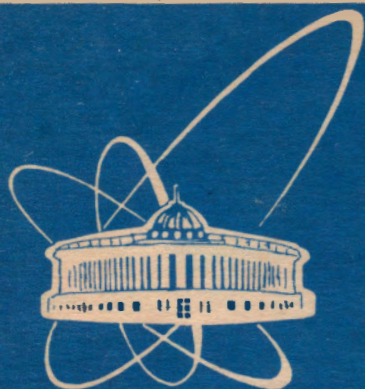


95-190



ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

95-190

P17-95-190

А.Ю.Черный*

О ВЛИЯНИИ СТРУКТУРНОГО ФАЗОВОГО
ПЕРЕХОДА НА СВЕРХПРОВОДЯЩУЮ ЩЕЛЬ
В ЭЛЕКТРОННОМ СПЕКТРЕ

Направлено в журнал
«Сверхпроводимость: физика, химия, техника»

*Постоянный адрес: 249020, Россия, г.Обнинск, Калужская обл.,
Студгородок, Институт атомной энергетики
E-mail: krasavin@thsun1.jinr.dubna.su

1995

1. Введение

На сегодняшний день предложено более ста тридцати различных механизмов высокотемпературной сверхпроводимости, и актуальной задачей становится выявление качественных физических эффектов, предсказываемых в рамках того или иного механизма, для последующей возможной экспериментальной проверки.

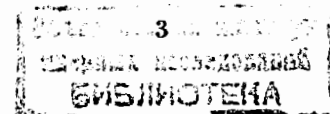
В рамках ангармонической модели для высокотемпературного сверхпроводника (ВТСП), предложенной Н.М.Плакидой с сотрудниками [1], нами изучался изотопический эффект (ИЭ) [2,3]. В этих работах удалось объяснить не только аномально высокие значения фактора изотопического эффекта для кислорода $\alpha > \frac{1}{2}$ ($\alpha = -\frac{\partial \ln T_c}{\partial \ln M}$), но и резкий скачок ИЭ, наблюдаемый в соединениях $La_{2-x}M_xCuO_4$ ($M=Ba, Sr$) на границе структурного фазового перехода (СФП).

В связи с этим представляется актуальным изучение влияния СФП на сверхпроводящую щель в электронном спектре. Экспериментально энергетическая щель квазичастичного спектра возбудений может быть определена несколькими способами: изучением поглощения инфракрасных электромагнитных волн в тонких плёнках, из экспериментов по релаксации ядерного спина, из экспериментов по туннелированию электронов и др. Соответствующие опытные наблюдения показывают сильную анизотропию энергетической щели (т.е. зависимость щели Δ_0 от импульса на поверхности Ферми), а также эффекты сильного затухания квазичастиц. Эксперименты по туннелированию в ВТСП сталкиваются со значительными трудностями из-за сильной анизотропии, малой длины когерентности (10-30Å) и, соответственно, высоких значений верхнего критического магнитного поля. По этой причине экспериментальные данные довольно противоречивы и дают значительный разброс значений щели (см. обзор [4]).

Не исключена возможность нетрадиционного спаривания электронов, при котором симметрия щели ниже симметрии точечной группы кристалла, так что на поверхности Ферми параметр порядка для сверхпроводящего перехода может обращаться в нуль в некоторых узловых точках. К такому же эффекту приводит d-волновое синглетное спаривание (полный спин пары равен нулю), а также p-волновое триплетное спаривание (спин пары равен 1). Измерение сдвига Найта в соединении $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ [21] указывает на синглетный характер куперовских пар. Существование d-волнового синглетного спаривания представляется вполне возможным, хотя однозначные экспериментальные доказательства этого на сегодняшний день отсутствуют. В этой работе мы будем использовать традиционный s-симметричный подход с синглетным спариванием.

Последовательный учёт анизотропии в уравнениях сверхпроводимости является трудной и до сих пор не решённой задачей. Традиционный подход, основанный на уравнениях Элиашберга, предполагает изотропность энергетической щели. Как и в предыдущих работах [2,3], мы будем следовать этому подходу. В этой работе исследуется влияние СФП на электронный спектр и, в частности, на энергетическую щель в этом спектре, при помощи численного решения уравнений сверхпроводимости. Наличие СФП приводит к температурной зависимости электрон-фононного спектра $\alpha^2 F(\omega)$, что приводит к отличному от случая гармонических фононов поведению сверхпроводящей щели $\Delta(\omega)$, и, соответственно, других величин: постоянной электрон-фононной связи λ , относительной плотности квазичастичных состояний $N(\omega)/N(0)$ и т.д.

В разделе 2 вводится гамильтониан системы и описывается приближение самосогласованных фононов для расчёта динамики решётки. В



следующем разделе обсуждаются уравнения Элиашберга и метод расчёта электронного спектра. Наконец в четвёртом разделе приводятся результаты и даётся их краткое обсуждение. В приложении излагается простой метод определения температуры сверхпроводящего перехода из линеаризованных уравнений Элиашберга.

2. Описание модели. Приближение самосогласованных фононов.

Для первоначально открытых соединений $\text{La}_{2-x}(\text{Ba}, \text{Sr})_x\text{CuO}_4$ характерно наличие нескольких СФП на экспериментальной фазовой $T-x$ диаграмме и связанных с ними мягких оптических фононных мод. Подробное обсуждение СФП и мягких мод, отвечающих за эти переходы в допированном купрате лантана, имеется в работе [5], а микроскопическое описание СФП - в работах [6], [3]. Поэтому мы сразу будем описывать ангармонические колебания решётки с помощью гамильтониана с локальной нормальной координатой (ЛНК), соответствующей колебаниям октаэдров CuO_6 вокруг оси $(-1, 1, 0)$ (или вокруг $(1, 1, 0)$):

$$\hat{H}_1 = \sum_1 \frac{M}{2} \dot{X}_1^2 + \frac{1}{2} \sum_{1,1'} \Phi(1-1') X_1 X_{1'} + \frac{B}{4} \sum_1 X_1^4, \quad (1)$$

где M - эффективная масса ЛНК, $\Phi(1-1')$ - силовая гармоническая матрица второго порядка, B - постоянная локального ангармонического взаимодействия.

В работе [3] решёточный гамильтониан (1) использовался нами для описания конкретного СФП - из так называемой высокотемпературной тетрагональной (пространственная группа D_{4h}^{17}) в низкотемпературную орторомбическую фазу (D_{2h}^{18}). При этом ниже температуры СФП происходит "замораживание" мягкой моды колебаний и соответствующий этой моде статический поворот октаэдров вокруг оси $(-1, 1, 0)$ (или вокруг $(1, 1, 0)$). Следует подчеркнуть, что для нас существенно лишь, чтобы СФП являлся фазовым переходом второго рода с обращением в нуль об-

ратной статической восприимчивости ангармонических колебаний при температуре СФП. Поэтому конкретный тип СФП для нас не важен, а гамильтониан (1) является весьма общим при описании различных СФП (см., например, [24]).

Рассматриваемая модель СФП не поддаётся точному решению. Потому необходимо использовать дальнейшие упрощения, например, рассмотренное в [3] двухуровневое приближение и соответствующий этому приближению псевдоспиновый гамильтониан. Здесь, однако, как и в работе [2], мы используем метод самосогласованных фононов [7], который даёт для температурной зависимости восприимчивости ангармонических колебаний качественно те же результаты, что и двухуровневое приближение, но проще с точки зрения вычислений.

При исследовании динамики решётки мы пренебрегаем электрон-фононным взаимодействием, считая, что влияние его на СФП в исследуемом случае несущественно. Это приближение возможно благодаря тому, что сам СФП обусловлен ангармоническим ион-ионным потенциалом, а не электрон-фононным взаимодействием (см. обсуждение в [3]).

В соответствии с методом самосогласованных фононов [7] вводим псевдогармоническую матрицу, учитывая ангармонические члены в (1) с помощью перенормировки матрицы гармонического взаимодействия:

$$\tilde{\Phi}(1-1') = 2 \frac{\delta \langle U \rangle}{\delta X_1 X_{1'}} = \Phi(1-1') + 3B \delta_{1,1'} \langle X_1^2 \rangle, \quad (2)$$

где $\langle \dots \rangle$ обозначает равновесное среднее по гамильтониану с псевдогармоническим взаимодействием $\tilde{\Phi}(1-1')$, U - потенциальная энергия в гамильтониане (1), $\delta_{1,1'}$ - символ Кронекера.

Переходя к нормальным координатам, составляем уравнение для частот псевдогармонических фононов:

$$\Omega_q^2 = \frac{1}{M} \tilde{\Phi}(\vec{q}) = \omega_q^2 + \frac{3B}{M} \langle X_1^2 \rangle, \quad (3)$$

где $\tilde{\Phi}(\vec{q})$ – потенциал (2) в q -представлении, $\omega_q^2 = \frac{1}{M} \Phi(\vec{q})$ – гармонический спектр. Квадрат гармонической частоты ω_q^2 отрицателен для мягкой моды колебаний в X -точке $q_1 = \frac{\pi}{a}(1, 1, 0)$:

$$\omega^2(q_1) = -\frac{A}{M} < 0.$$

Средний квадрат смещений вычисляем стандартным способом:

$$\langle X_1^2 \rangle = \frac{1}{NM} \sum_q \langle Q_q Q_{-q} \rangle = \frac{1}{NM} \sum_q \frac{1}{2\Omega_q} \operatorname{cth} \frac{\Omega_q}{2T} + c^2, \quad (4)$$

где $Q_q = \left(\frac{M}{N}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_{l_1} X_{l_1} e^{-iq_1 l_1}$ – нормальная фононная переменная, а суммирование ведётся по зоне Бриллюэна. Здесь введён параметр порядка c , соответствующий мягкой моде колебаний в точке q_1 , который отличен от нуля ниже температуры СФП:

$$c = \langle X_1 \rangle = \frac{\langle Q_{q_1} \rangle}{\sqrt{NM}}$$

Подставляя (4) в (3), получаем самосогласованное уравнение для перенормированного фононного спектра Ω_q :

$$\Omega_q^2 = \omega_q^2 + \frac{3B}{M} (D + c^2), \quad (5)$$

где введена корреляционная функция

$$D = \langle (X_1 - c)^2 \rangle = \frac{1}{MN} \sum_q \frac{1}{2\Omega_q} \operatorname{cth} \frac{\Omega_q}{2T}. \quad (6)$$

Для равновесного значения параметра порядка в низкосимметричной фазе получаем стандартное выражение (см., например, [7]):

$$c^2 = \frac{A}{B} - 3D, \quad (7)$$

а в высокосимметричной фазе $c=0$.

Температура СФП T_0 определяется из условия обращения в нуль мягкой моды (5) в точке СФП (ниже этой температуры параметр порядка становится отличным от нуля):

$$\Omega_0^2(T_0) \equiv \Omega^2(q=q_1, T=T_0) = -\frac{A}{M} + \frac{3B}{M} D(T_0) = 0. \quad (8)$$

При решении самосогласованной системы уравнений (5)–(7) воспользуемся приближением среднего поля при вычислении корреляционной функции (6):

$$D \cong \frac{1}{2M\Omega} \operatorname{cth} \frac{\Omega}{2T}.$$

В результате получаем следующее уравнение для определения средней частоты мягкой моды $\Omega^2 = \frac{1}{N} \sum_q \Omega_q^2$:

$$\Omega^2 = \omega^2 + \frac{3B}{M} \left(\frac{1}{2M\Omega} \operatorname{cth} \frac{\Omega}{2T} + c^2 \right), \quad (9)$$

где $\omega^2 \equiv \frac{1}{N} \sum_q \omega_q^2 = -\frac{A}{M} + \omega_0^2$; $\Omega^2 = \Omega_0^2 + \omega^2$.

В этом приближении параметр ω_0 характеризует дисперсию фононного спектра и среднюю силовую постоянную $G = M\omega_0^2$. Используя выражение для параметра порядка (7), получаем для $T > T_0$:

$$\Omega^2 - \omega_0^2 = \frac{3B}{M^2} \frac{1}{2\Omega} \operatorname{cth} \frac{\Omega}{2T} - \frac{A}{B}, \quad (10)$$

и для $T < T_0$:

$$\Omega^2 - \omega_0^2 = 2 \left(\frac{A}{B} - \frac{3B}{M^2} \frac{1}{2\Omega} \operatorname{cth} \frac{\Omega}{2T} \right). \quad (11)$$

В дальнейшем нам понадобится двухвременная функция Грина (ФГ) фононов, являющаяся фурье-образом временной запаздывающей функции Грина [11] и с точностью до знака совпадающая с комплексной фононной восприимчивостью $\langle\langle Q_q | Q_{-q} \rangle\rangle_{\omega+\epsilon} = -\chi_q(\omega)$, усредненная по зоне Бриллюэна. В приближении самосогласованных фононов [7] спектр квазичастичных возбуждений описывается ангармоническими модами без затухания (5):

$$\langle\langle Q_q | Q_{-q} \rangle\rangle_{\omega} = \frac{1}{\omega^2 - \Omega_q^2}, \quad (12)$$

откуда для усреднённого по спектру значения ФГ получаем в приближении среднего поля:

$$\frac{1}{N} \sum_q \langle\langle Q_q | Q_{-q} \rangle\rangle_{\omega} = \frac{1}{N} \sum_q \frac{1}{\omega^2 - \Omega_q^2} \cong \frac{1}{\omega^2 - \Omega^2}, \quad (13)$$

где Ω определяется из уравнений (10) или (11).

При выборе полного гамильтониана не будем рассматривать взаимодействия электронов проводимости и гармонических фононов, ограничившись взаимодействием электронов с ангармоническими колебаниями.

Рассмотрим в связи с этим простую модель электрон-фононной системы, описываемой гамильтонианом (ангармоническая модель сверхпроводника [1]):

$$\hat{H} = \sum_{p\sigma} \epsilon_p a_{p\sigma}^+ a_{p\sigma} + \sum_{p\sigma q} \frac{V(q)}{\sqrt{M}} a_{p\sigma}^+ a_{p+q,\sigma} Q_q + \hat{H}_1, \quad (14)$$

где электронная подсистема описывается в рамках теории фермижидкости со спектром электронных возбуждений ϵ_p в однозонном приближении, причём энергия отсчитывается от поверхности Ферми. Взаимодействие электронов с ангармоническими фононами является линейным и определяется матричным элементом $V(q)$ экранированного электрон-фононного взаимодействия для той ветви фононных колебаний решётки Q_q , где лежит мягкая мода. Прямого кулоновского взаимодействия между электронами мы не вводим, считая эффективный параметр кулоновского взаимодействия достаточно малым ($\mu^* \ll \lambda$).

3. Уравнения Элиашберга на мнимой оси. Метод аналитического продолжения электронных функций Грина на действительную ось.

В этом разделе мы рассмотрим сверхпроводящий переход в электрон-фононной системе, описываемым гамильтонианом (14), решая уравнения Элиашберга численно.

Уравнения сверхпроводимости на мнимой оси впервые были сформулированы Элиашбергом [8], использовавшим мацубаровский формализм. Это нелинейные уравнения, содержащие температурные, или мацубаровские, ФГ электронов в мацубаровских точках $i\omega_m = i\pi T(2m+1)$, $m=0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Элиашберг получил уравнения сверхпроводимости для гамильтониана Фрёлиха, однако его подход легко можно обобщить для ангармонического решётчного взаимодействия [9]. Полученные в ре-

зультате уравнения не зависят от конкретного вида решётчной части гамильтониана \hat{H}_1 и получаются при пренебрежении перенормировкой вершины массового оператора, описывающего взаимодействие электронов с фононами во втором порядке по константе электрон-фононного взаимодействия. Массовый оператор выражается через полную электронную ФГ, что позволяет получить самосогласованные уравнения, содержащие ФГ рассматриваемой системы. Подробный вывод уравнений Элиашберга на мнимой оси см., например, в [10], приведём лишь окончательный результат:

$$Z(i\omega_n) \Delta(i\omega_n) = \pi T \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \lambda(i\omega_n - i\omega_m) \frac{\Delta(i\omega_m)}{[\omega_m^2 + \Delta^2(i\omega_m)]^{\frac{1}{2}}}, \quad (15a)$$

$$Z(i\omega_n) \omega_n = \omega_n + \pi T \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \lambda(i\omega_n - i\omega_m) \frac{\omega_m}{[\omega_m^2 + \Delta^2(i\omega_m)]^{\frac{1}{2}}}, \quad (15b)$$

где $Z(i\omega_n)$ и $\Delta(i\omega_n)$ - ренормализационная функция и щель соответственно (через эти функции фактически выражаются "нормальные" и "аномальные" ФГ электронов, см. [10]),

$$\lambda(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{\alpha^2 F(\omega)}{\omega - z}. \quad (16)$$

Как показано в [9], электрон-фононный спектр $\alpha^2 F(\omega)$ можно выразить через двухвременную ФГ решётки. Для гамильтониана (14) он имеет вид:

$$\alpha^2 F(\omega) = \frac{1}{N(0)} \int_{s_f} \frac{d^2 p}{v_p} \int_{s_f} \frac{d^2 p'}{v_{p'}} \left[\frac{1}{\pi} \text{Im} \langle\langle Q_q | Q_{-q} \rangle\rangle_{\omega+i\epsilon} \right] \frac{|V(p-p')|^2}{M}. \quad (17)$$

Здесь $N(0)$ - плотность электронных состояний (на спин, на ячейку) на поверхности Ферми s_f , $v_p = |\nabla_p \epsilon_p|$ - групповая скорость электронов на поверхности Ферми, $q=p-p'$.

Будем считать поверхность Ферми достаточно изотропной и исполь-

зовать приближение Мак-Миллана, разделяя в (17) усреднение по поверхности Ферми s_f и по зоне Бриллюэна:

$$\alpha^2 F(\omega) = -\frac{N(0)}{M} \frac{1}{N^2(0) s_f} \int \frac{d^2 p}{v_p} \int \frac{d^2 p'}{v_{p'}} |V(p-p')|^2 \times \\ \times \frac{1}{N} \sum_q \left[-\frac{1}{\pi} \text{Im} \langle Q_q | Q_{-q} \rangle \rangle_{\omega+i\epsilon} \right]$$

Окончательно получаем, используя приближение среднего поля (13):

$$\alpha^2 F(\omega) = -\frac{N(0) J^2}{M} \left(-\frac{1}{\pi} \right) \text{Im} \left[\frac{1}{(\omega+i\epsilon)^2 - \Omega^2} \right] = \frac{\eta}{M} \frac{1}{2\Omega} (\delta(\omega-\Omega) - \delta(\omega+\Omega)), \quad (19)$$

где $\eta = N(0) J^2$ - параметр Хопфильда, J^2 - усреднённый по поверхности Ферми квадрат матричного элемента электрон-фононного взаимодействия. Для эйнштейновского спектра со средней частотой Ω получаем, подставляя (18) в (16):

$$\lambda(z) = \frac{\lambda \Omega^2}{\Omega^2 - z^2}. \quad (20)$$

Здесь обозначено:

$$\lambda = \lambda(0) = \frac{\eta}{M \Omega^2} \quad (20)$$

- постоянная электрон-фононной связи.

Уравнения Элиашберга на мнимой оси можно решать численно, предварительно определив среднюю частоту фононного спектра Ω из (10) или (11).

Значения температурных ФГ в мацубаровских точках, лежащих в верхней полуплоскости комплексной плоскости ω , совпадает со значениями запаздывающей двухвременной ФГ в этих же точках. Запаздывающая ФГ аналитична в верхней полуплоскости и однозначно определяется этими значениями при условии её регулярности и ограниченности в этой полуплоскости [12]. С помощью спектрального представления ФГ можно из уравнений Элиашберга на мнимой оси сразу получить са-

мосогласованные уравнения для запаздывающей ФГ на действительной оси (т.е. при $z = \omega + i\epsilon$, $\epsilon > 0$ - бесконечно малая добавка) [13].

Значения ФГ на действительной оси содержат гораздо больше физической информации, чем в мацубаровских точках. Они позволяют, например, найти спектр квазичастичных возбуждений, определить нормированную электронную плотность состояний, которая измеряется в экспериментах по туннелированию, и т.д. В то же время с помощью ФГ на мнимой оси в мацубаровских точках можно рассчитать только термодинамические характеристики системы: свободную энергию, температуру сверхпроводящего перехода, верхнее критическое магнитное поле и т.д. С другой стороны, численные расчёты гораздо легче выполняются для температурных ФГ на мнимой оси (уравнения (15)), так как уравнения Элиашберга на действительной оси содержат сингулярные интегралы в смысле главного значения, и кроме того, итерации сходятся слишком медленно, что приводит к большим затратам машинного времени при численных расчётах.

Проще всего решать уравнения сверхпроводимости на мнимой оси, а затем выполнить аналитическое продолжение решения на действительную ось. Авторы [14] предложили для этого метод Паде-аппроксимаций, работающий, однако, только в области низких температур.

С нашей точки зрения, наиболее удобным является метод аналитического продолжения, разработанный авторами работы [15]. Мы не будем здесь излагать содержание этой статьи, приведём лишь результат. Для произвольной точки z , лежащей в верхней полуплоскости ($\text{Im}(z) > 0$), справедливы соотношения:

$$\tilde{\omega}(z) = z + i\pi T \sum_{m=0}^{+\infty} \frac{\tilde{\omega}(i\omega_m)}{\left[\tilde{\omega}^2(i\omega_m) - \phi^2(i\omega_m) \right]^{\frac{1}{2}}} (\lambda(z-i\omega_m) - \lambda(z+i\omega_m)) +$$

$$+ i\pi \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{\tilde{\omega}(z-\omega)}{\left[\tilde{\omega}^2(z-\omega) - \phi^2(z-\omega)\right]^{\frac{1}{2}}} \alpha^2 F(\omega) (n(\omega) + f(\omega-z)), \quad (21a)$$

$$\phi(z) = i\pi \Gamma \sum_{m=0}^{+\infty} \frac{\phi(i\omega_m)}{\left[\tilde{\omega}^2(i\omega_m) - \phi^2(i\omega_m)\right]^{\frac{1}{2}}} (\lambda(z-i\omega_m) + \lambda(z+i\omega_m)) +$$

$$+ i\pi \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{\phi(z-\omega)}{\left[\tilde{\omega}^2(z-\omega) - \phi^2(z-\omega)\right]^{\frac{1}{2}}} \alpha^2 F(\omega) (n(\omega) + f(\omega-z)). \quad (21b)$$

Здесь введён ряд обозначений: $\phi(z) = \Delta(z)Z(z)$, $\tilde{\omega}(z) = zZ(z)$ - полные ФГ, совпадающие с запаздывающими ФГ в верхней полуплоскости, и с опережающими в нижней, $n(\omega) = 1/(\exp(\frac{\omega}{T}) - 1)$ - Бозе-распределение, $f(\omega) = 1/(\exp(\frac{\omega}{T}) + 1)$ - ферми-распределение, а интегрирование производится вдоль действительной оси. Неоднозначность извлечения корня в комплексной плоскости устраняется правилом: $\text{Im}(\sqrt{z}) > 0$.

В интересующем нас случае Эйнштейновского спектра получаем из (21), подставляя туда соотношение (18):

$$\begin{aligned} \Delta(z)Z(z) = & \pi\Gamma \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \lambda(z-i\omega_m) \frac{\Delta(i\omega_m)}{\left[\omega_m^2 + \Delta^2(i\omega_m)\right]^{\frac{1}{2}}} + \\ & + i\pi \frac{1}{2} \Omega \left[(n(\Omega) + f(\Omega-z)) \frac{\Delta(z-\Omega)}{\left[(z-\Omega)^2 - \Delta^2(z-\Omega)\right]^{\frac{1}{2}}} + \right. \\ & \left. + (n(\Omega) + f(\Omega+z)) \frac{\Delta(z+\Omega)}{\left[(z+\Omega)^2 - \Delta^2(z+\Omega)\right]^{\frac{1}{2}}} \right], \quad (22a) \\ zZ(z) = & z + i\pi\Gamma \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \lambda(z-i\omega_m) \frac{\omega_m}{\left[\omega_m^2 + \Delta^2(i\omega_m)\right]^{\frac{1}{2}}} + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & + i\pi \frac{1}{2} \Omega \left[(n(\Omega) + f(\Omega-z)) \frac{z-\Omega}{\left[(z-\Omega)^2 - \Delta^2(z-\Omega)\right]^{\frac{1}{2}}} + \right. \\ & \left. + (n(\Omega) + f(\Omega+z)) \frac{z+\Omega}{\left[(z+\Omega)^2 - \Delta^2(z+\Omega)\right]^{\frac{1}{2}}} \right], \quad (22b) \end{aligned}$$

где $z = \omega + i\epsilon$, а функция $\lambda(z)$ определена согласно (19).

Эти сложные функциональные соотношения легко могут быть решены численно простыми итерациями. Благодаря единственности аналитического продолжения мы можем быть уверенными в том, что они сходятся к своим значениям на действительной оси.

При решении уравнений (22) очень полезными оказываются свойства симметрии ФГ относительно комплексного сопряжения и изменения знака z в комплексной плоскости [23]:

$$\begin{aligned} \Delta^*(z) &= \Delta(z^*), \quad \Delta(-z) = \Delta(z), \\ Z^*(z) &= Z(z^*), \quad Z(-z) = Z(z), \end{aligned} \quad (23)$$

где z - произвольное комплексное число. Заметим, что эти свойства легко могут быть получены непосредственно из уравнений (21), если воспользоваться нечётностью функции Элиашберга (17):

$$\alpha^2 F(-\omega) = -\alpha^2 F(\omega).$$

Из соотношений (23) находим более удобные тождества:

$$\begin{aligned} \Delta^*(z) &= \Delta(-z^*), \\ Z^*(z) &= Z(-z^*), \end{aligned}$$

откуда в частном случае $z = i\omega_n$ получаем: $\Delta^*(i\omega_n) = \Delta(i\omega_n)$, $Z^*(i\omega_n) = Z(i\omega_n)$ - т.е. щелевая и ренормализационная функции действительны на мнимой оси, и при $z = x + i\epsilon$:

$$\begin{aligned} \Delta^*(x+i\epsilon) &= \Delta(-x+i\epsilon), \\ Z^*(x+i\epsilon) &= Z(-x+i\epsilon). \end{aligned}$$

Таким образом, чтобы найти $\Delta(z)$ и $Z(z)$ на действительной оси, необходимо:

- (а) найти Ω из (10) или (11),
 (б) решить простыми итерациями уравнения Элиашберга на мнимой оси (15), воспользовавшись соотношениями (19) и (20),
 (в) наконец, получить из (22) $\Delta(z)$ и $Z(z)$, подставляя туда решения $\Delta(i\omega_n)$ и $Z(i\omega_n)$ из (15).

4. Основные результаты и их обсуждение.

Для численного расчёта щелевой и ренормализационной функций необходимо задать параметры локального ангармонического потенциала A , B , M , дисперсию гармонического взаимодействия между ячейками ω_0 и параметр Хопфильда η . Температура СФП T_0 определяется из уравнения (8), сверхпроводящего перехода – находится из линеаризованных уравнений Элиашберга методом, описанным в приложении. Термодинамическая щель Δ_0 , наиболее близкая по своим свойствам к параметру БКШ, находится из соотношения [19]:

$$\Delta_0 = \text{Re}(\Delta(\Delta_0)), \quad (24)$$

где $\Delta(z)$ – щелевая функция на действительной оси.

Фазовую T - x диаграмму можно получить, задавая дополнительно зависимость параметров решётки от концентрации примеси x допирующих элементов (например, Ba или Sr в соединении $\text{La}_{2-x}(\text{Ba}, \text{Sr})_x\text{CuO}_4$). Если считать, что силовая постоянная A , определяющая квадрат отрицательной в гармоническом приближении моды колебаний, линейно убывает с ростом x , $A(x) = A_0(1-4x)$ (см. обсуждение в [6]), то мы получим диаграмму, представленную на рис. 1.

Наличие ангармонических мод приводит к зависимости постоянной электрон-фононной связи λ от температуры через среднюю частоту фононного спектра Ω , что даёт дополнительный вклад в зависимость термодинамической щели от температуры по сравнению со случаем гармонических колебаний решётки.

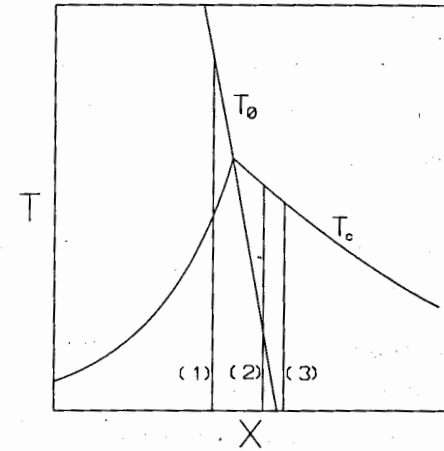


Рис. 1. Схематическая фазовая T - x диаграмма для рассматриваемой модели: зависимость температур структурного T_0 и сверхпроводящего T_c переходов от концентрации примеси x . (1) – концентрация, при которой $T_c < T_0$, (2) – $T_c > T_0 > 0$ и (3) – $T_c > T_0 = 0$.

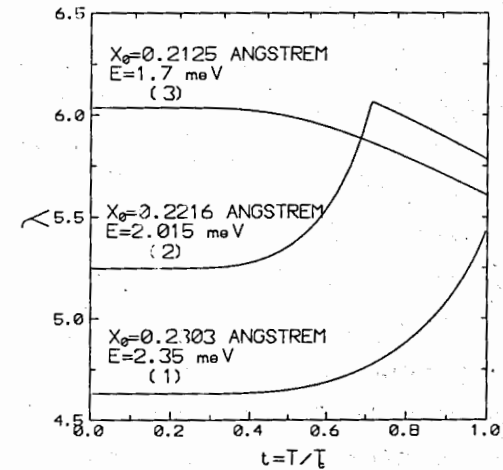


Рис. 2. Постоянная электрон-фононной связи в зависимости от приведённой температуры для случаев 1), 2) и 3).

Как подчёркивалось в работе [3], для перехода типа "порядок-беспорядок" статическая восприимчивость решётки достигает своего максимального значения при температуре СФП T_0 . Это справедливо и в случае перехода типа "смещения": выражение для усреднённой по спектру статической восприимчивости $\chi=1/\Omega^2$ максимально при минимальном значении $\Omega=\omega_0$ при $T=T_0$ (см. (8), (10), (11)). Поэтому $\lambda=\frac{\eta}{M\Omega^2}$ максимально при $T=T_0$. По этой причине максимальная температура сверхпроводящего перехода T_c соответствует точке пересечения кривых $T_c(x)$ и $T_0(x)$ на T - x диаграмме (рис.1). В теории Элиашберга, так же как и в теории БКШ, параметр порядка Δ_0 увеличивается с ростом λ . Поэтому, благодаря температурной зависимости λ и Ω , зависимость термодинамической щели от температуры при фиксированном значении примеси x будет качественно различаться в 3-х случаях (см. фазовую T - x диаграмму в окрестности $T_c=T_0$ на рис. 1):

- 1) $0 < T_c < T_0$,
- 2) $0 < T_0 < T_c$,
- 3) $T_0 = 0, T_c > 0$.

Нами выбраны значения модельных параметров $\eta=3\text{eV}/\text{\AA}^2$, $M=16$ а.е.м., $\omega_0=100\text{K}$, параметр B , постоянен, A - линейно зависит от концентрации примеси. Значения постоянных A и B удобнее выразить через высоту потенциального барьера E и половину расстояния между минимумами x_0 двуянного ангармонического потенциала: $A=4E/x_0^2$, $B=4E/x_0^4$.

Результаты зависимости постоянной электрон-фононной связи от приведённой температуры $t=T/T_c$ для вышеупомянутых случаев 1)-3) изображены на рис.2. Температура сверхпроводящего перехода для всех трёх случаев примерно одинакова и равна 42K. Значения соот-

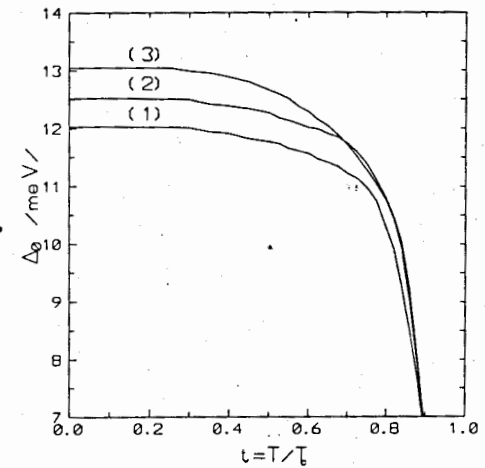


Рис.3. Верхняя часть зависимости термодинамической сверхпроводящей щели Δ_0 от приведённой температуры для случаев 1), 2) и 3).

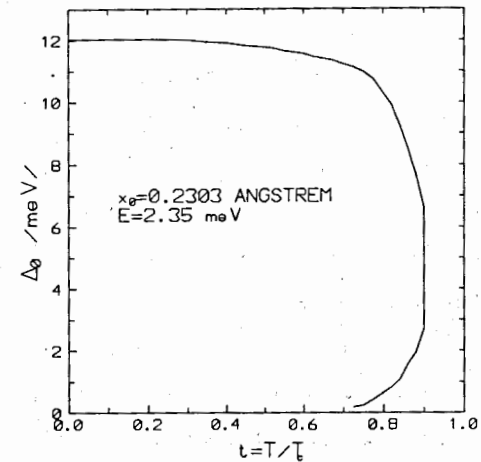


Рис.4. Зависимость термодинамической сверхпроводящей щели Δ_0 , определённой согласно (24), от приведённой температуры t .

ветствующих параметров E и x_0 указаны на рис.2. Резкий максимум в зависимости $\lambda(t)$ для случая 2) возникает при температуре СФП. Для случая 1) при понижении температуры мы удаляемся от температуры СФП на фазовой диаграмме, поэтому $\lambda(t=0) < \lambda(t=1)$. В случае 3) – наоборот, приближаемся, что приводит к росту λ при понижении температуры: $\lambda(t=0) > \lambda(t=1)$. В промежуточном случае 2) может выполняться как первое, так и второе неравенство.

На рис.3 показана верхняя часть зависимости термодинамической щели Δ_0 , определённой согласно соотношению (24), от приведённой температуры. Из-за описанной выше температурной зависимости λ , при практически одинаковой температуре сверхпроводящего перехода, как само значение щели Δ_0 при нулевой температуре, так и отношение $2\Delta_0(t=0)/T_c$ различны для случаев 1)-3):

- 1) $2\Delta_0(t=0)/T_c = 7.22$,
- 2) $2\Delta_0(t=0)/T_c = 6.95$,
- 3) $2\Delta_0(t=0)/T_c = 6.67$.

В целом, эффект, связанный со структурной неустойчивостью, выражен не очень сильно. При этом постоянная электрон-фононной связи меняется довольно существенно, например, в случаях 1) и 3) значения $\lambda(t=0)$ отличаются примерно на 25%. По-видимому, малость эффекта связана с большими значениями электрон-фононной постоянной ($\lambda=5\div 6$ – случай сильной связи), когда скорость роста $\Delta(\lambda, t)$ от λ при фиксированной приведённой температуре t несколько убывает по сравнению с малыми значениями λ . Однако, несмотря на малость эффекта, появляется качественное различие поведения зависимости щели от приведённой температуры в низкосимметричной (случай 1) и высокосимметричной (случай 3) фазах.

Видно, что щель слабо зависит от t вплоть до значений $t \approx 0.5$, а

затем резко падает, что качественно соответствует экспериментальным наблюдениям для $YBa_2Cu_3O_7$ [17]. Щель Δ_0 не является однозначной и обращается в нуль при температуре несколько меньшей температуры сверхпроводящего перехода (рис.4). Это – артефакт определения термодинамической щели (24) в теории Элиашберга [18], который особенно заметно проявляется в случае сильной связи, когда существенными становятся эффекты затухания квазичастиц.

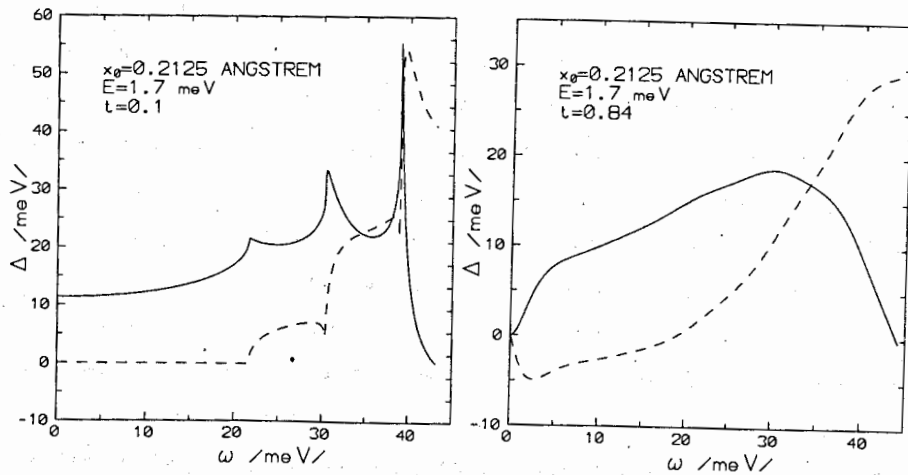
На рис.5(а, б, в) показано поведение действительной и мнимой частей динамической щели от приведённой температуры. При температурах t , близких к 1, затухание, связанное с мнимой частью $\Delta(\omega)$, становится велико даже при малых частотах. Периодические резкие максимумы при $\omega = \Delta_0 + n\Omega$, $n=0, 1, 2, \dots$, связаны с распадом куперовских пар при поглощении одного или нескольких фононов частоты Ω , и являются следствием эйнштейновского фононного спектра [19,20]. В реальном случае непрерывного спектра возбуждений решётки такой периодичности не будет.

В экспериментах по измерению вольт-амперной характеристики туннельного тока в системе "нормальный металл – диэлектрик – сверхпроводник" непосредственно наблюдается относительная плотность квазичастичных состояний:

$$\frac{N(\omega)}{N(0)} = \text{Re} \left(\frac{\omega}{\sqrt{\omega^2 - \Delta^2(\omega)}} \right), \quad (25)$$

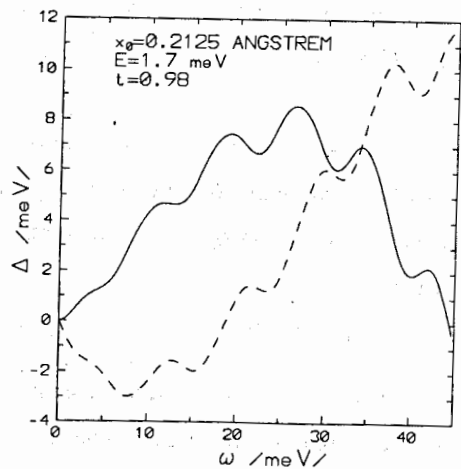
изображенная на рис.6(а, б, в). Здесь также видны периодические острые максимумы, размывающиеся при увеличении t вследствие температурных возбуждений.

Для того чтобы продемонстрировать зависимость $N(\omega)/N(0)$ для случая непрерывного электрон-фононного спектра $\alpha^2F(\omega)$, воспользуемся взятой из экспериментов по рассеянию нейтронов энергетической плотностью фононных состояний $G(\omega)$ для соединения $La_{1.85}Sr_{0.15}CuO_4$



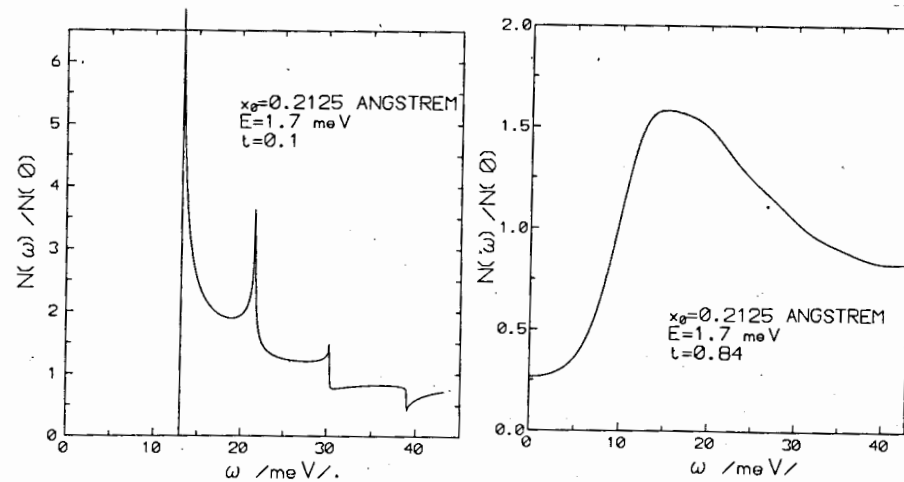
а)

б)



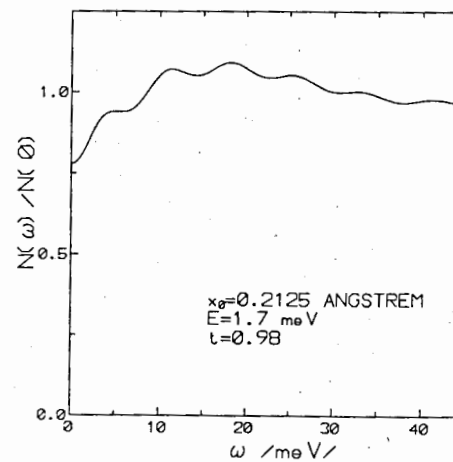
в)

Рис. 5(а, б, в). Действительная (сплошная линия) и мнимая (пунктирная линия) части $\Delta(\omega)$ при различных значениях приведённой температуры.



а)

б)



в)

Рис. 6(а, б, в). Относительная плотность квази-частичных состояний $N(\omega)/N(0)$ при различных значениях приведённой температуры.

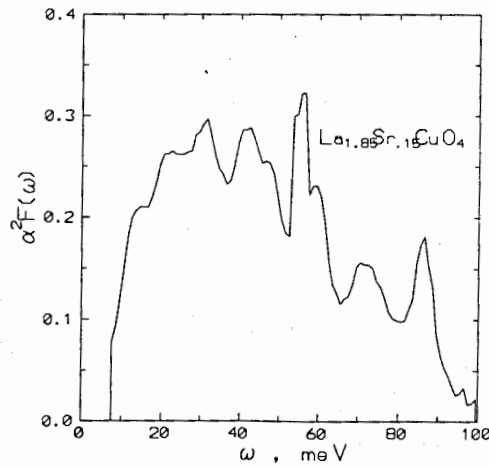


Рис. 7. Функция Элиашберга для $\text{La}_{1.85}\text{Sr}_{0.15}\text{CuO}_4$, выбранная равной $\alpha^2 F(\omega) = aG(\omega)$, где $a = 1.1$ meV. При этом $T_c \approx 40\text{K}$, а $\lambda \approx 1.04$.

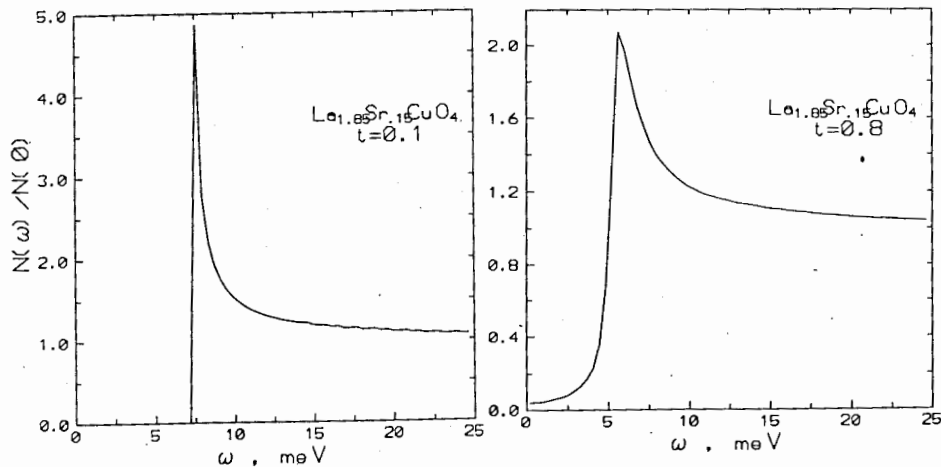


Рис. 8(а, б). Относительная плотность квази-частичных состояний $N(\omega)/N(0)$ при различных значениях приведённой температуры для $\text{La}_{1.85}\text{Sr}_{0.15}\text{CuO}_4$.

[25]. Предполагая, что функция Элиашберга $\alpha^2 F(\omega)$ и плотность $G(\omega)$ пропорциональны, выберем коэффициент пропорциональности так, чтобы получить экспериментально наблюдаемую температуру $T_c \approx 40\text{K}$ (см. рис. 7). Как видно из рис. 8(а, б), никаких периодических максимумов для туннельной плотности состояний $N(\omega)/N(0)$ нет.

В заключение отметим, что несмотря на предсказываемый слабый эффект влияния СФП на зависимость термодинамической щели от температуры, соответствующая экспериментальная пробырка была бы весьма полезной.

Автор хотел бы выразить благодарность профессору Н. М. Плакиде за многочисленные обсуждения и поддержку.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Простой метод определения T_c из линеаризованных уравнений Элиашберга.

Уравнения (15) позволяют определить температуру сверхпроводящего перехода, ниже которой щелевая функция $\Delta(i\omega_n)$, непосредственно связанная с аномальными средними $\langle a_{p\sigma}^\dagger a_{-p-\sigma} \rangle$, становится отличной от нуля. В окрестности T_c она мала, и поэтому при нахождении T_c можно ограничиться линейным приближением по $\Delta(i\omega_n)$ в уравнениях (15) (линеаризованные уравнения Элиашберга на мнимой оси):

$$Z(i\omega_n)\Delta(i\omega_n) = \pi T \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \lambda(i\omega_n - i\omega_m) \frac{\Delta(i\omega_m)}{|\omega_m|}, \quad (\text{П1а})$$

$$Z(i\omega_n)\omega_n = \omega_n + \pi T \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \lambda(i\omega_n - i\omega_m) \text{sign}(\omega_m), \quad (\text{П1б})$$

Выражая $Z(i\omega_n)$ из уравнения (П1б), и подставляя его в (П1а), получаем:

$$\Delta'_n = \sum_{m=0}^{+\infty} K_{nm} \Delta'_m, \quad (\text{П2})$$

где обозначено: $\Delta'_n = \frac{\Delta(i\omega_n)}{\omega_n} \sqrt{S_n}$, $K_{nm} = \frac{\lambda_{n-m} + \lambda_{n+m+1}}{\sqrt{S_n S_m}}$,

$$\lambda_p = 2 \int_0^{+\infty} d\omega \frac{\omega \alpha^2 F(\omega)}{\omega^2 + (2\pi T_p)^2}, \quad S_n = 2n+1 + \sum_{p=0}^{+\infty} (\lambda_{n-p} - \lambda_{n+p+1}).$$

Из уравнения (П2) видно, что перенормированная щелевая функция Δ'_n есть собственный вектор, соответствующий собственному значению (СЗ) $\mu_1=1$ для симметричной действительной матрицы K_{mn} . При высоких температурах все СЗ этой матрицы меньше 1, и уравнение (П2) имеет только тривиальное решение $\Delta'_n=0$ для всех $n \geq 0$, соответствующее нормальной фазе. При $T=T_c$ максимальное СЗ матрицы (оператора) \hat{K} становится равным 1, что приводит к отличному от нуля значению Δ'_n , а значит и $\Delta(i\omega_n)$.

Обычно для численного определения T_c решают задачу на СЗ для матрицы K_{mn} , ограничившись конечным числом мацубаровских точек ($0 \leq m \leq N-1$, $0 \leq n \leq N-1$), а само значение T_c находят из условия $\mu_{\max}(T_c)=1$. Однако нахождение всех СЗ явно избыточно для определения T_c . Заметим, что матрица \hat{K} является положительной ($K_{mn} > 0$). Воспользуемся теоремой Фробениуса-Перрона [26], которая, в частности, утверждает, что максимальное СЗ μ_1 положительной матрицы положительно, невырождено, и совпадает с нормой матрицы \hat{K} . В случае симметричной матрицы это означает, что СЗ μ_1 максимально ещё и по модулю:

$$0 \leq |\mu_N| \leq |\mu_{N-1}| \leq \dots \leq |\mu_2| < \mu_1.$$

Поэтому для наших целей достаточно посмотреть асимптотику следа матрицы в степени 21:

$$\text{Sp}(\hat{K}^{21}) = \mu_1^{21} + \mu_2^{21} + \dots + \mu_N^{21}.$$

При этом диагонализировать матрицу не нужно в силу инвариантности следа относительно поворотов в N -мерном линейном пространстве.

Таким образом, приходим к критерию:

если $\text{Sp}(\hat{K}^{21}) \rightarrow +\infty$ при $1 \rightarrow +\infty$, то $\mu_1 > 1$, и $T < T_c$,

если $\text{Sp}(\hat{K}^{21}) \rightarrow 0$ при $1 \rightarrow +\infty$, то $\mu_1 < 1$, и $T > T_c$.

Пользуясь этим критерием, легко определить T_c с любой необходимой степенью точности.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Plakida N.M., Aksenov V.L., and Drechsler S.L., *Europhys.Lett.* **4**, 1309-1314 (1987).
- [2] Плакида Н.М., Чёрный А.Ю., *Сверхпроводимость ФХТ* **4**, 1493-1502 (1991).
- [3] Cherny A.Yu., and Galbaatar T., *Physica C* **210**, 35-41 (1993).
- [4] Annett J.F., Goldenfeld N., and Renn S.R., in *Physical Properties of High-Temperature Superconductors*, v.2, ed. by D.M.Ginsberg (World Scientific, Singapore, 1990) p.571-685.
- [5] Cherny A.Yu., *Physica C* **244**, 129-134 (1995).
- [6] Flax S., Plakida N.M., and Aksenov V.L., *Int.J.Mod.Phys. B* **4**, 1955-1973 (1990).
- [7] Н.М.Плакида, Метод двухвременных функций Грина в теории ангармонических кристаллов, в сб. *Статистическая физика и квантовая теория поля*, под ред. Н.Н.Боголюбова (М., Наука, 1973) стр.205-240.
- [8] Элиашберг Г.М., *ЖЭТФ* **38**, 966-976 (1960).
- [9] Вуйчич Г.М., Петру Э.К., Плакида Н.М., *ТМФ* **46**, 91-97 (1981).
- [10] Вонсовский С.В., Изюмов Ю.А., Курмаев Э.З., *Сверхпроводимость переходных металлов, их сплавов и соединений* (М., Наука, 1977).
- [11] Зубарев Д.Н., *Неравновесная статистическая термодинамика* (М., Наука, 1971).
- [12] Baym G., and Mermin D., *J.Math.Phys.* **2**, 232-234 (1961).
- [13] Schieffer J.R., Scalapino D.J., and Wilkins J.W., *Phys. Rev. Lett.* **10**, 336-339 (1963).

- [14] Vidberg H.J., and Serene J.W., *J. Low Temp. Phys.* **29**, 179-192 (1977).
- [15] Marsiglio F., Schössmann M., and Carbotte J.P., *Phys.Rev. B* **37**, 4965-4969 (1988).
- [16] Allen P.B., and Mitrović B., in *Solid State Physics*, v.37, ed. by Seitz F. and Turnbull D. (Academic, N.Y., 1982) p.1-92.
- [17] Tsai J.S., Takeuchi I., Fujita J., Miura S., Terashima T., Bando Y., Iijima K., and Yamamoto K., *Physica C* **157**, 537-550 (1989).
- [18] Leavens C.R., *Phys.Rev. B* **29**, 5178-5181 (1984).
- [19] Scalapino D.J., in *Superconductivity*, v.1, ed. by Parks R.D. (Marcel Dekker, N.Y., 1969) p.449-560.
- [20] Marsiglio F., and Carbotte J.P., *Phys.Rev. B* **43**, 5355-5363 (1991).
- [21] Takigawa M., Hammel P.C., Heffner R.H., and Fisk Z., *Phys.Rev. B* **39**, 7371 (1989).
- [22] Бижено Р.Дж., Ширан Дж., в сб. *Физические свойства высокотемпературных сверхпроводников*, под ред. Д.М. Гинзберга (М., Мир, 1990) стр.163-221.
- [23] Ambegaokar V., Tewordt L., *Phys.Rev.* **134**, A805 (1964).
- [24] Брус А.Д., Каули Р.А., *Структурные фазовые переходы* (М., Мир, 1984).
- [25] Arai M., Yamada K., Hidaka Y., Taylor A.D., in *Japanese Activities in the Study of Anomalous Behavior of $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$ ($x=0.12$)* (Preprints, July 1991), p.221-228.
- [26] Гантмахер Ф.Р., *Теория матриц* (М., Наука, 1988).

Рукопись поступила в издательский отдел
24 апреля 1995 года.