys. C **21**, 6067 (1988).
23. M. R. Norman, M. Randeria, H. Ding, J. C. Campuzano, and A. F. Bellman, Phys. Rev. B **52**, 15107 (1995).
24. H. Ding, M. R. Norman, J. C. Campuzano et al., E-prints archive cond-mat/9603044.
25. D. A. Wollman, D. J. Van Harlingen, W. C. Lee, D. M. Ginsberg, and A. J. Leggett, Phys. Rev. Lett. **71**, 2134 (1993); D. A. Wollman, D. J. Van Harlingen, J. Giapintzakis et al., Phys. Rev. Lett. **74**, 797 (1995).
26. I. Iguchi and Z. Wan, Phys. Rev. B **49**, 12388 (1994).
27. D. A. Browner and H. R. Ott, Phys. Rev. B **50**, 6530 (1994).
28. S. S. Tsuei, J. R. Kirtley, C. C. Chi, Lock See Yu-Jahnes, A. Gupta, T. Shaw, J. Z. Sem, and M. B. Ketchen, Phys. Rev. Lett. **73**, 593 (1994).
29. J. R. Kirtley, S. S. Tsuei, M. Rupp et al., Phys. Rev. Lett. **76**, 1336 (1996).
30. J. Yu, S. Massida, and A. J. Freeman, Physica C **152**, 273 (1988).
31. Y. Kubo, Phys. Rev. B **50**, 3181 (1994).
32. P. Mandal, A. Poddar, P. Choudhury et al., Indian J. Pure and Appl. Phys. **30**, 531 (1992).
33. N. L. Wang, V. Chong, C. Y. Wang et al., Phys. Rev. B **47**, 3347 (1993).
34. R. Combescot and X. Leyronas, Phys. Rev. Lett. **75**, 3732 (1995).
35. Г. М. Элиашберг, ЖЭТФ **38**, 966 (1960); **39**, 1437 (1960).
36. Б. Т. Гейликман, ЖЭТФ **48**, 1194 (1965); УФН **88**, 327 (1966).
37. Э. А. Пашицкий, А. С. Шпигель, Укр. Физ. Ж. **23**, 669 (1978).
38. А. М. Габович, Э. А. Пашицкий, А. С. Шпигель, ЖЭТФ **77**, 1157 (1979).
39. В. Л. Гуревич, А. И. Ларкин, Ю. А. Фирсов, ФТТ **4**, 185 (1962).
40. M. L. Cohen, Phys. Rev. **134**, 511 (1964).
41. Э. А. Пашицкий, В. Л. Макаров, С. Д. Терещенко, ФТТ **16**, 427 (1974).
42. Э. А. Пашицкий, Ю. М. Малозовский, А. В. Семенов, ЖЭТФ **100**, 465 (1991); Укр. Физ. Ж. **36**, 889 (1991); Supercond. Sci. Technol. **5**, 507 (1992).

43. Э. А. Пашицкий, ЖЭТФ **103**, 867 (1993); ФНТ **19**, 140, 350 (1993); **21**, 995, 1091 (1995).
44. Э. А. Пашицкий, В. И. Пентегов, Письма в ЖЭТФ **63**, 553 (1996).
45. В. А. Москаленко, ФММ **8**, 503 (1959).
46. H. Suhl, B. T. Matthias, and L. R. Walker, Phys. Rev. Lett. **3**, 552 (1959).
47. J. L. Tallon, R. G. Buckley, E. M. Haines et al., Physica C **185–189**, (1991).
48. Э. А. Пашицкий, Письма в ЖЭТФ **61**, 264 (1995).
49. A. A. Golubov and I. I. Mazin, Physica C **243**, 153 (1995).
50. Jian Ma, G. Quitmann, R. J. Kelley et al., Physica C **235–240**, 1875 (1994).
51. C. Kendziora, R. J. Kelly, and M. Onellion, Phys. Rev. Lett. **77**, 727 (1996).