Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

М. Е. Палистрант, Сверхпроводимость в двухзонных системах с малой концентрацией носителей, *ТМФ*, 1996, том 109, номер 1, 137–151

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf1218>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.209.52.79

26 апреля 2023 г., 17:02:04

М. Е. Палистрант*

СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ В ДВУХЗОННЫХ СИСТЕМАХ С МАЛОЙ КОНЦЕНТРАЦИЕЙ НОСИТЕЛЕЙ

Рассматривается сверхпроводник с двумя особенностями, характерными для высокотемпературных материалов: малой концентрацией носителей заряда и перекрытием энергетических полос на поверхности Ферми. При $T = 0$ в приближении среднего поля определены параметры порядка Δ_n и химический потенциал μ для состояния бозе-конденсации локальных пар ($\mu < 0$). Получено также уравнение для энергии ε_b связанного состояния и установлено соотношение $\varepsilon_b = 2\mu$. Развита метод функционального интегрирования применительно к двухзонной модели, и на его основе показан переход от фермиевской к бозевской картине элементарных возбуждений при наличии в системе двухчастичного связанного состояния. Получено выражение для температуры бозе-конденсации T_k , и оценен вклад остаточного взаимодействия между бозонами для систем различной размерности.

1. ВВЕДЕНИЕ

После открытия высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) ученые приложили немалые усилия для выяснения природы этого явления и объяснения необычных термодинамических и кинетических свойств металлоксидных соединений. Однако несмотря на существенные достижения в этой области механизмы ВТСП не раскрыты. В теоретическом плане среди большого количества моделей и направлений, на наш взгляд, представляет интерес направление, связанное с учетом особенностей электронного энергетического спектра, присущих материалам ВТСП (перекрытие энергетических полос на поверхности Ферми, особенности Ван-Хова–Лифшица, а также наличие условия “нестинга”).

В современной научной литературе в различных вариантах широко используется модель с перекрывающимися энергетическими зонами, предложенная в 1959 г. Москаленко [1] и Сулом и др. [2]. На основании этой модели нам удалось получить описание ряда сверхпроводящих свойств высокотемпературных соединений [3–11], согласующихся

* Институт прикладной физики Академии наук Молдовы

с экспериментальными данными. Ссылки на исследования других авторов можно найти в вышеуказанных работах, а также в обзоре [12].

Популярность многозонной модели объясняется рядом причин, главные из которых следующие:

1. В материалах ВТСП доказано наличие перекрытия двух и более энергетических полос на поверхности Ферми, и естественно встает вопрос о влиянии этого перекрытия на термодинамические, кинетические и другие свойства сверхпроводников.

2. Модель применима как для фононного, так и для нефононного механизма сверхпроводимости. Даже в самом неблагоприятном случае, когда преобладает отталкивание между электронами, при определенных соотношениях между константами внутризонного и межзонного взаимодействий возможна ВТСП [7].

3. Эта модель позволяет приблизить описание свойств материалов ВТСП к наблюдаемым на эксперименте.

Важным результатом этих исследований является установление факта, что учет перекрытия энергетических полос может привести не только к количественному, но и к качественному отличию от случая однозонного сверхпроводника. Примером такого отличия может служить приведенная выше (в пункте 2) возможность возникновения ВТСП, возникновение ступенчатой зависимости температуры сверхпроводящего перехода от концентрации носителей [5, 11], положительная кривизна верхнего критического поля вблизи температуры перехода T_c [6] и др.

В приведенных выше работах исследования выполнены на основе представления о куперовском спаривании. В системах с малой концентрацией носителей, каковыми являются полупроводники и металлоксидные соединения, с уменьшением концентрации носителей возможны возникновение связанных состояний и переход системы в бозе-конденсацию локальных пар с конечной энергией связи (сценарий Шафрота [13]). Вопрос о таком переходе в однозонных системах был рассмотрен в ряде работ [14–19]. Для осуществления сценария Шафрота необходимо наличие в системе связанного двухчастичного состояния [20], возникновение которого при наличии притягательного взаимодействия существенно зависит от размерности системы и осуществляется в области малых концентраций носителей.

Как показано в [15, 18], изменение знака химического потенциала по мере уменьшения концентрации носителей соответствует переходу от сценария БКШ к сценарию Шафрота. Конденсация локальных пар имеет место для таких концентраций носителей, при которых $\mu < 0$.

Данная работа посвящена исследованию сверхпроводящего упорядочения в системах, обладающих двумя особенностями: низкой концентрацией носителей заряда и перекрытием энергетических полос на поверхности Ферми. Как отмечалось выше, обе эти особенности присущи высокотемпературным соединениям.

Работа представлена следующим образом. Раздел 2 посвящен рассмотрению самосогласованным образом в приближении среднего поля системы уравнений на параметры порядка Δ_n и μ при $T = 0$ и выявлению влияния перекрытия энергетических полос на эти величины и на концентрацию носителей, при которой система переходит от сценария

куперовского спаривания ($\mu > 0$) к сценарию Шафрота ($\mu < 0$).

Получено также уравнение на энергию связи ε_b двухчастичного состояния, и установлено соотношение между величинами ε_b и μ . В разделе 3 развит метод функционального интегрирования применительно к двухзонной модели, и на его основе дана процедура перехода от фермиевской к бозевской картине элементарных возбуждений. Определена температура конденсации T_k бозе-системы. В последнем разделе подведены итоги исследований, выполненных в работе.

2. СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ В ПРИБЛИЖЕНИИ СРЕДНЕГО ПОЛЯ ПРИ $T = 0$

Гамильтониан, описывающий двухзонную систему, имеет вид [1, 21]

$$H = \int dr \sum_{n\sigma} \psi_{n\sigma}^+(r) H_{0n} \psi_{n\sigma}(r) - \frac{1}{2} \sum_{nm} V_{nm} \int dr \sum_{\sigma\sigma'} \psi_{n\sigma}^+(r) \psi_{n\sigma'}^+(r) \psi_{n\sigma'}(r) \psi_{n\sigma}(r) (1 - \delta_{\sigma\sigma'}). \quad (1)$$

Первый член этого выражения соответствует кинетической энергии, а второй ответствен за сверхпроводимость; зонные индексы $n, m = 1, 2$, V_{nm} – константы внутризонного и межзонного взаимодействий; $\psi_{n\sigma}^+(r)$ – оператор рождения частицы в зоне n со спином σ , $H_{0n} = \frac{\nabla^2}{2m_n} - \mu_n$.

В приближении среднего поля и при $T = 0$ параметры порядка Δ_n и химический потенциал μ определяются самосогласованной системой уравнений [7]

$$\Delta_n = \sum_{km} V_{nm} \frac{\Delta_m}{2\sqrt{(\varepsilon_m(k) - \mu)^2 + \Delta_m^2}}, \quad (2)$$

$$N = \sum_{kn} \left[1 - \frac{\varepsilon_n(k) - \mu}{\sqrt{(\varepsilon_n(k) - \mu)^2 + \Delta_n^2}} \right], \quad (3)$$

где $\varepsilon_n(k) = \frac{k^2}{2m_n} + \zeta_n$, m_n – эффективная масса, а ζ_n – начало отсчета энергии n -й зоны.

С уменьшением концентрации носителей в точке $\mu = 0$ происходит переход от состояния БКШ к бозе-конденсации локальных пар. Мы будем рассматривать состояние глубокой бозе-конденсации локальных пар, когда выполняются соотношения $\mu < 0$ ($\mu' = -\mu > 0$) и $\Delta_n^2/\mu'^2 \ll 1$. В этом пределе система (2) и (3) приобретает вид

$$\Delta_n = \sum_m V_{nm} \Delta_m \xi_m(2\mu'), \quad N = \sum_{kn} \frac{\Delta_n^2}{2(\varepsilon_n(k) + \mu')^2}, \quad (4)$$

где

$$\xi_m(2\mu') = \sum_k \frac{1}{2\varepsilon_m(k) + 2\mu'}. \quad (5)$$

Важную роль в поведении сверхпроводящей системы с малой концентрацией носителей играет наличие двухчастичного связанного состояния [20, 17]. Уравнение для определения энергии связи ε_b в двухзонной системе мы получим исходя из рассмотрения двухчастичной функции Грина “плотность-плотность” при $\varepsilon_F = 0$ и соответствующих уравнений для вершин [22, 23]:

$$\Gamma_{nm} = -V_{nm} + \sum_{n_1} V_{nn_1} \xi_{n_1}(|\varepsilon_b|) \Gamma_{n_1m}. \quad (6)$$

Эта система записана для случая $\Delta_n = 0$ и $\varepsilon_F = 0$, что соответствует двухчастичному взаимодействию без учета многочастичных эффектов. Связанное состояние двух частиц возникает, когда вершина расходится. Следовательно, для энергии связанного состояния ε_b на основании (6) получаем уравнение

$$1 - V_{11}\xi_1(|\varepsilon_b|) - V_{22}\xi_2(|\varepsilon_b|) + (V_{11}V_{22} - V_{12}^2)\xi_1(|\varepsilon_b|)\xi_2(|\varepsilon_b|) = 0. \quad (7)$$

Из условия разрешимости системы уравнений (4) при $N \rightarrow 0$ получаем

$$1 - V_{11}\xi_1(2\mu') - V_{22}\xi_2(2\mu') + (V_{11}V_{22} - V_{12}^2)\xi_1(2\mu')\xi_2(2\mu') = 0. \quad (8)$$

Сравнение последних двух уравнений позволяет утверждать, что при $N \rightarrow 0$

$$|\varepsilon_b| = 2\mu'. \quad (9)$$

Выполнив в формулах (2) и (3) интегрирование по энергии, приведем их в области малых концентраций ($\mu < 0$, $\Delta_n^2/\mu^2 \ll 1$) к виду

$$\begin{aligned} \mu(1 - \exp \alpha_1) + \frac{\Delta_1^2}{4} f_1 &= \tilde{\zeta}_{c1}, \\ \mu(1 - \exp \alpha_2) + \frac{\Delta_2^2}{4} f_2 &= \tilde{\zeta}_{c2}, \\ n_1 F_1 \frac{\Delta_1^2}{4} + n_2 F_2 \frac{\Delta_2^2}{4} &= \tilde{n}, \end{aligned} \quad (10)$$

где

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \frac{V_{22} - V_{12}\Delta_2/\Delta_1}{N'_1(V_{11}V_{22} - V_{12}V_{21})}, \quad \alpha_2 = \frac{V_{11} - V_{21}\Delta_1/\Delta_2}{N'_2(V_{11}V_{22} - V_{12}V_{21})}, \\ N'_n &= \frac{N_n}{2}, \quad \tilde{n} = \frac{N}{2(N_1 + N_2)}, \quad n_n = \frac{N_n}{N_1 + N_2}, \\ f_n &= \frac{(1 - \exp \alpha_n)(1 - \exp 2\alpha_n)}{\zeta_{cn} \exp \alpha_n}, \quad F_n = \frac{(1 - \exp \alpha_n)^2}{\zeta_{cn} \exp \alpha_n}, \\ \tilde{\zeta}_{cn} &= \zeta_{cn} + \zeta_n(1 - \exp \alpha_n), \end{aligned} \quad (11)$$

здесь N_n – плотность электронных состояний на n -й полости поверхности Ферми, ζ_{cn} – энергия обрезания интегралов. Решения системы уравнений (10) имеют вид

$$\mu = \left(n_1 \tanh \frac{\alpha_1}{2} + n_2 \tanh \frac{\alpha_2}{2} \right)^{-1} \times \\ \times \left\{ -\frac{1}{2} \left[n_1 \tilde{\zeta}_{c1} \left(1 - \tanh \frac{\alpha_1}{2} \right) + n_2 \tilde{\zeta}_{c2} \left(1 - \tanh \frac{\alpha_2}{2} \right) \right] + \tilde{n} \right\}, \quad (12)$$

$$\Delta_1^2 = \frac{\zeta_{c1}}{\sinh \frac{\alpha_1}{2} \cosh \frac{\alpha_1}{2}} \left(n_1 \tanh \frac{\alpha_1}{2} + n_2 \tanh \frac{\alpha_2}{2} \right)^{-1} \times \\ \times \left\{ \tilde{n} + n_2 \left[\zeta_{c1} \tanh \frac{\alpha_2}{2} \left(\coth \frac{\alpha_1}{2} - 1 \right) + \zeta_{c2} \left(\tanh \frac{\alpha_2}{2} - 1 \right) \right] \right\}. \quad (13)$$

Выражение для Δ_2 можно получить из (13), сделав замену индексов $1 \leftrightarrow 2$. На основании (13) для отношения Δ_1/Δ_2 получаем уравнение

$$\left(\frac{\Delta_1}{\Delta_2} \right)^2 = \frac{\zeta_{c1} \tilde{n} + n_2 \zeta_{c1} \left[\zeta_{c1} \tanh \frac{\alpha_2}{2} \left(\coth \frac{\alpha_1}{2} - 1 \right) + \zeta_{c2} \left(\tanh \frac{\alpha_2}{2} - 1 \right) \right] \sinh \alpha_2}{\zeta_{c2} \tilde{n} + n_1 \zeta_{c2} \left[\zeta_{c2} \tanh \frac{\alpha_1}{2} \left(\coth \frac{\alpha_2}{2} - 1 \right) + \zeta_{c1} \left(\tanh \frac{\alpha_1}{2} - 1 \right) \right] \sinh \alpha_1}. \quad (14)$$

В случае однозонной системы ($n_2 = 0$) формулы (12) и (13) совпадают с выражениями, полученными в [18].

Анализ уравнения (7), а также выражений (12)–(14) позволяет сделать следующие основные выводы:

1. Перекрытие энергетических полос увеличивает значения параметров порядка Δ_n по сравнению со случаем одной энергетической зоны, а также увеличивает энергию связи двухчастичного состояния за счет дополнительного внутризонного и межзонных взаимодействий, кроме того, как результат увеличивает критическую концентрацию носителей, при которой происходит переход от сценария БКШ ($\mu > 0$) к сценарию конденсата бозе-типа ($\mu < 0$).

2. Зависимость параметра порядка Δ_n от концентрации носителей имеет корневой характер $\sqrt{\tilde{n}}$ аналогично зависимости плотности конденсата в идеальном бозе-газе только для систем с почти одинаковыми зонами. Если же зоны существенно разные, то концентрационная зависимость является более сложной благодаря существованию, кроме явной, еще и неявной зависимости от $\tilde{n}$ через отношение Δ_1/Δ_2 , определяемое уравнением (14) и величинами α_1 и α_2 (11).

3. ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ФУНКЦИОНАЛЬНОГО ИНТЕГРИРОВАНИЯ ДЛЯ ОПИСАНИЯ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ В ДВУХЗОННОЙ СИСТЕМЕ С МАЛОЙ ПЛОТНОСТЬЮ НОСИТЕЛЕЙ

Введем переменные Намбу

$$\Psi_n^+ = (\psi_{n\uparrow}^+, \psi_{n\downarrow}^+), \quad \Psi_n = \begin{pmatrix} \psi_{n\uparrow} \\ \psi_{n\downarrow}^+ \end{pmatrix}, \quad \hat{H}_{0n} = \begin{pmatrix} H_{0n} & 0 \\ 0 & H_{0n} \end{pmatrix}. \quad (15)$$

В этих переменных формула (1) приобретает вид

$$H = \sum_n \int dr \Psi_n^+(r) \hat{H}_{0n} \tau_3 \Psi_n(r) - \\ - \frac{1}{4} \sum_{nm} V_{nm} \int dr \Psi_n^+(r) \tau^+ \Psi_n(r) \Psi_m^+(r) \tau^- \Psi_m(r), \quad (16)$$

где $\tau^\pm = \tau_1 \pm i\tau_2$, τ_1, τ_2, τ_3 — матрицы Паули.

Представим статистическую сумму Z через функциональный интеграл по грассмановым переменным $\Psi_n(r, \tau)$:

$$ZZ_0 = \int d\Psi_1^+ d\Psi_1 d\Psi_2^+ d\Psi_2 \exp S, \\ Z_0 = \int d\Psi_1^+ d\Psi_1 d\Psi_2^+ d\Psi_2 \exp S_0, \quad (17)$$

где действие S определяется выражением

$$S = \int dr d\tau \sum_n \Psi_n^+(r, \tau) \frac{\partial}{\partial \tau} \hat{I} \Psi_n(r, \tau) - H = \\ = \int dr d\tau \sum_n \Psi_n^+(r, \tau) \left[-\frac{\partial}{\partial \tau} \hat{I} - \hat{H}_{0n} \tau_3 \right] \Psi_n(r, \tau) + \\ + \frac{1}{4} \int dr d\tau \sum_{nm} V_{nm} \Psi_n^+(r, \tau) \tau^+ \Psi_n(r, \tau) \Psi_m^+(r, \tau) \tau^- \Psi_m(r, \tau), \quad (18)$$

а $S = S_0$ при $V_{nm} = 0$, $\hat{I}$ — единичная матрица.

Введем вспомогательные скалярные поля

$$\Delta_n(r) = -\frac{1}{2} \sum_m V_{nm} \Psi_m^+ \tau^- \Psi_m \quad (19)$$

и дополнительное функциональное интегрирование по этим полям, представив (17) в виде

$$ZZ_0 = \int \left(\prod_{i=1,2} d\Delta_i^* d\Delta_i d\Psi_i^+ d\Psi_i \right) \exp \left(- \sum_{nm} V_{nm}^{-1} \int \Delta_n^*(r, \tau) \Delta_m(r, \tau) dr d\tau + S \right) \times \\ \times \left[\int \left(\prod_{i=1,2} d\Delta_i^* d\Delta_i \right) \exp \left(- \sum_{nm} V_{nm}^{-1} \int \Delta_n^*(r, \tau) \Delta_m(r, \tau) dr d\tau \right) \right]^{-1}, \quad (20)$$

где

$$V = \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} \end{pmatrix}. \quad (21)$$

В числителе этого выражения сделаем замену

$$\Delta_n \rightarrow \Delta_n + \frac{1}{2} \sum_m V_{nm} \Psi_m^+ \tau^- \Psi_m, \quad (22)$$

в результате чего с учетом определения S (18) получаем

$$ZZ_0 = C \int \left(\prod_{i=1,2} d\Delta_i^* d\Delta_i d\Psi_i^* d\Psi_i \right) \exp S_1, \quad (23)$$

где

$$\begin{aligned} C^{-1} &= \int \left(\prod_{i=1,2} d\Delta_i^* d\Delta_i \right) \exp \left(- \sum_{nm} V_{nm}^{-1} \int \Delta_n^*(r, \tau) \Delta_m(r, \tau) dr d\tau \right), \\ S_1 &= \sum_n \int dr d\tau \Psi_n^+(r, \tau) \left[-\frac{\partial}{\partial \tau} \hat{I} - \hat{H}_{0n} \tau_3 \right] \Psi_n(r, \tau) - \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_n \int dr d\tau [\Delta_n^*(r, \tau) \Psi_n^+(r, \tau) \tau^- \Psi_n(r, \tau) + \Psi_n^+(r, \tau) \tau^+ \Psi_n(r, \tau) \Delta_n(r, \tau)] - \\ &\quad - \sum_{nm} \int dr d\tau V_{nm}^{-1} \Delta_n^*(r, \tau) \Delta_m(r, \tau). \end{aligned} \quad (24)$$

Поскольку интеграл (23) с действием (24) гауссов по ферми-полям, можно выполнить интегрирование по этим полям. С этой целью воспользуемся соотношением [24]

$$\begin{aligned} \int d\Psi_n^+ d\Psi_n \exp \left(- \int dr d\tau \Psi_n^+ \widehat{M}_n \Psi_n \right) &= \\ &= \det \widehat{M}_n = \exp(\ln \det \widehat{M}_n) = \exp(\text{Tr} \ln \widehat{M}_n). \end{aligned} \quad (25)$$

На основании (23) и (25) имеем

$$\begin{aligned} Z &= C \int \left(\prod_{i=1,2} d\Delta_i^* d\Delta_i \right) \exp \left\{ - \sum_{nm} V_{nm}^{-1} \int \Delta_n^*(r, \tau) \Delta_m(r, \tau) dr d\tau + \right. \\ &\quad \left. + \text{Tr} \ln \widehat{M}_1 / \widehat{M}_1^0 + \text{Tr} \ln \widehat{M}_2 / \widehat{M}_2^0 \right\}, \end{aligned} \quad (26)$$

где

$$\ln \widehat{M}_n / \widehat{M}_n^0 = \ln(\hat{I} + \hat{G}_n \hat{\Delta}_n), \quad \text{a} \quad \widehat{M}_n^0 = \widehat{M}_n \quad \text{при} \quad \hat{\Delta}_n = 0, \quad (27)$$

$$\hat{G}_n = \begin{pmatrix} G_{+n} & 0 \\ 0 & G_{-n} \end{pmatrix}, \quad \hat{\Delta}_n = \begin{pmatrix} 0 & \Delta_n \\ \Delta_n^* & 0 \end{pmatrix}, \quad G_{\pm n}^{-1} = \frac{\partial}{\partial \tau} \pm H_{0n}. \quad (28)$$

Выполним в формуле (27) разложение по $\hat{\Delta}_n$ и воспользуемся определением

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\hat{G}_n \hat{\Delta}_n)^m &= \int dx_1 d\tau_1 \dots dx_m d\tau_m \text{Tr}' \hat{G}_n(x_1 \tau_1 x_2 \tau_2) \times \\ &\times \hat{\Delta}_n(x_2 \tau_2) \dots \hat{G}_n(x_m \tau_m x_1 \tau_1) \hat{\Delta}_n(x_1 \tau_1), \end{aligned} \quad (29)$$

здесь Tr – след в операторном смысле, а Tr' – в матричном.

Если в (27) ограничиться квадратичными членами по Δ_n^2 , то для статистической суммы получаем

$$Z = C \int \left(\prod_{i=1,2} d\Delta_i^* d\Delta_i \right) \exp\{-S_{\text{eff}}^{(2)}\}, \quad (30)$$

где

$$\begin{aligned} S_{\text{eff}}^{(2)} &= \sum_{nm} V_{nm}^{-1} \int \Delta_n^*(r, \tau) \Delta_m(r, \tau) dr d\tau + \sum_n \int dx_1 d\tau_1 dx_2 d\tau_2 \times \\ &\times \text{Tr}' [\hat{G}_n(x_1 \tau_1 x_2 \tau_2) \hat{\Delta}_n(x_2 \tau_2) \hat{G}_n(x_2 \tau_2 x_1 \tau_1) \hat{\Delta}_n(x_1 \tau_1)]. \end{aligned} \quad (31)$$

Переходя в этом выражении к $nk\Omega$ -представлению стандартным образом для двухзонных систем [21] и выполнив интегрирование по x_i и τ_i , приведем его к виду

$$S_{\text{eff}}^{(2)} = \frac{1}{\beta} \sum_{nm} \sum_{q\omega} \Delta_n^*(q, \omega) \{V_{nm}^{-1} + \Pi_n(q, \omega) \delta_{nm}\} \Delta_m(q, \omega), \quad (32)$$

где

$$\Pi_n(q, \omega) = \frac{1}{\beta} \sum_{k\Omega} G_{-n}(k\Omega) G_{+n}(k - q, \Omega - \omega) |\chi_n(k, k - q)|^2, \quad (33)$$

$$G_{\pm n}^{-1}(k\Omega) = -i\Omega \pm \frac{k^2}{2m_n} \mp \mu_n, \quad \chi_n(k, k - q) = \int_{(v_0)} dr u_{nk}^*(r) u_{nk-q}(r), \quad (34)$$

здесь v_0 – объем элементарной ячейки кристалла, u_{nk} – амплитуда функции Блоха.

В дальнейшем вычисление величины $\Pi_n(q, \omega)$ будем связывать с наличием ненулевого решения уравнения (7), определяющего энергию связанного состояния ε_b . Рассмотрим $T \ll |\varepsilon_b|$ и применим методику вычислений, предложенную в [17]. Подставив (34) в (33) и выполнив интегрирование по Ω , получим

$$\Pi_n(q, \omega) = - \sum_k \frac{|\chi_n(k, k - q)|^2}{\varepsilon_n(k + q) + \varepsilon_n(k) + 2\mu' - i\omega}, \quad \mu' = -\mu > 0. \quad (35)$$

В предыдущем разделе было показано, что в приближении среднего поля $\mu' = |\varepsilon_b|/2$. Предположим, что μ' лежит вблизи $|\varepsilon_b|/2$, и выполним в (35) разложение по ω , q и разности $(2\mu' - |\varepsilon_b|)$. На этом пути получаем

$$\Pi_n(q, \omega) = -\xi_n(|\varepsilon_b|) + \gamma_n \left[-i\omega + \frac{q^2}{2m_n^*} - \mu^* \right], \quad (36)$$

где

$$\begin{aligned} \gamma_n &= \frac{\partial \Pi_n}{\partial (2\mu')}, \quad \mu^* = -2\mu' + |\varepsilon_b|, \\ \frac{1}{m_n^*} &= \gamma_n^{-1} \frac{\partial^2 \Pi_n}{\partial q^2}, \quad \xi_n(|\varepsilon_b|) = \sum_k \frac{1}{2\varepsilon_n(k) + |\varepsilon_b|}. \end{aligned} \quad (37)$$

Подставим (32) в (30) и выполним функциональное интегрирование по вспомогательным бозе-полям. С этой целью сделаем подстановку $\Delta_1 = x_1 + iy_1$ и $\Delta_2 = x_2 + iy_2$ и приведем (30) к виду

$$Z = J/J_0, \quad (38)$$

где

$$\begin{aligned} J = \prod_{q\omega} \int dx_1 dx_2 dy_1 dy_2 \exp \Big\{ & -[(V_{11}^{-1} + \Pi_1)x_1^2 + (V_{22}^{-1} + \Pi_2)x_2^2 + 2V_{12}^{-1}x_1x_2] - \\ & -[(V_{11}^{-1} + \Pi_1)y_1^2 + (V_{22}^{-1} + \Pi_2)y_2^2 + 2V_{12}^{-1}y_1y_2] \Big\}, \end{aligned} \quad (39)$$

а $J_0 = J$ при $\Pi_n = 0$.

Приведем это выражение к каноническому виду ортогональным преобразованием [25]. В результате получаем

$$J = \prod_{q\omega} \int d\xi_1 d\xi_2 d\eta_1 d\eta_2 \exp[-\lambda_1 \xi_1^2 - \lambda_2 \xi_2^2 - \lambda_1 \eta_1^2 - \lambda_2 \eta_2^2] = \prod_{q\omega} \frac{\pi}{\lambda_1 \lambda_2}, \quad (40)$$

где

$$\begin{aligned} \lambda_1 \lambda_2 &= (V_{11}^{-1} + \Pi_1)(V_{22}^{-1} + \Pi_2) - V_{12}^{-2} = \\ &= (V_{11}V_{22} - V_{12}^2)^{-1} [1 + V_{11}\Pi_1 + V_{22}\Pi_2 + (V_{11}V_{22} - V_{12}^2)\Pi_1\Pi_2]. \end{aligned} \quad (41)$$

На основании формул (38)–(41) выражение для статистической суммы Z можно преобразовать к виду

$$\ln Z = - \sum_{q\omega} \ln \{ 1 + V_{11}\Pi_1(q, \omega) + V_{22}\Pi_2(q, \omega) + (V_{11}V_{22} - V_{12}^2)\Pi_1(q, \omega)\Pi_2(q, \omega) \}. \quad (42)$$

Подставим в эту формулу выражения для $\Pi_n(q, \omega)$ (36) и учтем уравнение (7), определяющее энергию связи ε_b . С точностью до членов, линейных по малому параметру $(2\mu' - |\varepsilon_b| - i\omega + q^2/2m_n^*)$, получаем

$$\begin{aligned} \ln Z = - \sum_{q\omega} \ln \Big\{ & \gamma_1 (2\mu' - |\varepsilon_b| - i\omega + q^2/2m_1^*) [V_{11} - (V_{11}V_{22} - V_{12}^2)\xi_2] + \\ & + \gamma_2 (2\mu' - |\varepsilon_b| - i\omega + q^2/2m_2^*) [V_{22} - (V_{11}V_{22} - V_{12}^2)\xi_1] \Big\}. \end{aligned} \quad (43)$$

Воспользуемся соотношениями, которые легко получить из системы уравнений (4),

$$\begin{aligned} V_{11} - (V_{11}V_{22} - V_{12}^2)\xi_2 &= V_{21}\Delta_1/\Delta_2, \\ V_{22} - (V_{11}V_{22} - V_{12}^2)\xi_1 &= V_{12}\Delta_2/\Delta_1. \end{aligned} \quad (44)$$

С учетом этих соотношений имеем

$$\ln Z = - \sum_{q\omega} \ln \left\{ \gamma_1 V_{21} \frac{\Delta_1}{\Delta_2} \left(-i\omega + \frac{q^2}{2m_1^*} - \mu^* \right) + \gamma_2 V_{12} \frac{\Delta_2}{\Delta_1} \left(-i\omega + \frac{q^2}{2m_2^*} - \mu^* \right) \right\}, \quad (45)$$

откуда для плотности числа частиц n получаем

$$\begin{aligned} n &= \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu^*} \ln Z = \frac{1}{\beta} \sum_{q\omega} \left(-i\omega + \frac{q^2}{2M^*} - \mu^* \right)^{-1} = \\ &= \sum_q \left(\exp \left[\beta \left(\frac{q^2}{2M^*} - \mu^* \right) \right] - 1 \right)^{-1}, \end{aligned} \quad (46)$$

где

$$(M^*)^{-1} = \frac{1}{m_1^*} \left(\gamma_1 \frac{\Delta_1}{\Delta_2} + \gamma_2 \frac{\Delta_2}{\Delta_1} \frac{m_1^*}{m_2^*} \right) \left(\gamma_1 \frac{\Delta_1}{\Delta_2} + \gamma_2 \frac{\Delta_2}{\Delta_1} \right)^{-1}, \quad (47)$$

здесь m_n^* определяется формулой (37), а Δ_1/Δ_2 — уравнением (14).

Таким образом, в рассмотренном выше приближении, когда ограничиваемся в полном действии S_{eff} только квадратичной частью, получаем идеальный бозе-газ с эффективной массой M^* и химическим потенциалом $\mu^* = |\varepsilon_b| - 2\mu'$.

В отличие от однозонного случая (17) здесь ε_b и μ' определяются на двухзонной основе (7), (8), (12), а M^* — формулой (37). Из последней следует, что в случае одинаковых эффективных масс ($m_1^* = m_2^*$) имеем $M^* = m_1^* = m_2^*$. Если же энергетическая зона с эффективной массой электрона m_1^* перекрывается с более широкой зоной ($m_1^* > m_2^*$), то в области малых концентраций носителей возникает более легкий идеальный бозе-газ ($M^* < m_1^*$), чем в случае сверхпроводника с одной энергетической зоной, эффективная масса электронов в которой равна m_1^* .

Система переходит в состояние бозе-конденсата в точке $\mu^* = 0$, и это является условием для определения температуры конденсации T_k . Выполнив в (46) суммирование по q при $\mu^* = 0$, получаем

$$T_k = a_D \frac{n^{2/D}}{M^*}, \quad (48)$$

где D – размерность системы,

$$a_2^{-1} = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \frac{dz}{\exp z - 1}, \quad a_3^{-1} = \left[\frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\sqrt{z} dz}{\exp z - 1} \right]^{2/3}. \quad (49)$$

Таким образом, получаем, что T_k зависит от концентрации носителей по закону $n^{2/D}$, как в случае однозонного сверхпроводника (17), только для систем с одинаковыми зонами, когда $M^* = m_1^* = m_2^*$. Если же система сильно анизотропна ($m_1^* \neq m_2^*$), то дополнительная неявная зависимость от концентрации носителей заряда содержится в M^* (47) через зависимость отношения Δ_1/Δ_2 от этого параметра (14). Из формул (43) и (44) вытекает, что наличие второй более широкой энергетической зоны может привести к увеличению температуры конденсации T_k по сравнению со случаем одной энергетической зоны.

Выражение эффективного действия (32) можно рассматривать как улучшенное приближение среднего поля, применимое также и при $T \neq 0$.

Теперь поставим перед собой задачу оценить вклад остаточного взаимодействия бозонов в эффективное действие. При этом следует учитывать члены порядка $\hat{\Delta}_n^4$, $\hat{\Delta}_n^6$ и т. д. в разложении (29). Для оценки мы ограничимся членами порядка $\hat{\Delta}_n^4$ и представим $S_{\text{eff}}^{(4)}$ в виде

$$S_{\text{eff}}^{(4)} = \frac{1}{4} \left\{ \text{Tr}(\hat{G}_1 \hat{\Delta}_1)^4 + \text{Tr}(\hat{G}_2 \hat{\Delta}_2)^4 \right\} = \frac{1}{\beta} \sum_{q\omega} \left\{ |\Delta_1|^4 \pi_1 + |\Delta_2|^4 \pi_2 \right\}, \quad (50)$$

где

$$\pi_n = \frac{1}{2\beta} \sum_{k\Omega} [G_{+n}(k\Omega)]^2 [G_{-n}(k\Omega)]^2 = \sum_k [2\varepsilon_n(k) + \varepsilon_b]^{-3}. \quad (51)$$

В этом приближении эффективное действие может быть представлено в виде

$$S_{\text{eff}} = S_{\text{eff}}^{(2)} + S_{\text{eff}}^{(4)}. \quad (52)$$

Сделаем перенормировку бозе-полей

$$\Delta_n = \left(\frac{\partial \Pi_n}{\partial (2\mu')} \right)^{-1/2} \varphi_n, \quad (53)$$

тогда

$$S_{\text{eff}}^{(2)} = \frac{1}{\beta} \sum_{nm} \sum_{q\omega} \varphi_n^*(q, \omega) \{ u_{nm}^{-1} + \Pi'_n(q, \omega) \delta_{nm} \} \varphi_m(q, \omega), \quad (54)$$

$$S_{\text{eff}}^{(4)} = \frac{1}{\beta} \sum_n \sum_{q\omega} [\varphi_n^*(q, \omega) \varphi_n(q, \omega)]^2 \pi'_n(q, \omega), \quad (55)$$

где

$$u_{nm}^{-1} = V_{nm}^{-1} \left(\frac{\partial \Pi_n}{\partial (2\mu')} \right)^{-1/2} \left(\frac{\partial \Pi_m}{\partial (2\mu')} \right)^{-1/2},$$

$$\pi'_n = \left(\frac{\partial \Pi_n}{\partial (2\mu')} \right)^{-2} \pi_n, \quad \Pi'_n = \left(\frac{\partial \Pi_n}{\partial (2\mu')} \right)^{-1} \Pi_n. \quad (56)$$

Расчет статистической суммы Z с помощью формулы (54), так же как и с помощью (32), приводит к формуле (46), которая определяет плотность невзаимодействующего бозе-газа. Для величины π'_n , определяющей потенциал двухчастичного взаимодействия в n -й зоне, на основании определений (56), (51) и (35) получаем

$$\pi'_n \sim m_n^{-D/2} (2\zeta_{n0} + |\varepsilon_b|)^{1-D/2}. \quad (57)$$

Эта величина существенно зависит от размерности системы и является малой только в трехмерном сверхпроводнике, что не отличается от однозонного случая [17]. Таким образом, отбрасывание остаточного взаимодействия, а это эквивалентно приближению среднего поля, оправдано только для трехмерной системы.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе мы исходим из гамильтониана (1), описывающего двухзонную систему и учитывающего внутризонные и межзонные взаимодействия, при которых пары переходят как целое из зоны в зону [1, 2].

Рассматриваем малые концентрации носителей, когда химический потенциал $\mu < 0$, что соответствует бозе-конденсации локальных пар.

Мы поставили перед собой следующие цели:

1. Рассмотреть двухзонный сверхпроводник с малой концентрацией носителей при $T = 0$ в приближении среднего поля. В предельном случае глубокой бозе-конденсации $\Delta_n^2/\mu^2 \ll 1$ при $T = 0$ найдены решения системы уравнений (4), определяющие параметры порядка Δ_n и μ . Показано, что перекрытие энергетических полос способствует сверхпроводимости, увеличивает критическую концентрацию носителей, при которой происходит переход от сценария БКШ к сценарию конденсации локальных пар. В случае различных зон (особенно при сильной анизотропии) зависимость величин Δ_n и μ от

концентрации носителей может существенно отличаться от случая однозонного сверхпроводника благодаря дополнительной неявной зависимости этих величин от $\tilde{n}$ через отношение Δ_1/Δ_2 .

Получено также уравнение для определения энергии связанного состояния ε_b на двухзонной основе (7) и установлено соотношение $\varepsilon_b = 2\mu$.

2. Развить метод функционального интегрирования для двухзонного сверхпроводника и на его основе улучшить приближение среднего поля, сделав его применимым при $T \neq 0$. Для этого вводим действие (19), учитывающее наличие внутризонного и межзонного взаимодействий, и дополнительные бозонные поля (20). В выражении для статистической суммы выполняем обобщенные на двухзонный случай преобразования Хаббарда–Стратоновича. После интегрирования по ферми-полям и разложения по $\hat{\Delta}_n$ с точностью до квадратичных членов приходим к эффективному действию (31), (32). Вычисление величин $\Pi_n(q, \omega)$ связываем с наличием в системе связанного состояния с энергией связи $|\varepsilon_b| \gg T$ и выполняем разложение $\Pi_n(q, \omega)$ по величинам ω , q^2 и $(|\varepsilon_b| - 2\mu)$. На этом пути приходим к статистической сумме (45) для идеального бозе-газа с перенормированным химическим потенциалом $\mu^* = |\varepsilon_b| - 2\mu$ и эффективной массой M^* (47).

Определена температура конденсации T_k (48). В случае различных энергетических зон происходит значительная перенормировка эффективной массы, связанная с наличием двух энергетических зон. При этом зависимость величины T_k от концентрации носителей определяется явно размерностью системы и неявно зависимостью M^* от концентрации носителей.

Вычисляем также вклад остаточного взаимодействия бозонов в эффективное действие. Этот вклад, как и в случае однозонного сверхпроводника [5], несуществен только в трехмерных системах. К таким системам можно применять приближение среднего поля, для систем же с пониженной размерностью оно оказывается недостаточным.

Как уже отмечалось во введении к данной работе, наряду с перекрытием энергетических полос важным фактором зонной структуры материалов ВТСП является наличие точек высокой симметрии в импульсном пространстве, которые приводят к особенностям в электронной плотности состояний (особенностям Ван-Хова) и к электронным топологическим переходам. Вид этих особенностей в значительной мере зависит от размерности системы.

Многочисленные теоретические и экспериментальные исследования подтверждают, что в квазидвумерных системах, какими являются большинство материалов ВТСП, возникает логарифмическая расходимость в плотности электронных состояний вблизи половинного заполнения энергетической зоны в точке, в которой поверхность Ферми пересекает границу зоны Бриллюэна. Такие особенности соответствуют изменению топологии поверхности Ферми от электронной к дырочной.

Учет этой особенности приводит к большим значениям температуры сверхпроводящего перехода T_c , аномалиям изотоп-эффекта и теплоемкости (обзор см. в [26]), а также к объяснению экспериментальных данных по температурной зависимости сопротивления и термо-ЭДС в материалах ВТСП [27] и др. Эксперименты по фотоэмиссии показали, что логарифмическая расходимость присуща соединению $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ [28], в

соединениях же $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ и $\text{Bi}_2\text{SrCaCu}_2\text{O}_8$ плотность электронных состояний может иметь более сильную расходимость $E^{-1/4}$ и $E^{-1/2}$, соответственно (E — энергия, отсчитанная от особенности Ван-Хова) и отвечает так называемой протяженной особенности Ван-Хова [29].

В ряде работ делается попытка объяснить ВТСП только на основе учета этих особенностей в плотности электронных состояний, полагая, что парное взаимодействие во всех соединениях универсально. В приближении слабой связи учет этих особенностей приводит к более сильному увеличению температуры сверхпроводящего перехода T_c , чем в случае логарифмической расходимости [29]. В случае же сильной связи картина изменяется существенным образом, приводя к существенному уменьшению роли протяженных особенностей Ван-Хова, которые благодаря неупругому рассеянию электронов размазываются [30].

Отметим, что влияние особенностей в плотности электронных состояний типа $E^{-1/2}$ на термодинамические и кинетические свойства сверхпроводников исследовались нами еще задолго до открытия ВТСП [31, 32]. В частности, показано, что рассеяние электронов на примесном потенциале уменьшает роль этой особенности в определении T_c . По-видимому, при исследовании свойств материалов ВТСП недостаточно рассматривать только наличие протяженных особенностей Ван-Хова, а следует подходить более комплексно, учитывая также перекрытие энергетических полос, пониженную концентрацию носителей и другие факторы, характерные для материалов ВТСП, тем более что двухзонная модель сама по себе в состоянии объяснить большое количество экспериментальных данных [3–11].

Список литературы

- [1] В.А. Москаленко. ФММ. 1959. Т. 8. С. 503.
- [2] H. Suhl, B.T. Matthias, L.R. Walker. Phys. Rev. Lett. 1959. V. 3. P. 552.
- [3] В.А. Москаленко, М.Е. Палистрант, В.М. Вакалюк. ФНТ. 1989. Т. 15. С. 378.
- [4] V.A. Moscalenko, M.E. Palistrant, V.M. Vackalyuk, I.V. Padure. Solid State Commun. 1989. V. 69. P. 747.
- [5] М.Е. Палистрант, В.М. Вакалюк. Сверхпроводимость: ФХТ. 1990. Т. 3. С. 1805.
- [6] В.А. Москаленко, М.Е. Палистрант, В.М. Вакалюк. УФН. 1991. Т. 161. С. 155.
- [7] М.Е. Palistrant, F.G. Kochorbe. Physica C. 1992. V. 194. P. 351.
- [8] М.Е. Палистрант, Ф.Г. Кочорбэ. Квантово-полевые методы исследования ВТСП и неупорядоченных систем. Кишинев: Штиинца, 1992. С. 3.
- [9] М.Г. Калалб, Ф.Г. Кочорбэ, М.Е. Палистрант. ТМФ. 1992. Т. 91. С. 483.
- [10] М.Е. Палистрант, М.Г. Калалб. Изв. АНМ. 1992. Т. 91. С. 483.
- [11] Ф.Г. Кочорбэ, М.Е. Палистрант. ЖЭТФ. 1993. Т. 104. С. 3084; ТМФ. 1993. Т. 96. С. 459.
- [12] N. Kristoffel, P. Konsin, T. Ord. Nuovo Cim. 1994. V. 17. P. 1.
- [13] M.R. Schaffroth. Phys. Rev. 1958. V. 111. P. 72.
- [14] K. Migake. Prog. Theor. Phys. 1983. V. 69. P. 1784.
- [15] M. Randeria, J.M. Duan, L.I. Shich. Phys. Rev. Lett. 1989. V. 62. P. 981; Phys. Rev. B. 1990. V. 41. P. 372.
- [16] R. Michas, J. Rannienger, S. Robaszkewicz. Rev. Mod. Phys. 1990. V. 62. P. 113.
- [17] А.А. Горбачевич, И.В. Токатлы. ЖЭТФ. 1993. Т. 103. № 2. С. 702.

- [18] Э.В. Горбар, В.П. Гусынин, В.М. Локтев. Сверхпроводимость: ФХТ. 1993. Т. 6. С. 483; ФНТ. 1993. Т. 19. С. 1171.
- [19] Э.В. Горбар, В.М. Локтев, С.Г. Шарапов. Препринт ИТФ-94-14Р. Киев: ИТФ, 1994.
- [20] A.J. Leggett. Modern Trends in the Theory of Condensed Matter. 1980. V. 115. P. 13.
- [21] В.А. Москаленко, Л.З. Кон, М.Е. Палистрант. Низкотемпературные свойства металлов с особенностями зонного спектра. Кишинев: Штиинца, 1989.
- [22] M.E. Palistrant, V.M. Vackalyuk, M.G. Calalb. Physica C. 1993. V. 208. P. 170.
- [23] М.Е. Палистрант. ТМФ. 1993. Т. 95. С. 101.
- [24] П.Н. Брусов, В.Н. Попов. Сверхтекучесть и коллективные свойства квантовых жидкостей. М.: Наука, 1988.
- [25] А.В. Свидзинский. Пространственно неоднородные задачи теории сверхпроводимости. М.: Наука, 1982.
- [26] R.S. Markiewicz. Int. J. Mod. Phys. 1991. V. 5. P. 2037.
- [27] М.Е. Палистрант, Ф.Г. Кочорбэ. Изв. АН Республики Молдова. 1991. № 2(5). С. 7.
- [28] K. Gofron, J.C. Campuzano, H. Ding et al.. Phys. Chem. Solids. 1993. V. 54. P. 1193.
- [29] A.A. Abrikosov, J.C. Campuzano, H. Gofron. Physica. C. 1993. V. 214. P. 73.
- [30] R.J. Radtke, M.R. Norman. Phys. Rev. B. 1994. V. 50. № 13. P. 9594.
- [31] М.Е. Палистрант, А.Т. Трифан. ФНТ. 1977. Т. 3. № 2. С. 241; Т. 3. № 8. С. 976.
- [32] М.Е. Палистрант, О.П. Беззуб. ФНТ. 1980. Т. 6. № 9. С. 1146; 1983. Т. 9. № 4. С. 357.

Поступила в редакцию 15.I.1996 г.

M. E. Palistrant

SUPERCONDUCTIVITY IN TWO-BAND SYSTEMS WITH A SMALL CONCENTRATION OF CARRIERS

We consider a superconductor with two features characteristic for high temperature materials: small concentration of charge carriers and overlapping of energy strips on Fermi surface. For $T = 0$ in the meanfield approximation the orderparameters Δ_n and chemical potential μ for bose-condensation of local pairs ($\mu < 0$) are found. An equation for the energy ε_b of the bound state as well as an equality $\varepsilon_b = 2\mu$ are obtained. Applying the path integral method to two-zone model the transition from Fermi to Bose excitations in the presence of a two-particle bound state is described. An expression of the Bose condensation temperature and the contribution of a residual Bose interaction between the systems of different dimensions are found.