

ПЕРЕХОДЫ ДИЭЛЕКТРИК–СВЕРХПРОВОДНИК–МЕТАЛЛ, ИНДУЦИРОВАННЫЕ СПИНОВЫМИ ФЛУКТУАЦИЯМИ, В ПАРАМАГНИТНОЙ ФАЗЕ ЛЕГИРОВАННЫХ ДИЭЛЕКТРИКОВ

А. И. Агафонов, Э. А. Манькин***

*Институт сверхпроводимости и физики твердого тела
Российский научный центр «Курчатовский институт»
123182, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 31 мая 1999 г.

Моделируется зонная структура купратов как легированный $2D$ -диэлектрик в предположении, что избыточные носители заряда связаны с соответствующими атомами замещения, и изучается фазовая диаграмма парамагнитных состояний в зависимости от степени легирования x при нулевой температуре, при этом гамильтониан содержит электронные корреляции на примесных орбиталях и гибридизацию между ними и исходными зонными состояниями диэлектрика. Показано, что изменение электронной структуры легированного соединения включает образование примесных зон распространенных и локализованных электронных состояний в исходной диэлектрической щели. Установлено, что в случае одного избыточного электрона на атом замещения спиновые флуктуации: 1) обуславливают диэлектрическое состояние легированного соединения при $x < x_{thr,1}$; 2) приводят к сверхпроводящему состоянию при $x_{thr,1} < x < x_{thr,2}$; 3) затухают при дальнейшем увеличении $x > x_{thr,2}$, а легированное соединение переходит в парамагнитное состояние «плохого» металла с высокой плотностью локализованных электронных состояний на уровне Ферми.

PACS: 74.20.-z, 71.30.+h

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время интенсивно исследуются фазовые переходы в легированных купратах. Исходные соединения имеют, как правило, антиферромагнитное диэлектрическое состояние. Известно, что магнитная фаза исчезает при малых концентрациях примеси замещения [1, 2]. Затем при дальнейшем увеличении концентрации примеси в парамагнитной фазе осуществляются фазовые переходы диэлектрик–сверхпроводник–металл. Однако эта парамагнитная фаза представляет необычные спин-динамические свойства, которые могут содержать существенную информацию о происхождении нормального состояния, а также о механизме сверхпроводимости [2–9].

Построение теории нормального и сверхпроводящего состояний в значительной степени основано на предположении о природе избыточных носителей заряда, вводимых в электронную систему при-

месным ансамблем. В настоящее время в большинстве работ считается, что эти избыточные носители заряда 1) являются свободными, 2) покидают промежуточные слои купратов, которые рассматриваются как резервуары носителей заряда, 3) мигрируют в CuO_2 -плоскости [1, 2, 6, 7, 10]. На этом основано наиболее распространенное направление исследований ВТСП, заключающееся в том, что она обусловлена процессами, происходящими в регулярной $2D$ -решетке CuO_2 -плоскостей при переменном их заполнении [1–8, 11–14]. Для описания этих процессов используются модели сильно коррелированных электронов, базисом для которых является модель Хаббарда в узельном представлении.

После того как было получено, что подвижность носителей заряда в купратах сравнима с критерием Мотта–Иоффе–Регеля, стало ясно, что эффекты локализации играют в этих системах важную роль [15, 16]. Вследствие этого возникло другое направление в исследовании ВТСП, в котором ВТСП-материалы рассматриваются как легированные полупроводники [15, 17–20]. Этот подход основан на предположении, что избыточные носители

*E-mail: aai@issph.kiae.ru

**E-mail: edmany@issph.kiae.ru

заряда являются исходно связанными с соответствующими примесными атомами. Важным обстоятельством для такого рассмотрения является то, что в парамагнитной диэлектрической фазе, за которой непосредственно следует сверхпроводящая фаза, электронные свойства (в частности, проводимость) легированных купратов определяются активированными перескоками носителей заряда между локализованными состояниями [17, 21–24], что типично для легированных полупроводников.

Данные ARPES для $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+y}$ показали, что как в нормальном, так и в сверхпроводящем состояниях электронная структура вблизи уровня Ферми образована двумя типами зон (см. [25] и ссылки в ней). Первый тип соответствует узким зонам, лежащим в пределах ± 40 мэВ от уровня Ферми и имеющим хорошо определенную электронную дисперсию, т. е. эти зоны соответствуют распространенным состояниям. Зоны второго типа не имеют дисперсии в широкой области значений волновых векторов. Сглаживание дисперсионной зависимости в определенных областях спектра можно получить в рамках модели Эмери [2, 13, 25]. Однако, учитывая свойства купратов в парамагнитной диэлектрической фазе, можно предположить [26], что эти зоны относятся к локализованным состояниям, которые сосуществуют с распространенными состояниями вблизи уровня Ферми и дают вклад в образование сверхпроводящего состояния.

В настоящее время нет единой теории ВТСП. Связано это, прежде всего, с тем, что теория должна адекватно описывать совокупность необычных свойств купратов в диэлектрической, металлической и сверхпроводящей фазах. Поэтому разрабатываемый нами подход представляет собой одну из возможностей описать как диэлектрические, так и сверхпроводящие и металлические состояния.

2. МОДЕЛЬ

Исходные купраты относятся к системам сильно коррелированных электронов и являются диэлектриками, в которых важная часть электронной структуры вблизи диэлектрической щели, обусловленной переносом заряда, формируется, главным образом, O $2p$ - и Cu $3d$ -орбиталями [2]. Структурная ячейка соединения La_2CuO_4 содержит одну CuO_2 -плоскость, которая расположена между двумя LaO -плоскостями. При введении примеси замещения в $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, атомы La^{3+} случайным образом замещаются атомами Sr^{2+} . Оба валентных электрона Sr идут на образование валентных связей и, следовательно, можно ожидать возникновения однократно заполненной примесной орби-

тали акцепторного типа вблизи купратной плоскости [17, 19, 27].

Поскольку базис исходных зонных состояний определяется слоем CuO_2 , который не меняется при легировании, взаимодействие примесных орбиталей с зонными состояниями CuO_2 -плоскости можно описать гибридизацией между ними. Здесь, для простоты, ограничимся однозонным приближением (валентная зона) для плотности состояний в CuO_2 -плоскости. Учитывая сильную анизотропию физических характеристик купратов, гамильтониан для одной структурной ячейки, не связанной с другими ячейками переносом заряда вдоль оси $c(z)$, можно представить в виде [27]

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{j\sigma} \varepsilon_0 a_{j\sigma}^{\dagger} a_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{j\sigma} U n_{j\sigma} n_{j,-\sigma} + \sum_{j,\mathbf{k}\sigma} \{V_{\mathbf{k}j} a_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} a_{j\sigma} + \text{h.c.}\}, \quad (1)$$

где $a_{\mathbf{k}\sigma}$ и $a_{j\sigma}$ — обычные операторы уничтожения соответственно для исходного зонного состояния диэлектрика и для примесной орбитали с номером j ; $\sigma = \pm 1/2$ — спиновый индекс; \mathbf{k} — волновой $2D$ -вектор электрона в зонном состоянии с энергией $\varepsilon_{\mathbf{k}}$; ε_0 — энергия примесной орбитали; $V_{\mathbf{k}j}$ — матричный элемент гибридизации; U — затравочный параметр внутрицентрового взаимодействия электронов на примесной орбитали ($U > 0$).

Структура Nd_2CuO_4 является подобной La_2CuO_4 за исключением позиций атомов O вне CuO_2 -плоскостей. При «электронном легировании» замещение атомов Nd^{3+} атомами Ce^{4+} должно приводить к возникновению однократно заполненного донорного уровня в $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$. В случае $\text{La}_2\text{CuO}_{4+y}$ избыточные атомы кислорода могут занимать междоузельные позиции вблизи CuO_2 -плоскостей. Тогда все валентные электроны атомов O могут принимать участие в формировании примесных зон.

В (1) примесная орбиталь характеризуется двумя параметрами, ε_0 и U . Последний является важным параметром модели, который можно оценить как

$$U \simeq \frac{e^2}{\varepsilon_{opt} a_{eff}}, \quad (2)$$

где a_{eff} — эффективный радиус Бора примесной орбитали и ε_{opt} — высокочастотная диэлектрическая константа соединения. Известна оценка эффективного радиуса для легированных купратов в диэлектрическом состоянии: $a_{eff} = 4-8 \text{ \AA}$ [17, 21–24]. Подставляя в (2) типичное значение $\varepsilon_{opt} = 3$ [28], получаем $U \simeq 0.6 \text{ эВ}$. В то же время, согласно данным

ARPES типичная ширина основного пика валентной зоны, определяемая спектром одноэлектронных состояний купратной плоскости, $2D_b \simeq 3$ эВ [25].

Выше отмечалось, что изменение электронной структуры легированных купратов должно включать образование примесных зон как распространенных, так и локализованных состояний в области диэлектрической щели. Формально (1) представляет собой гамильтониан Андерсона [29], который обобщен на ансамбль атомов замещения, случайным образом распределенных в исходной решетке. Как известно, гамильтониан Андерсона для единственного примесного атома имеет решения только для локализованных состояний в щели. Использование обобщения модели на ансамбль примеси приводит к тому, что (1) содержит решения, отвечающие образованию примесных зон как локализованных, так и распространенных электронных состояний в щели. Это было продемонстрировано при решении (1) в приближении Хартри—Фока [30]. Образование узких примесных зон распространенных состояний с высокой плотностью обусловлено гибридизацией, которая приводит к виртуальным одноэлектронным переходам: исходный примесный узел \rightarrow \mathbf{k} -зонное состояние \rightarrow другой узел \rightarrow \mathbf{k}_1 -зонное состояние и так далее.

Как известно, в приближении Хартри—Фока пренебрегается спиновыми флуктуациями. Было получено [30], что в случае одного избыточного электрона на примесь парамагнитное решение (1) в этом приближении всегда соответствует металлическому состоянию, в котором уровень Ферми лежит в двух перекрывающихся зонах локализованных и распространенных состояний. То есть, в приближении Хартри—Фока не удается описать парамагнитный переход диэлектрик—металл при изменении степени легирования.

Однако ситуация радикально меняется, когда спиновые флуктуации принимаются во внимание. В этом случае возникает возможность получить диэлектрическое, сверхпроводящее и металлическое состояния в парамагнитной фазе легированного диэлектрика, что будет приведено ниже.

3. ПАРАМАГНИТНОЕ РЕШЕНИЕ

Введем нормальные функции Грина:

$$G_{\eta\eta_1}^{\sigma\sigma_1}(t, t_1) = -i\langle N_{\sigma_1-\sigma} | T \tilde{a}_{\eta\sigma}(t) \tilde{a}_{\eta_1\sigma_1}^+(t_1) | N_0 \rangle,$$

и аномальные функции Грина:

$$F_{\eta\eta_1}^{(+)\sigma\sigma_1}(t, t_1) = \exp(-2i\mu t) \langle (N+2)_{\sigma+\sigma_1} | T \tilde{a}_{\eta\sigma}^+(t) \tilde{a}_{\eta_1\sigma_1}^+(t_1) | N_0 \rangle,$$

$$F_{\eta\eta_1}^{\sigma\sigma_1}(t, t_1) = \exp(2i\mu t) \langle N_0 | T \tilde{a}_{\eta,\sigma}(t) \tilde{a}_{\eta_1\sigma_1}(t_1) | (N+2)_{\sigma+\sigma_1} \rangle,$$

где использованы операторы в гайзенберговском представлении с гамильтонианом (1); η принимает значения \mathbf{k} или j ; μ — химический потенциал системы. Усреднение проводится по основным состояниям системы с полными числами частиц N и $N+2$ [31]. Нижний индекс у основных состояний $|N_{\sigma_1-\sigma}\rangle$ и $|(N+2)_{\sigma+\sigma_1}\rangle$ указывает на наличие избыточных спинов при заданном полном числе частиц по сравнению со спиновым состоянием в $|N_0\rangle$ и $|(N+2)_0\rangle$.

Используя (1), легко получить замкнутую систему уравнений для функций Грина. Парамагнитное решение этой системы для функций Грина, усредненных по случайному распределению атомов замещения, найдено в [32]. Ниже будет приведено это решение, но сначала обсудим параметры порядка, имеющиеся в рассматриваемой модели. Здесь используется представление заданного числа частиц.

Первый параметр определяется средним числом заполнения локализованных орбиталей:

$$G_{jj}^{\sigma\sigma}(-0^+) = -i \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\mu} d\omega \operatorname{Im} G_{jj}^{\sigma\sigma}(\omega) = iA_{j,\sigma}. \quad (3)$$

Кроме этого, в системе имеются два различных типа параметров порядка, связанных со спиновыми флуктуациями [32]. Один из них определяется недиагональными по спиновым индексам нормальными функциями Грина для локализованных состояний:

$$G_{jj}^{\sigma,-\sigma}(0^+) = -i \frac{1}{\pi} \int_{\mu}^{+\infty} d\omega \operatorname{Im} G_{jj}^{\sigma,-\sigma}(\omega) = i\lambda_j^{\sigma,-\sigma}. \quad (4)$$

Легко видеть, что для нормального состояния системы влияние спиновых флуктуаций описывается именно величиной λ .

Возможность сверхпроводящего состояния системы связана с аномальными функциями Грина. Здесь важен параметр порядка, который определяется недиагональными по спиновым переменным узельными функциями Грина $F_{jj}^{(+)\sigma,-\sigma}(\omega)$ и $F_{jj}^{\sigma,-\sigma}(\omega)$. Эти функции описывают локализованные бозоны с нулевым спином. Введем обозначение:

$$F_{jj}^{\sigma,-\sigma}(0^+) = \lim_{t \rightarrow 0^+} \int \frac{d\omega}{2\pi} F_{jj}^{\sigma,-\sigma}(\omega) \exp(-i\omega t) = i\beta_j^{\sigma,-\sigma}. \quad (5)$$

Интегральные уравнения (3)–(5) следует дополнить уравнением для энергии Ферми μ :

$$(1+x)N_t = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\mu} d\omega \operatorname{Im} \operatorname{Tr} G(\omega), \quad (6)$$

где N_t — полное число электронов в исходной зоне диэлектрика (для определенности, валентная зона CuO_2 -плоскости, легирование — дырочное); $N_{im} = xN_t$ — концентрация атомов замещения. Здесь считается, что примесный уровень является однократно заполненным. Величина x будет рассматриваться как степень легирования.

Мы полагаем, что примесные атомы случайным образом занимают эквивалентные узлы кристаллической решетки материала. В этом случае параметры порядка (3)–(5) не зависят от j . Для парамагнитной фазы можно опустить спиновые индексы у параметров A , λ и β [32]. Величина A есть фактор заполнения локализованной орбитали и, следовательно, является реальной и положительной. Поскольку (1) не меняется в результате следующего преобразования в двух спиновых подпространствах:

$$a_{\eta,\uparrow} \rightarrow a_{\eta,\uparrow} \exp(i\phi), \quad a_{\eta,\downarrow} \rightarrow a_{\eta,\downarrow} \exp(-i\phi)$$

с постоянной фазой ϕ , одну из величин λ (4) или β (5) можно выбрать вещественной. Для определенности выберем вещественной λ . Характеристики сверхпроводящего состояния определяются только модулем комплексной величины β .

Для рассматриваемого примесного ансамбля матричный элемент гибридизации имеет вид:

$$V_{\mathbf{k}j} = V_{\mathbf{k}l} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}_j),$$

где \mathbf{R}_j — двумерный радиус-вектор j -го атома замещения.

С учетом (1) решение замкнутой системы уравнений для функций Грина можно представить в виде рядов, члены которых имеют структуру подобного типа:

$$\sum_{\{j_{m+1}\}, \{\mathbf{k}_m\}} V_{\mathbf{k}j_1} V_{j_1\mathbf{k}_1} V_{\mathbf{k}_1j_2} V_{j_2\mathbf{k}_2} \cdots \cdots V_{\mathbf{k}_m j_{m+1}} V_{j_{m+1}\mathbf{k}} \prod_m F(\mathbf{k}_m),$$

где $F(\mathbf{k}_m)$ — известные функции, зависящие от волновых векторов.

Учитывая $V_{\mathbf{k}j}$, при выполнении суммирования по $\{j\}$ следует проводить усреднение полученного результата по случайному распределению примесных атомов $\{\mathbf{R}_j\}$. При этом возникает необходи-

мость вычисления s -тых моментов следующего типа [33]:

$$M_s(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \dots, \mathbf{k}_s) = \left\langle \sum_{\{n_1\}} \sum_{\{n_2\}} \cdots \sum_{\{n_s\}} \exp\left(-i \sum_m \mathbf{k}_m \mathbf{R}_{n_m}\right) \right\rangle_{av},$$

где $\langle \dots \rangle_{av}$ обозначает усреднение по всем возможным конфигурациям примесного ансамбля. Тогда вычисление конфигурационно-усредненных функций Грина сводится к суммированию возникающих рядов, s -тый член которых является полиномом s -той степени по концентрации примеси [33, 30].

Это решение удобно представить в матричной форме, в которой недиагональные по нижним индексам функции Грина выражены через диагональные [32]. При этом возникают остаточные члены пропорциональные двойным суммам следующего типа:

$$\sum_{\mathbf{k}_1 \neq \mathbf{k}, j_1 \neq j} V_{\mathbf{k}j_1} V_{j_1\mathbf{k}_1} G_{\mathbf{k}_1 j}^{\sigma\sigma_1}(\omega).$$

Первая поправка к недиагональным по нижним индексам функциям Грина, обусловленная подобными членами, равна нулю, поскольку суммирование по j_1 и усреднение по случайному распределению примесных атомов дает

$$\left\langle \sum_{\mathbf{k}_1 \neq \mathbf{k}, j_1 \neq j} \exp(i(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1)\mathbf{R}_{j_1}) \right\rangle_{av} = N_{im} \sum_{\mathbf{k}_1 \neq \mathbf{k}} \delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}) = 0.$$

Во втором порядке возникают поправки к недиагональным по нижним индексам функциям Грина $\propto x^2$. Поскольку реально $x \ll 1$, подобными двойными суммами в [32] пренебрегалось, а диаграммы $\propto x^n$ с $n \geq 2$ были просуммированы лишь частично. Детали расчетов можно найти в [32].

Введем обозначения:

$$\begin{aligned} G_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^{(0)}(\omega) &= (\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}})^{-1}, \\ F_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^{(0)}(\omega) &= (\omega + \varepsilon_{\mathbf{k}} - 2\mu)^{-1}, \\ \tilde{G}_{ll}(\omega, A, \lambda) &= (\omega - \varepsilon_0 - U(A - \lambda))^{-1}, \\ \tilde{F}_{ll}(\omega, A, \lambda, \mu) &= (\omega + \varepsilon_0 - 2\mu + U(A + \lambda))^{-1}. \end{aligned}$$

Теперь для парамагнитной фазы приведем выражения для узельных функций Грина [32]:

$$G_{jj}^{\sigma\sigma_1} = \frac{1}{2} (G_{loc}(\omega; \mu, A, \lambda, \beta) + (-1)^{\sigma-\sigma_1} G_{loc}(\omega; \mu, A, -\lambda, \beta)), \quad (7)$$

где

$$G_{loc} = \frac{\omega + \varepsilon_0 - 2\mu - S_2(\lambda)}{(\omega + \varepsilon_0 - 2\mu - S_2(\lambda))(\omega - \varepsilon_0 - S_1(\lambda)) - |\beta|^2 U^2 Z^2(\lambda)} \quad (8)$$

и

$$F_{jj}^{(+)\sigma\sigma_1} = \frac{1}{2} ((-1)^{\sigma-\sigma_1} F_{loc}(\omega; \mu, A, \lambda, \beta) - F_{loc}(\omega; \mu, A, -\lambda, \beta)), \quad (9)$$

где

$$F_{loc} = \frac{\beta^* U Z(\omega; A, \mu, \lambda; \beta)}{(\omega + \varepsilon_0 - 2\mu - S_2(\lambda))(\omega - \varepsilon_0 - S_1(\lambda)) - |\beta|^2 U^2 Z^2(\lambda)}. \quad (10)$$

В выражениях (8) и (10) S_1 и S_2 — собственно-энергетические части, которые имеют вид

$$S_1(\omega; A, \lambda, \mu, \beta) = U(A - \lambda) + \sum_{\mathbf{k}} \frac{V_{\mathbf{k}l}^2 [F_{-\mathbf{k}-\mathbf{k}}^{(0)-1} - xN_t T_{ll}^{-1}(\omega) \tilde{G}_{ll}^{-1} V_{\mathbf{k}l}^2]}{G_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^{(0)-1} F_{-\mathbf{k}-\mathbf{k}}^{(0)-1} - xN_t V_{\mathbf{k}l}^2 T_{ll}^{-1}(\omega) [\tilde{G}_{ll}^{-1} G_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^{(0)-1} + \tilde{F}_{ll}^{-1} F_{-\mathbf{k}-\mathbf{k}}^{(0)-1} - xN_t V_{\mathbf{k}l}^2]} \quad (11)$$

и

$$S_2(\omega; A, \lambda, \mu, \beta) = -U(A + \lambda) + \sum_{\mathbf{k}} \frac{V_{\mathbf{k}l}^2 [G_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^{(0)-1} - xN_t T_{ll}^{-1}(\omega) \tilde{F}_{ll}^{-1} V_{\mathbf{k}l}^2]}{G_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^{(0)-1} F_{-\mathbf{k}-\mathbf{k}}^{(0)-1} - xN_t V_{\mathbf{k}l}^2 T_{ll}^{-1}(\omega) [\tilde{G}_{ll}^{-1} G_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^{(0)-1} + \tilde{F}_{ll}^{-1} F_{-\mathbf{k}-\mathbf{k}}^{(0)-1} - xN_t V_{\mathbf{k}l}^2]}, \quad (12)$$

где

$$T_{ll}(\omega) = \tilde{G}_{ll}^{-1} \tilde{F}_{ll}^{-1} - |\beta|^2 U^2. \quad (13)$$

Функция $Z(\omega; A, \lambda, \mu, \beta)$ имеет следующий вид:

$$Z(\omega; A, \lambda, \mu, \beta) = 1 + \frac{xN_t}{T_{ll}(\omega)} \sum_{\mathbf{k}} \frac{V_{\mathbf{k}l}^4}{G_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^{(0)-1} F_{-\mathbf{k}-\mathbf{k}}^{(0)-1} - xN_t V_{\mathbf{k}l}^2 T_{ll}^{-1}(\omega) [\tilde{G}_{ll}^{-1} G_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^{(0)-1} + \tilde{F}_{ll}^{-1} F_{-\mathbf{k}-\mathbf{k}}^{(0)-1} - xN_t V_{\mathbf{k}l}^2]}. \quad (14)$$

Одночастичные и двухчастичные распространенные состояния определяются следующими функциями Грина [32]:

$$G_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^{\sigma, \sigma_1} = \frac{1}{2} (G_{ext}(\mathbf{k}, \omega; \mu, A, \lambda, \beta) + (-1)^{\sigma-\sigma_1} G_{ext}(\mathbf{k}, \omega; \mu, A, -\lambda, \beta)), \quad (15)$$

где

$$G_{ext} = \frac{F_{-\mathbf{k}-\mathbf{k}}^{(0)-1} - b_1(\lambda)W(\lambda)}{(G_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^{(0)-1} - b_2(\lambda)W(\lambda)) (F_{-\mathbf{k}-\mathbf{k}}^{(0)-1} - b_1(\lambda)W(\lambda)) - |\beta|^2 U^2 W^2(\lambda)}, \quad (16)$$

и

$$F_{-\mathbf{k}\mathbf{k}}^{(+)\sigma, \sigma_1} = \frac{1}{2} \left((-1)^{\sigma + \sigma_1} F_{ext}(\mathbf{k}, \omega; \mu, A, \lambda, \beta) + F_{ext}(\mathbf{k}, \omega; \mu, A, -\lambda, \beta) \right), \quad (17)$$

где

$$F_{ext} = \frac{\beta^* U W(\lambda)}{\left(G_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^{(0)-1} - b_2(\lambda) W(\lambda) \right) \left(F_{-\mathbf{k}-\mathbf{k}}^{(0)-1} - b_1(\lambda) W(\lambda) \right) - |\beta|^2 U^2 W^2(\lambda)}. \quad (18)$$

В (15)–(18) использовано обозначение:

$$b_1(\lambda) = \tilde{G}_l^{-1} - \sum_{\mathbf{k}_1} V_{\mathbf{k}_1 l}^2 G_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_1}^{(0)}, \quad (19)$$

$$b_2(\lambda) = \tilde{F}_l^{-1} - \sum_{\mathbf{k}_1} V_{\mathbf{k}_1 l}^2 F_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_1}^{(0)} \quad (20)$$

и

$$W(\lambda) = \frac{N_{im} V_{\mathbf{k}_1 l}^2}{b_1(\lambda) b_2(\lambda) - |\beta|^2 U^2}. \quad (21)$$

Теперь проведем анализ решения (3)–(21). Это решение определяется четырьмя самосогласованными параметрами, μ, A, λ, β , которые находятся из четырех интегральных уравнений (3)–(6). Если уравнение (5) имеет только тривиальное решение $\beta = 0$, то, как легко видеть, состояние легированного материала является нормальным. При этом электронная структура определяется только одночастичными нормальными функциями Грина для локализованных (7) и распространенных (15) электронных состояний. Эти функции имеют полюса как в области исходной зоны, так и в области исходной диэлектрической щели, где образуются примесные зоны как локализованных, так и распространенных состояний. Выше отмечалось, что образование примесных зон распространенных одночастичных состояний обусловлено гибридизацией, которая приводит к одноэлектронным переходам: исходный примесный узел \rightarrow зонное состояние \rightarrow другой узел \rightarrow зонное состояние и так далее.

Возникновение сверхпроводящего состояния определяется только существованием нетривиального решения $\beta \neq 0$ уравнения (5) для аномальной синглетной функции Грина $F_{jj}^{(+)\sigma, -\sigma}$. Такое решение означает образование локализованных бозонов со спином 0. Кроме них должны также присутствовать и локализованные бозоны со спином 1, как это видно из (9) и (10). И именно этот спин-флуктуационный параметр β задает функцию F_{ext} (18), через которую определяется сверхпроводящий конденсат как в синглетном, так и в триплетном каналах спаривания квазичастиц (17).

Таким образом, в этой теории спин-флуктуационной сверхпроводимости в легированных диэлектриках не возникает уравнения типа БКШ для энергетической щели. Вместо него ключевым для сверхпроводящего состояния является уравнение (5), описывающее локализованные бозоны со спином 0. Механизм образования сверхпроводящего конденсата обусловлен двухквазичастичными переходами по примесному ансамблю: локализованный бозон на каком-либо примесном узле \rightarrow пара связанных квазичастиц $(-\mathbf{k}\mathbf{k})$ в примесной зоне распространенных состояний \rightarrow локализованный бозон на другом примесном узле и т. д. При этом синглетный и триплетные каналы спаривания квазичастиц являются взаимосвязанными (см. (17)). Отметим, что в этой модели возникают сверхпроводящие бозоны только с покоящимся центром инерции. Это обусловлено отсутствием трансляционной симметрии в легированном диэлектрике и является следствием усреднения по ансамблю атомов замещения.

Используя (9) и (10), перепишем (5) в виде

$$\beta = \beta \sum_{n=0,1} \int_{\mu}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \text{Im} \frac{(U/2) Z(\omega; A, \mu, (-1)^n \lambda; \beta)}{\left(\omega + \varepsilon_0 - 2\mu - S_2((-1)^n \lambda) \right) \left(\omega - \varepsilon_0 - S_1((-1)^n \lambda) \right) - |\beta|^2 U^2 Z^2 + i0^+}. \quad (22)$$

Существование решения $\beta \neq 0$ уравнения (22) определяется значениями комплексной функции Z (14) в точках полюсов или их областей аномальной синглетной функции Грина (9), лежащих вблизи уровня Ферми на полюсе $\text{Re } \omega \geq \mu$ в нижней части комплексной плоскости ($\text{Im } \omega < 0$). При этом функцию UZ можно рассматривать как внутриузельное взаимодействие между локализованными электронами, перенормированное спиновыми флуктуациями и гибридизацией в канале спаривания квазичастиц в распространенных состояниях. Если второй член в правой части (14) меньше 1, возникшей здесь от затравочной корреляционной энергии, то, как легко видеть, уравнение (22) будет иметь только тривиальное решение $\beta = 0$ и, соответственно, состояние системы — нормальное (либо металлическое, либо диэлектрическое). Решение $\beta \neq 0$ может существовать, если существует, по крайней мере, область полюсов функции Грина (9) вблизи уровня Ферми, в которой $\text{Re } Z < 0$. Это означало бы, что в этой области спектра корреляционная энергия UZ изменила свой затравочный положительный знак и стала соответствовать притяжению.

4. ДЕТАЛИ ВЫЧИСЛЕНИЙ

Для вычислений была выбрана модель симметричной валентной зоны с плотностью \mathbf{k} состояний на спин:

$$\rho^{(0)}(\varepsilon) = \begin{cases} \frac{N_t}{\pi D_b^2} [D_b^2 - \varepsilon^2]^{1/2}, & |\varepsilon| \leq D_b, \\ 0, & |\varepsilon| > D_b. \end{cases} \quad (23)$$

Здесь $2D_b$ — ширина зоны, N_t — полное число состояний в зоне. Легирование будет описываться в терминах относительной концентрации атомов замещения: $x = N_{im}/N_t$.

Полюсы функции Грина для локализованных и распространенных электронных состояний лежат как в области исходной зоны, так и в щели. Согласно (7)–(10) и (15)–(18), каждая из этих функций представляется в виде суммы двух членов. Различие между этими членами состоит в том, что спин-флуктуационный параметр λ содержится в них с различными знаками \pm . Поэтому электронная структура разбивается на пары зон, для которых замена $\lambda \rightarrow -\lambda$ преобразует одну зону в другую. Для таких пар мы будем использовать одинаковые обозначения, которые различаются только верхним индексом \pm .

Для того чтобы ясно показать влияние легирования на плотность распространенных состояний в

валентной зоне, введем изменение плотности состояний на атом замещения:

$$\Delta \rho_{ext}(\omega) = -\frac{1}{\pi x N_t} \sum_{\mathbf{k}} \text{Im} \left(G_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^{\sigma\sigma} - G_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^{(0)} \right). \quad (24)$$

В области исходной щели удобно нормировать плотность как локализованных, так и распространенных состояний на концентрацию атомов замещения:

$$\rho_{ext}(\omega) = -\frac{1}{\pi x N_t} \sum_{\mathbf{k}} \text{Im} G_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^{\sigma\sigma} \quad (25)$$

и

$$\rho_{loc}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{jj}^{\sigma\sigma}. \quad (26)$$

Расчет сверхпроводящего конденсата проводился следующим образом. Распределение по \mathbf{k} синглетных и триплетных бозонов имеет вид

$$\rho^{\sigma, \sigma_1}(\mathbf{k}) = \left| \int_{-\infty}^{\mu} \frac{d\omega}{\pi} \text{Im} F_{-\mathbf{k}\mathbf{k}}^{(+)\sigma, \sigma_1}(\omega) \right|^2. \quad (27)$$

Обозначим ветви полюсов аномальной функции Грина $F_{-\mathbf{k}\mathbf{k}}^{(+)\sigma, \sigma_1}$ как $\omega_{\mathbf{k}} = f_n(\varepsilon_{\mathbf{k}})$, n — номер ветви. Тогда, вводя обратную функцию $\varepsilon_{\mathbf{k}} = f_n^{-1}(\omega_{\mathbf{k}})$, из (27) получаем распределение по энергии сверхпроводящего конденсата, нормированное на концентрацию атомов замещения:

$$\rho_n^{\sigma, \sigma_1}(\omega_{\mathbf{k}}) = \frac{1}{x N_t} \rho^{\sigma, \sigma_1}(f_n^{-1}(\omega_{\mathbf{k}})) \rho^{(0)}(f_n^{-1}(\omega_{\mathbf{k}})) \frac{df_n^{-1}(\omega_{\mathbf{k}})}{d\omega_{\mathbf{k}}}, \quad (28)$$

где плотность состояний $\rho^{(0)}$ задается (23).

В полученных выражениях для функций Грина используется замена:

$$V_{\mathbf{k}l} = V_k \times N_t^{-1/2},$$

где V_k имеет размерность энергии. При вычислениях V_k полагается не зависящим от \mathbf{k} .

Таким образом, четыре константы с размерностью энергии $D_b, U, \varepsilon_0, V_k$ полностью определяют модель (1). В расчетах использовались значения констант D_b и U , которые согласуются с уже имеющимися экспериментальными данными (см. разд. 2). Значения двух оставшихся констант ε_0 и V_k выбирались так, чтобы 1) в парамагнитной диэлектрической фазе уровень Ферми был выше верха валентной зоны на $\simeq 0.4$ – 0.6 эВ, что соответствует положению известной спектральной особенности (MIR-зона) в легированных купратах

(см. [2] и ссылки в ней), 2) фазовый переход диэлектрик–сверхпроводник имел место при разумной концентрации примеси, $x \simeq 0.05$ [2].

Решение (1) зависит от четырех самосогласованных параметров A, μ, λ и β . Эти параметры находились из четырех интегральных уравнений (3)–(6). Для решения этих уравнений использовалась итерационная процедура. Учитывая тот факт, что точная одночастичная функция Грина должна удовлетворять теореме Левинсона, которая означает сохранение общего числа электронных состояний, точность наших расчетов с использованием полученных функций Грина может быть оценена следующим образом:

$$\gamma = \frac{1}{\pi N_{im}} \text{Im} \int d\omega \text{Tr} (G(\omega) - G^{(0)}(\omega)),$$

где $G^{(0)}$ — невозмущенная функция Грина, которая определяется первым и вторым членами в правой части гамильтониана (1). Точность расчета ухудшается при увеличении степени легирования x . Для представленных ниже результатов $\gamma \leq 0.7 \cdot 10^{-3}$.

5. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Представленная модель дает возможность одновременно описать фазовые переходы диэлектрик–сверхпроводник–металл в легированном соединении. Начнем с обсуждения нормальной парамагнитной фазы. В этом состоянии спиновые флуктуации представлены параметром λ , который приводит к упомянутому выше удвоению спектральных особенностей электронной структуры. Мы покажем, что спиновые флуктуации 1) приводят к диэлектрическому состоянию материала при низких x ; 2) вызывают фазовый переход диэлектрик–металл при некотором пороговом значении степени легирования.

5.1. Переход диэлектрик–металл

Электронная структура парамагнитного диэлектрического состояния при $x = 0.02$ показана на рис. 1. Кривая $E_b^- + E_b^+$ представляет изменение плотности распространенных состояний в валентной зоне. Общим для различных значений параметров модели является то, что индуцированное легированием изменение полного числа зонных состояний является отрицательным. Для представленного результата это изменение равно -0.2531 на спин на атом замещения. Этот дефицит состояний в точности компенсируется распространенными состояниями, которые образуются в области диэлектрической

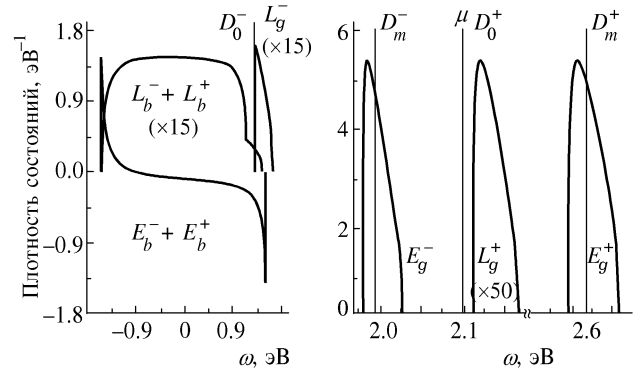


Рис. 1. Электронная структура диэлектрического состояния при $x = 0.02$. Энергия Ферми $\mu = 2.1$ эВ и совпадает с положением пика D_0^+ . Кривая $E_b^- + E_b^+$ представляет изменение плотности состояний в исходной зоне. Параметры: $D_b = 1.5$ эВ, $\varepsilon_0 = D_b - 0.4$ эВ, $V_k = 1.5$ эВ и $U = 1$ эВ

щели. Спиновые флуктуации приводят к расщеплению этих состояний в две узкие зоны, E_g^- и E_g^+ , показанные на рис. 1.

Важным обстоятельством является то, что максимальная плотность распространенных состояний в каждой из зон E_g^\pm ,

$$x N_t \rho_{g,ext}^{max} = \frac{N_t}{4.712 \text{ эВ}}, \quad (29)$$

равна половине максимальной плотности состояний в валентной зоне, в то время как полное число состояний в этих зонах является малым по сравнению с концентрацией атомов замещения $x N_t$. В диэлектрическом состоянии полностью заполненная зона E_g^- расположена ниже энергии Ферми $\mu = 2.1$ эВ, а зона E_g^+ является незаполненной.

В использованных обозначениях плотность локализованных состояний нормирована на 1. Кривая $L_b^- + L_b^+$ на рис. 1 соответствует плотности локализованных состояний в области исходной зоны. Полное число этих состояний равно 0.2414 на спин на атом замещения. Эта зона обусловлена гибридизацией, и она возникает при решении гамильтониана Андерсона даже с единственным примесным атомом [29].

Кроме того, энергетическое распределение локализованных состояний содержит четыре δ -функции, которые соответствуют простым полюсам $G_{jj}^{\sigma\sigma}(\omega)$ (7). Из них два полюса $\omega_0^\pm = \varepsilon_0 + U(A \pm \lambda)$, а соответствующие им δ -пики обозначены на рис. 1 как D_0^\pm . В диэлектрическом состоянии положение частично заполненного пика D_0^+ в щели всегда совпадает с энергией Ферми. Число состояний в каждом из этих пиков $x/(1 + 2x)$ на спин на атом замещения. С уче

том нормировки плотности на 1 эти пики являются низкоконтрационными при $x \ll 1$.

Два других простых полюса соответствуют высококонцентрационным δ -пикам, которые обозначены как D_m^\pm . Число локализованных состояний на спин на атом замещения равно 0.3052 для пика D_m^- и 0.3868 для пика D_m^+ . Общей особенностью модели для различных значений параметров является то, что пики D_m^\pm располагаются внутри зон распространённых состояний E_g^\pm , как показано на рис. 1. Электронная структура включает также две зоны локализованных состояний L_g^\pm . Число состояний в этих зонах обычно является относительно малым ($\approx 10^{-2}$ в принятых единицах).

Отметим, что в области щели все зоны локализованных состояний с верхним индексом «+» расположены выше всех зон локализованных состояний с верхним индексом «-» (см. рис. 1). Тогда при помощи выражений для функции Грина (7) и (8), а также определений (3) и (4) можно показать, что в диэлектрическом состоянии существует следующее соотношение между фактором заполнения A и спин-флуктуационным параметром λ :

$$A + \lambda = 1. \tag{30}$$

Для электронной структуры, приведенной на рис. 1, $A = 0.5904$ и $\lambda = 0.4096$. Следовательно, спиновыми флуктуациями в модели (1) пренебрегать нельзя.

Изменение электронной структуры в области валентной зоны при увеличении легирования x является качественно схожим с результатом, представленным на рис. 1, и в дальнейшем оно не будет показано.

Для нормальной фазы поведение электронной структуры в области исходной щели с ростом x обуславливает переход диэлектрик-металл в легированном соединении. В диэлектрическом состоянии уровень Ферми совпадает с положением пика D_0^+ при $\omega_0^+ = \varepsilon_0 + U(A + \lambda)$. Из-за соотношения (30) значение ω_0^+ не меняется с ростом x . Однако положение зоны распространённых состояний E_g^- зависит от x , и эта зона смещается с ростом x в сторону частично заполненного пика локализованных состояний D_0^+ . На рисунке 2 представлена рассчитанная электронная структура вблизи уровня Ферми при $x = 0.0524$. Видно, что верх зоны E_g^- достиг пика D_0^+ . Здесь соотношение (30) еще выполняется: $\lambda = 0.4135$ и $A = 0.5865$. Число локализованных состояний на спин на атом замещения равно 0.2755 для пика D_m^- и 0.3572 для D_m^+ . Число распространённых состояний на спин на атом замещения равно 0.1484 для зоны E_g^- и 0.0865 для E_g^+ .

При $x = 0.085$ пик D_0^+ расположен ниже зоны E_g^- , а уровень Ферми теперь совпадает с положени-

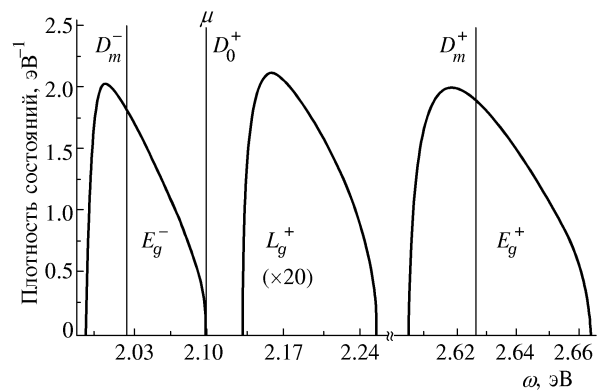


Рис. 2. Плотность состояний в исходной диэлектрической щели при $x = 0.0524$. Этот уровень легирования находится вблизи границы диэлектрик-металл $x_{thr,1}$ на фазовой диаграмме нормальных состояний. Параметры те же, что для рис. 1

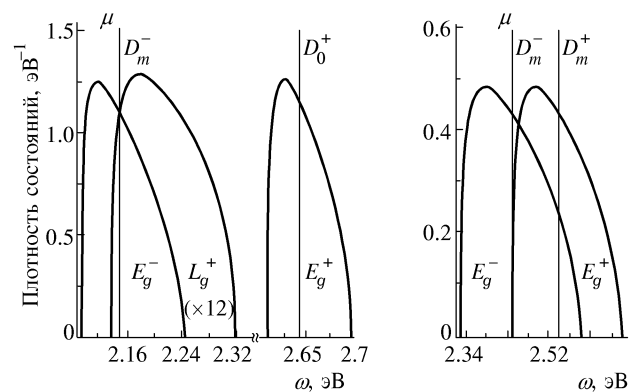


Рис. 3. Электронная структура металлического состояния в области исходной диэлектрической щели при различных степенях легирования x : а — $x = 0.085$; б — $x = 0.22$. Параметры те же, что для рис. 1

ем высококонцентрационного пика локализованных состояний D_m^- (рис. 3а). Этот частично заполненный пик расположен в двух перекрывающихся зонах, одна из которых — зона распространённых состояний E_g^- , а другая — зона локализованных состояний L_g^+ . Таким образом, представленная здесь электронная структура в области исходной диэлектрической щели соответствует состоянию плохого металла, в котором распространённые и локализованные состояния сосуществуют вблизи уровня Ферми. Более того, полное число локализованных состояний D_m^- в 2.12 раз больше числа состояний в зоне E_g^- , которое равно 0.1265 на спин на атом замещения. Число состояний в зоне L_g^+ относительно мало, 0.0148 в принятых единицах. Было получено, что $A = 0.6494$ и

$\lambda = 0.3368$. Таким образом, в металлическом состоянии (30) не выполняется.

При дальнейшем увеличении x зона L_g^+ также перемещается под уровень Ферми. Тогда из (4) и (7), (8) мы получаем следующее выражение для спин-флуктуационного параметра λ :

$$\lambda = N_m^+ - N_m^-(1 - A_m^-), \quad (31)$$

где N_m^+ и N_m^- — число состояний на спин на атом замещения соответственно в зонах D_m^+ and D_m^- ; A_m^- — фактор заполнения пика D_m^- . Все зоны локализованных состояний, за исключением D_m^+ и D_m^- , лежат ниже уровня Ферми, и их полное число состояний увеличивается с ростом x . Тогда вклад от этих зон в фактор заполнения A также увеличивается и, соответственно, величина A_m уменьшается при увеличении x . Поскольку значения N_m^+ и N_m^- являются близкими, $\lambda \rightarrow 0$ в металлической фазе с ростом x . Как следствие, имеется тенденция к слиянию любой пары зон, обозначения которых различаются только верхним индексом \pm , а электронная структура имеет своей асимптотикой решение (1) в приближении Хартри–Фока ($\lambda = 0$). Эта тенденция к модификации электронной структуры представлена на рис. 3б. При $x = 0.22$ получаем $\lambda = 0.07115$ и $A = 0.6254$. Обе зоны распространенных состояний E_g^\pm перекрываются друг с другом и являются частично заполненными. Пик локализованных состояний D_m^+ еще не заполнен, но его положение становится ближе к D_m^- . Число локализованных состояний на спин на атом замещения равно 0.2103 для пика D_m^- и 0.2229 для D_m^+ . Здесь заполнение $A_m^- = 0.2785$, тогда как при $x = 0.085$ имеем $A_m^- = 0.9743$.

Следует отметить, что энергия Ферми слабо зависит от x . Согласно рис. 1–3 μ изменяется в пределах $\simeq 10\%$, тогда как легирование меняется в 11 раз. Из рис. 1–3 также следует, что, хотя ширина зон E_g^\pm увеличивается с ростом x , максимальная плотность состояний в этих зонах не зависит от легирования и дается (29).

5.2. Перенормировка внутриузельного межэлектронного взаимодействия в канале спаривания квазичастиц в распространенных состояниях

Выше показано, что возможность нетривиального решения уравнения (22) для спин-флуктуационного параметра $\beta \neq 0$ определяется функцией $Z(\omega)$ (14) на полюсы $\omega \geq \mu$. Если существует такое решение, то легированный материал является сверхпроводником. Величину UZ можно рассматривать как эффективное внутриузельное взаимодействие. Поскольку другой

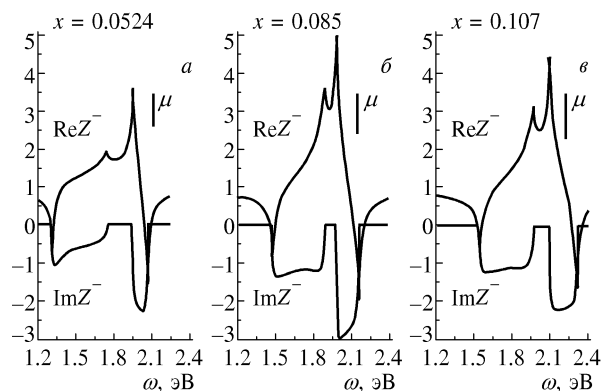


Рис. 4. Зависимость функции Z , представляющей перенормировку внутриузельного межэлектронного взаимодействия в канале спаривания квазичастиц в распространенных состояниях, от энергии ω при различных степенях легирования x : а — $x = 0.0524$; б — $x = 0.085$; в — $x = 0.107$. Параметры те же, что для рис. 1

спин-флуктуационный параметр λ приводит к удвоению спектральных особенностей электронной структуры, решение (22) зависит от двух функций $Z(\omega; A, \mu, \pm\lambda, \beta)$. Однако из (14) легко показать, что $Z^+(\mu + \omega; A, \mu, \lambda, \beta) = Z^-(\mu - \omega; A, \mu, -\lambda, \beta)$. Поэтому далее мы приведем результаты расчета только для одной из них.

Мы показали, что в нормальной фазе вблизи уровня Ферми всегда имеется плотность локализованных одночастичных состояний, которая определяется нормальной функцией Грина (7), и, следовательно, существует область полюсов аномальной функции Грина (9) для локализованных бозонов. Поэтому решение $\beta \neq 0$ может существовать, если существует конечная область энергий вблизи уровня Ферми, в которой $\text{Re } Z^\pm < 0$. Ниже мы приведем зависимость $Z^-(\omega)$ для нормальных состояний ($\beta = 0$) при различных x . Фактически в сверхпроводящем состоянии величина β много меньше A и λ , и она не оказывает сколь-нибудь существенного влияния на $Z(\omega)$.

На рисунке 4а показаны зависимости $\text{Re } Z^-(\omega)$ и $\text{Im } Z^-(\omega)$ при $x = 0.0524$ близком к пороговому уровню легирования $x_{thr,1}$ для перехода диэлектрик–металл (см. рис. 2). Здесь $\mu = 2.1$ эВ и $\text{Re } Z^-(\omega = \mu) = 0.0771$, $\text{Im } Z^-(\omega = \mu) = 0$. Видно, что имеется область, в которой $\text{Re } Z^- < 0$. Ширина этой области 49 мэВ, но она расположена ниже уровня Ферми. Также ниже μ находится область, где $\text{Im } Z^- < 0$. При меньших x эти области сужаются и смещаются влево от $\mu = 2.1$ эВ. Мы установили, что при $x < 0.0524$ имеется только тривиальное решение (22), а нормальное состояние легиро-

ванного соединения является диэлектрическим (см. рис. 1, 2).

С ростом x область $\text{Re } Z^- < 0$ смещается вправо относительно μ . При $x = 0.085$ зависимость $Z^-(\omega)$ также представлена на рис. 4б. Здесь $\mu = 2.1513$ эВ расположена в области отрицательных значений $\text{Re } Z^-$ и $\text{Im } Z^-$, причем $\text{Re } Z^-(\omega = \mu) = -1.2675$, $\text{Im } Z^-(\omega = \mu) = -1.8937$. Ширина области, в которой $\text{Re } Z^- < 0$, равна 84 мэВ. Здесь следует обратить внимание еще на одну область, $\text{Re } Z^- < 0$, расположенную ниже 1.5 эВ. Эта область не вносит вклада в интеграл от выражения, содержащего Z^- в правой части (22). Однако вследствие соотношения между Z^\pm у функции $\text{Re } Z^+$, наряду с областью отрицательных $\text{Re } Z^+$ вблизи μ , возникает вторая область, где $\text{Re } Z^+ < 0$, расположенная вблизи пика локализованных состояний D_m^+ . Поэтому при данном x можно ожидать существования по крайней мере трех положительных вкладов в правую часть (22), один из которых связан с Z^- , а остальные два — с Z^+ . В предположении $\beta = 0$ легированный материал находился бы в металлическом состоянии, электронная структура которого приведена на рис. 3. Однако при этой степени легирования имеется решение $\beta \neq 0$ уравнения (22) и, соответственно, легированное соединение является сверхпроводником.

При дальнейшем увеличении x эта область проходит через поверхность Ферми и при $x = 0.107$ расположена правее $\mu = 2.2173$ эВ (рис. 4в). Здесь $\text{Re } Z^-(\omega = \mu) = 1.0671$ и $\text{Im } Z^-(\omega = \mu) = -2.1392$. При $x > 0.107$ мы получили только тривиальное решение (22). Соответственно, нормальное состояние легированного соединения является металлическим (см. рис. 3).

Таким образом, сверхпроводимость может существовать в ограниченной области легирования. Сопоставляя результаты, представленные на рис. 2 и рис. 4, можно заключить, что начало возникновения сверхпроводимости связано с первым пороговым уровнем легирования $x_{thr,1}$. Для использованных параметров модели $x_{thr,1} \simeq 0.0524$. В приближении нормальной фазы вблизи $x_{thr,1}$ имеет место переход диэлектрик—металл и при этом же легировании область с $\text{Re } Z^- < 0$ подходит к μ . Нам не удалось установить, происходит ли переход из диэлектрического состояния в сверхпроводящее сразу или существует промежуточная металлическая фаза. Ниже будет приведено решение для сверхпроводящего состояния при $x = 0.085$, т.е. достаточно далеко от порогового значения. Мы показали, что модель характеризуется также вторым пороговым уровнем легирования $x_{thr,2}$, при котором происходит переход сверхпроводник—металл.

Отметим, что $x_{thr,1}$ увеличивается с ростом D_b . При ширине исходной зоны $2D_b = 6$ эВ и тех же значениях остальных параметров модели получили $x_{thr,1} = 0.134$. Поэтому сверхпроводящее состояние, индуцированное спиновыми флуктуациями, реально может возникать в легированных диэлектриках с исходно узкими разрешенными зонами.

5.3. Сверхпроводящее состояние

В предположении $\beta = 0$ нормальное состояние легированного соединения является металлическим при $x = 0.085$ (см. рис. 3). Однако уравнение (22) имеет решение $|\beta| = 0.00395$. Отметим, что здесь не использовалось какое-либо обрезание интеграла в правой части (22) и интегрирование проводилось вдоль всей полуоси $\omega \geq \mu$.

В сверхпроводящем состоянии получены следующие изменения параметров $\Delta A = -2.7 \cdot 10^{-4}$, $\Delta \lambda = 3.2 \cdot 10^{-4}$ и $\Delta \mu = -0.28$ мэВ по отношению к их значениям в нормальном состоянии. Электронная структура одночастичных состояний показана на рис. 5. Кривые E_b^\pm и L_b^\pm представляют здесь фрагмент распределения распространенных и локализованных состояний в области исходной зоны вблизи ее границы со щелью при 1.5 эВ. Сравнивая данный результат с показанным на рис. 3, можно заметить, что в сверхпроводящем состоянии появились две новые зоны распространенных состояний E_s^\pm и два новых пика локализованных состояний D_s^\pm в области щели. Число состояний на спин на атом замещения равно $0.7377 \cdot 10^{-5}$ для зоны E_s^- и $0.4497 \cdot 10^{-5}$ для зоны E_s^+ . Число состояний в пиках D_s^\pm одинаково и равно $1.755 \cdot 10^{-6}$. Отметим, что у высококонцентрационных пиков локализованных состояний D_m^\pm появились малые, но конечные ши-

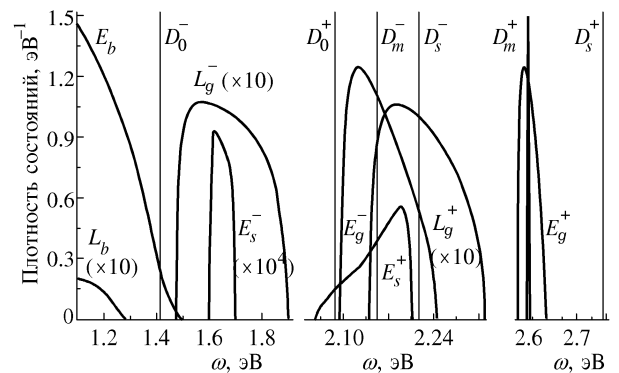


Рис. 5. Плотность одночастичных электронных состояний в сверхпроводящем состоянии легированного соединения при $x = 0.085$. Параметры те же, что для рис. 1

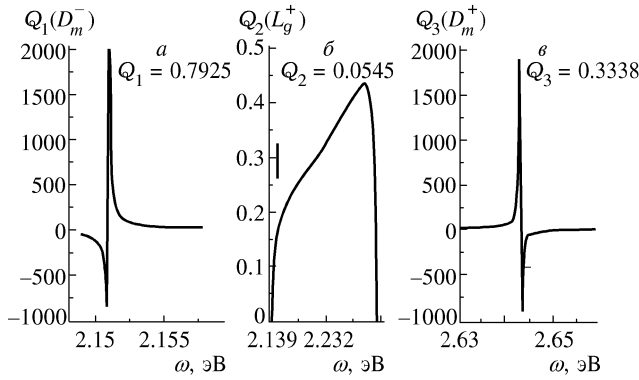


Рис. 6. Решение $|\beta| = 0.00395$ уравнения (22) при $x = 0.085$: *a* — вклад от зоны D_m^- ; *б* — вклад от L_g^+ ; *в* — вклад от D_m^+ . Вклады от D_s^\pm одинаковые и равны -0.0904 . Соответствующие зоны показаны на рис. 5

рины. Вблизи уровня Ферми имеются шесть перекрывающихся зон. Две из них — зоны распространённых состояний E_g^- и E_s^+ , а остальные — зоны локализованных состояний.

Теперь обсудим решение уравнения (22). В это уравнение входит аномальная функция Грина $F_{jj}^{(+)\sigma, -\sigma}$. Ее полюсы совпадают с полюсами нормальной функции Грина $G_{jj}^{(+)\sigma\sigma}$, как это можно видеть из (7), (8) и (9), (10). Следовательно, для этого решения с $\beta \neq 0$ мы имеем

$$1 = \sum_m Q_m(A, \mu, \lambda; \beta), \quad (32)$$

где Q_m — вклад в интеграл в правой части (22) от m -й зоны одночастичных локализованных состояний, расположенной не ниже уровня Ферми $\mu = 2.1511$ эВ.

Из рисунка 5 следует, что таких зон (или областей интегрирования в (22)) пять. Три из них — это зоны D_m^- , D_m^+ и L_g^+ , которые возникают в решении для нормальной фазы и которые также показаны на рис. 3а. Вклад в (32) от пика D_m^- , который совпадает с уровнем Ферми μ и теперь имеет конечную ширину, определяется функцией Z^- . Как показано на рис. 4, $\text{Re } Z^- < 0$ вблизи энергии Ферми. Здесь и $\text{Im } Z^- < 0$, что связано с затуханием квазичастиц. Подынтегральная функция для этой зоны показана на рис. 6а и ее вклад равен $Q_1(D_m^-) = 0.7925$ при $|\beta| = 0.00395$.

Вклад в (32) от D_m^+ и L_g^+ определяется значениями функции Z^+ в областях этих зон. Учитывая соотношение между Z^+ и Z^- (рис. 4), легко понять, что Z^+ имеет две области, где $\text{Re } Z^+ < 0$. Первая — вблизи энергии Ферми, где расположена

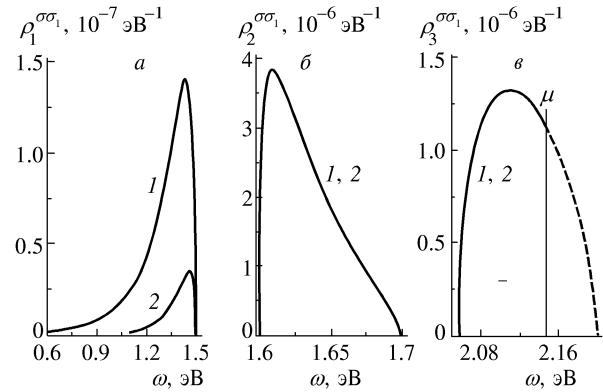


Рис. 7. Энергетическое распределение распространённых бозонов в области исходной зоны диэлектрика (*a*), в области зоны E_s^- (*б*) и в области зоны E_s^+ (*в*). Соответствующие зоны показаны на рис. 5: кривая 1 — спин 0; кривая 2 — спин 1

зона L_g^+ . Подынтегральная функция для этой зоны показана на рис. 6б и ее вклад относительно мал, $Q_2(L_g^+) = 0.0545$ при $\beta = 0.00395$. Это связано с тем, что амплитуда полюсов для одночастичных состояний в этой области также является малой, как показано на рис. 3а и 5. Вторая область с $\text{Re } Z^+ < 0$ расположена вблизи пика D_m^+ и соответствует области $\text{Re } Z^- < 0$, расположенной ниже 1.5 эВ (рис. 4). Для этой зоны подынтегральная функция показана на рис. 6в и ее вклад равен $Q_3(D_m^+) = 0.3338$ при $\beta = 0.00395$.

Две оставшиеся области интегрирования в (22) связаны с двумя появившимися новыми пиками локализованных состояний D_s^\pm в области щели. Вклады от них одинаковы и отрицательны: $Q_{4,5}(D_s^\pm) = -0.0904$.

Таким образом, мы получили решение (32), и, следовательно, легированное соединение является сверхпроводником. Энергетические распределения распространённых бозонов в синглетном и триплетном каналах спаривания рассчитывались согласно (28). Результаты приведены на рис. 7. Неожиданным является то, что имеется распределение бозонов в области исходной валентной зоны вдали от поверхности Ферми (рис. 7а). Здесь число пар на спин на атом замещения относительно мало и равно $3.46 \cdot 10^{-8}$ в синглетном канале и $5.57 \cdot 10^{-9}$ в триплетном канале.

В области исходной щели имеются две области распределения конденсата. Первая область находится также вдали от μ , и соответствующее распределение сверхпроводящих бозонов совпадает с зоной одночастичных распространённых состояний E_s^- (рис. 7б). Здесь число пар на спин на атом замещения в синглетном и триплетном каналах оди-

наково и равно $1.821 \cdot 10^{-7}$. Вторая область в щели находится вблизи μ , и ее положение совпадает с зоной одночастичных распространённых состояний E_s^+ (рис. 7б). Энергетическое распределение пар в этой области обрезается энергией Ферми. Число пар на спин на атом замещения в синглетном и триплетном каналах одинаково и равно $1.053 \cdot 10^{-7}$.

Эта модель сверхпроводимости характеризуется также и числом локализованных бозонов со спином 0 и 1. С учетом (9), (10) это число на спин на атом замещения есть:

$$N_{LB} = \sum_{\sigma, \sigma_1} \left| \int_{-\infty}^{\mu} \frac{d\omega}{\pi} \text{Im} F_{jj}^{(+)\sigma\sigma_1}(\omega) \right|^2.$$

При $\beta = 0.00395$ получаем $N_{LB} = 4.50 \cdot 10^{-5}$.

Теперь получаем следующее соотношение между концентрациями квазичастиц в сверхпроводящем состоянии. Суммируя по трем зонам, показанным на рис. 7, получаем, что полное число пар на атом замещения равно $0.64 \cdot 10^{-6}$ в синглетном канале спаривания и $0.58 \cdot 10^{-6}$ в триплетном канале. Следовательно, концентрация распространённых бозонов много меньше концентрации локализованных бозонов. Последняя, в свою очередь, много меньше концентрации заполненных одночастичных состояний вблизи энергии Ферми. Полное число одночастичных распространённых состояний вблизи энергии Ферми в значительной степени определяется зоной E_g^- и равно 0.253 на атом замещения. Эта величина в 2.12 раз меньше полного числа локализованных состояний, которое в основном связано с пиком D_m^- .

В заключение отметим следующее. Фазовые диаграммы и свойства в нормальном состоянии купратов и соединений $R_{1-x}M_xTiO_3$, $R_{1-x}M_xVO_3$ (R^{3+} — редкоземельный и M^{2+} — щелочно-земельный элемент) похожи с той разницей, что последние не являются сверхпроводниками. Было установлено [34, 35], что введение примеси замещения в соединения на основе Ti и V приводит к возникновению спектральной плотности в области исходной диэлектрической щели, и, следовательно появляются трудности в объяснении полученных результатов на основе модели Хаббарда [34, 35]. Развиваемый нами подход позволяет описать фазовый переход диэлектрик-металл в том случае, если уравнение (5) имеет только тривиальное решение $\beta = 0$.

Механизм образования сверхпроводящего состояния является электронным и связан со спиновыми флуктуациями в легированном соединении. Однако в этой модели влияние электрон-фононного взаимодействия на свойства соединений должно быть очень существенным. Например, это взаимодействие может привести к образованию псевдоще-

ли в спектре распространённых состояний около энергии μ в нормальном состоянии, если в (1) ввести взаимодействие с фононами в виде

$$H_{el-ph} = \sum_{\mathbf{q}j\sigma} \kappa_{\mathbf{q}j} \hat{n}_{j\sigma} \phi_{\mathbf{q}},$$

где $\phi_{\mathbf{q}}$ — полевого оператора для фононов. Связано это с тем, что в металлическом состоянии на поверхности Ферми имеется высокая плотность локализованных электронных состояний D_m^- . Это взаимодействие приведет к дефазировке узельных электронов. Тогда локализованные состояния D_m^- будут характеризоваться затуханием, а пик будет уширен. За счет гибридизации возникнет соответствующая мнимая часть и у энергий электронов в зоне распространённых состояний E_g^- . Это приведет к провалу плотности состояний в зоне E_g^- вблизи μ , глубина которого будет определяться величиной взаимодействия $\kappa_{\mathbf{q}j}$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Г. М. Элиашберг, в кн. *Физические свойства высокотемпературных сверхпроводников*, под ред. Д. М. Гинзберга, Мир, Москва (1990), с. 505.
2. E. Dagotto, Rev. Mod. Phys. **66**, 673 (1994).
3. N. Bulut and D. J. Scalapino, Phys. Rev. B **50**, 16078 (1994).
4. Q. Chen, I. Kosztin, B. Janko, and K. Levin, Phys. Rev. Lett. **81**, 4708 (1998).
5. Ю. А. Изюмов, УФН **161**, 2 (1991); УФН **165**, 403 (1995).
6. N. M. Plakida, *High T_c Superconductivity*, Springer, Berlin (1995).
7. P. Monthoux and D. Pines, Phys. Rev. B **49**, 4261 (1994).
8. A. Chubukov and D. K. Morr, Phys. Rev. Lett. **81**, 4716 (1998).
9. T. J. Smith, K. H. Andersen, U. Beck, H. Capellmann, R. K. Kremer, K.-U. Neumann, O. Scharpf, A. Simon, and K. R. A. Ziebeck, J. Magn. Magn. Mater. **177-181**, 543 (1998).
10. H. A. Blackstead, J. D. Dow, and D. B. Pulling, Physica C **265**, 143 (1996).
11. M. Sigrist and T. M. Rice, Rev. Mod. Phys. **64**, 503 (1995).
12. D. J. Scalapino and S. R. White, Phys. Rev. B **58**, 8222 (1998).

13. V. J. Emery and S. A. Kivelson, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3253 (1995).
14. Q. Si, *J. Phys.: Cond. Matt.* **8**, 9953 (1996).
15. A. S. Alexandrov, *Physica C* **274**, 237 (1997).
16. М. В. Садовский, *СФХТ* **3**, 337 (1995).
17. P. P. Edwards, N. F. Mott, and A. S. Alexandrov, *J. Supercond.* **11**, 151 (1998).
18. H. A. Blackstead, J. D. Dow, and D. B. Pulling, *Physica C* **265**, 143 (1996).
19. А. И. Агафонов, Э. А. Маныкин, *Письма в ЖЭТФ* **65**, 419 (1997).
20. М. И. Иванов, В. М. Локтев, Ю. Г. Погорелов, *ФНТ* **24**, 615 (1998).
21. N. F. Mott, *Metal-Insulator Transitions*, Taylor and Francis, London (1990).
22. P. P. Edwards, T. V. Ramakrishnan, and C. N. R. Rao, *J. Phys. Chem.* **99**, 5228 (1995).
23. C. Y. Chen, R. J. Birgeneau, M. A. Kastner, N. W. Preyer, and T. Thio, *Phys. Rev. B* **43**, 392 (1991).
24. G. A. Thomas, in *High Temperature Superconductivity*, ed. by D. P. Tunstall and W. Barford, Adam Hilger, Bristol (1991) p. 169.
25. Z.-X. Shen and D. S. Dessau, *Phys. Rep.* **253**, 1 (1995).
26. C. Quitmann, J. Ma, R. J. Kelly et al., *Physica C* **235-24**, 1019 (1994).
27. A. I. Agafonov and E. A. Manykin, *Physica B* **259-261**, 458 (1999).
28. T. Timusk, S. L. Herr, K. Kamaras et al., *Phys. Rev. B* **38**, 6683 (1988).
29. F. D. M. Haldane and P. W. Anderson, *Phys. Rev. B* **13**, 2553 (1976).
30. А. И. Агафонов and Э. А. Маныкин, *Phys. Rev. B* **52**, 14571 (1995); А. И. Агафонов, Э. А. Маныкин, *ЖЭТФ* **109**, 1405 (1996).
31. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, Физматгиз, Москва (1962).
32. А. И. Агафонов, Э. А. Маныкин, *ЖЭТФ* **114**, 1765 (1998).
33. F. Yonezawa and T. Matsubara, *Prog. Theor. Phys.* **35**, 357 (1966).
34. S. W. Robey, L. T. Hugdon, C. Eylem, and B. Eichorn, *Phys. Rev. B* **48**, 562 (1993).
35. T. Katsufuji, Y. Okimoto, and Y. Tokura, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3497 (1995); M. Kasuya, Y. Tokura, T. Arima, H. Eisaki, and S. Uchida, *Phys. Rev. B* **47**, 6197 (1993); Y. Taguchi, Y. Tokura, T. Arima, and F. Inaba, *Phys. Rev. B* **48**, 511 (1993).