

ВЛИЯНИЕ СИММЕТРИИ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ ВТСП НА ВОЛЬТ-АМПЕРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ *SIS*-КОНТАКТОВ

С. О. Лойко, Н. К. Федоров*, П. И. Арсеев

Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук
119991, Москва, Россия

Поступила в редакцию 19 июля 2001 г.

В рамках многозонной модели с анизотропным эффективным параметром порядка ВТСП рассчитаны вольт-амперные характеристики *SIS*-контактов. Результаты вычислений показывают, что вид ВАХ и плотности электронных состояний сильно меняется в зависимости от параметров задачи. Предложено теоретическое объяснение экспериментально наблюдаемого *s*-подобного поведения ВАХ *SIN*- и *SIS*-контактов сверхпроводников типа BSCCO. Исследована зависимость асимметрии сверхпроводящих пиков от взаимного расположения зон. Обсуждено отличие полученных результатов от однозонных моделей с *s*- и *d*-симметриями параметра порядка.

PACS: 74.50.+r, 74.72.-h

Отсутствие единого понимания механизма спаривания в высокотемпературных сверхпроводниках делает трудной интерпретацию многочисленных экспериментальных данных, в том числе результатов туннельных экспериментов. Ситуацию также сильно затрудняет сложность кристаллической структуры ВТСП-соединений. Особенности туннельных характеристик в большинстве случаев с трудом поддаются объяснению в рамках стандартной модели Бардина–Купера–Шриффера (БКШ). Среди таких особенностей можно выделить разнообразную подщелевую структуру: от линейной *d*-типа до почти плоской *s*-типа [1], асимметрию сверхпроводящих пиков на краю щели [2, 3], нетривиальное поведение туннельной плотности состояний *SIN*-контактов и вольт-амперных характеристик *SIS*-контактов вне щелевой области. В ряде экспериментальных работ [4, 5] получены сильно подавленные в подщелевой области (dI/dV)-характеристики с очень узкими, свойственными сверхпроводникам *s*-типа, пиками, что, на первый взгляд, плохо связывается с имеющимися данными о достаточно сильной анизотропии параметра порядка в плоскости CuO_2 [6].

В настоящее время существует множество теоретических моделей, направленных на объяснение совокупности экспериментальных данных. Среди них

модели, основанные на различных особенностях зонной структуры, например, учитывающие близость особенностей Ван Хофа к химическому потенциалу [7, 8], а также на подборе симметрии параметра порядка [8] и на свойствах туннельного матричного элемента [9] в однозонной схеме БКШ. Привлекался даже слейв-бозонный подход [10] для объяснения асимметрии сверхпроводящих пиков и неоднородности плотности электронных состояний в нормальном состоянии. Серия работ [11–14] посвящена учету неупругого рассеяния, в том числе неупругого рассеяния на антиферромагнитных спиновых флуктуациях. Результаты теоретических исследований показывают, что учет сингулярностей Ван Хофа и использование ($s + d$)-симметрии параметра порядка, видимо, необходимы для адекватного объяснения большинства экспериментально наблюдаемых свойств туннельной проводимости ВТСП. В связи с этим важную роль играет экспериментальное исследование свойств электронного спектра высокотемпературных сверхпроводников в нормальном состоянии.

На наш взгляд, именно учет кристаллической структуры позволяет объяснить ряд экспериментальных результатов туннельных измерений в высокотемпературных сверхпроводниках. Целью данной статьи является объяснение особенностей туннельных характеристик в рамках модели с анизо-

*E-mail: fedorov@lpi.ru

тропным эффективным параметром порядка, основанной исключительно на свойствах электронного спектра ВТСП [15]. Спектр рассматриваемой задачи модельно соответствует зонной структуре соединений типа BiSrCaCuO (BSCCO). Существенным моментом данного подхода является то, что затратное электрон-электронное взаимодействие, приводящее к спариванию, считается изотропным в CuO_2 -плоскости. Анизотропия параметра порядка и спектра возбуждений определяется симметрией свойствами кристаллической решетки. Проведенные расчеты свидетельствуют о том, что многие особенности туннельных характеристик, свойственные ВТСП-соединениям, объясняются в рамках достаточно универсального подхода, описанного ниже.

Исследуем задачу о влиянии симметрии затраточных зон сверхпроводника на вольт-амперные характеристики SIS -контактов. Рассмотрим электронную систему CuO_2 -плоскости с модельным гамильтонианом следующего вида:

$$\begin{aligned}
 H = & \varepsilon_{z^2} \sum_{i,\sigma} c_{i,\sigma}^+ c_{i,\sigma} + \varepsilon_d \sum_{i,\sigma} d_{i,\sigma}^+ d_{i,\sigma} + \\
 & + \varepsilon_p \sum_{i,\sigma} (p_x^+(i,\sigma) p_x(i,\sigma) + p_y^+(i,\sigma) p_y(i,\sigma)) + \\
 & + \sum_{i,j,\sigma} (t_{z^2-p_x}^{i,j} c_{i,\sigma}^+ p_x(j,\sigma) + \text{H.c.}) + \\
 & + \sum_{i,j,\sigma} (t_{z^2-p_y}^{i,j} c_{i,\sigma}^+ p_y(j,\sigma) + \text{H.c.}) + \\
 & + \sum_{i,j,\sigma} (t_{d-p_x}^{i,j} d_{i,\sigma}^+ p_x(j,\sigma) + \text{H.c.}) + \\
 & + \sum_{i,j,\sigma} (t_{d-p_y}^{i,j} d_{i,\sigma}^+ p_y(j,\sigma) + \text{H.c.}) + \\
 & + U_{z^2} \sum_i c_{i\downarrow}^+ c_{i\downarrow} c_{i\uparrow}^+ c_{i\uparrow} + U_d \sum_i d_{i\downarrow}^+ d_{i\downarrow} d_{i\uparrow}^+ d_{i\uparrow}. \quad (1)
 \end{aligned}$$

Здесь $c_{i,\sigma}^+$ и $d_{i,\sigma}^+$ — операторы рождения электронов со спином σ на d_{z^2} - и $d_{x^2-y^2}$ -орбиталях i -го узла меди; $p_x^+(i,\sigma)$ и $p_y^+(i,\sigma)$ — операторы рождения электронов со спином σ на p_x - и p_y -орбиталях i -го узла кислорода (рис. 1); ε_p , ε_d и ε_{z^2} — энергии, соответственно, p -уровней кислорода, $d_{x^2-y^2}$ - и d_{z^2} -уровней меди, отсчитываемые от химического потенциала ($\mu = 0$); $t_{z^2-p_x}^{i,j} = t_{z^2-p_y}^{i,j} \equiv t_{z^2-p}$ и $t_{d-p_x}^{i,j} = -t_{d-p_y}^{i,j} \equiv t_{d-p}$ — матричные элементы одночастичных переходов между d_{z^2} - и $d_{x^2-y^2}$ -орбиталями меди и p -орбиталями кислорода. Для простоты предполагается, что сверхпроводимость обусловлена изотропным притяжением электронов $U_{z^2} < 0$ на d_{z^2} -орбиталях. Следует отметить, что более сложный учет изотропного сверхпроводящего

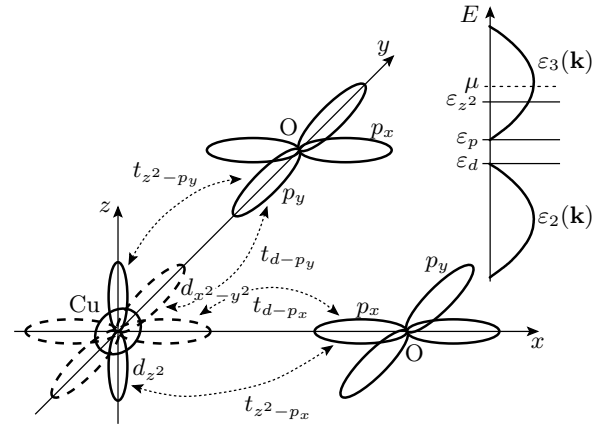


Рис. 1. Схематическое изображение атомных орбиталей в CuO_2 -плоскости и переходов между ними, включенных в гамильтониан (1). На вставке показано схематическое расположение зон и уровней, соответствующее гамильтониану (4)

взаимодействия не привел бы к существенным отличиям от рассматриваемого случая. Предполагается также наличие изотропного эффективного электрон-электронного взаимодействия U_d на $d_{x^2-y^2}$ -орбиталях меди.

Переходя в \mathbf{k} -представление и вводя новые операторы $a_{\mathbf{k},\sigma}^{(\beta)}$ ($\beta = 1, 2, 3$) согласно формулам

$$\begin{aligned}
 d_{\mathbf{k},\sigma} &= C_d^{(1)} a_{\mathbf{k},\sigma}^{(1)} + C_d^{(2)} a_{\mathbf{k},\sigma}^{(2)} + C_d^{(3)} a_{\mathbf{k},\sigma}^{(3)}, \\
 p_x(\mathbf{k},\sigma) &= C_{p_x}^{(1)} a_{\mathbf{k},\sigma}^{(1)} + C_{p_x}^{(2)} a_{\mathbf{k},\sigma}^{(2)} + C_{p_x}^{(3)} a_{\mathbf{k},\sigma}^{(3)}, \quad (2) \\
 p_y(\mathbf{k},\sigma) &= C_{p_y}^{(1)} a_{\mathbf{k},\sigma}^{(1)} + C_{p_y}^{(2)} a_{\mathbf{k},\sigma}^{(2)} + C_{p_y}^{(3)} a_{\mathbf{k},\sigma}^{(3)},
 \end{aligned}$$

диагонализуем часть гамильтониана, описывающую одночастичные переходы между $d_{x^2-y^2}$ -орбиталями меди и p -орбиталями кислорода. Коэффициенты C_d и $C_{p_x(p_y)}$ в формулах (2) имеют следующий вид:

$$\begin{aligned}
 C_d^{(1)} &= 0, \\
 C_d^{(\alpha)} &= \frac{\varepsilon_p - \varepsilon_\alpha}{\sqrt{(\varepsilon_p - \varepsilon_\alpha)^2 + t_x^2 + t_y^2}}, \\
 C_{p_x(p_y)}^{(1)} &= \frac{it_{y(x)}}{\sqrt{t_x^2 + t_y^2}}, \\
 C_{p_x(p_y)}^{(\alpha)} &= \pm \frac{t_{x(y)}}{\sqrt{(\varepsilon_p - \varepsilon_\alpha)^2 + t_x^2 + t_y^2}},
 \end{aligned}$$

где $\alpha = 2, 3$ и

$$t_{x(y)} = t_{d-p} \sin \frac{k_{x(y)}}{2}.$$

Аналогично, матричный элемент перехода между d_{z^2} -орбиталями меди и p -орбиталями кислорода в \mathbf{k} -представлении записывается в виде

$$\tilde{t}_{x(y)} = t_{z^2-p} \sin \frac{k_{x(y)}}{2}.$$

Поскольку матричные элементы $t_{d-p}^{i,j}$ и $t_{z^2-p}^{i,j}$ зависят от индексов разных узлов, величины $t_{x(y)}$ и $\tilde{t}_{x(y)}$ должны зависеть от \mathbf{k} . Операторы $a_{\mathbf{k},\sigma}^{(1)+}$, $a_{\mathbf{k},\sigma}^{(2)+}$ и $a_{\mathbf{k},\sigma}^{(3)+}$ — операторы рождения электронов со спином σ и квазиимпульсом \mathbf{k} в зонах, образованных гибридованными p -орбиталями кислорода и $d_{x^2-y^2}$ -орбиталями меди, с законами дисперсии

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= \varepsilon_p, \\ \varepsilon_{2(3)}(\mathbf{k}) &= \frac{\varepsilon_p + \varepsilon_d}{2} \mp \\ &\mp \frac{1}{2} \sqrt{(\varepsilon_p - \varepsilon_d)^2 + 4(t_x^2(\mathbf{k}) + t_y^2(\mathbf{k}))}. \end{aligned} \quad (3)$$

В результате преобразования (2) гамильтониан системы в приближении среднего поля принимает вид

$$\begin{aligned} H &= \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon_{z^2} c_{\mathbf{k},\sigma}^+ c_{\mathbf{k},\sigma} + \sum_{\mathbf{k},\sigma,\beta} \varepsilon_\beta a_{\mathbf{k},\sigma}^{(\beta)+} a_{\mathbf{k},\sigma}^{(\beta)} + \\ &+ \sum_{\mathbf{k},\sigma,\beta} (W_\beta(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k},\sigma}^+ a_{\mathbf{k},\sigma}^{(\beta)} + \text{H.c.}) - \\ &- \sum_{\mathbf{k}} (\Delta_{z^2} c_{-\mathbf{k},\downarrow}^+ c_{\mathbf{k},\uparrow}^+ + \text{H.c.}) - \\ &- \sum_{\mathbf{k},\beta,\gamma} (\Delta_{\beta\gamma} a_{-\mathbf{k},\downarrow}^{(\beta)+} a_{\mathbf{k},\uparrow}^{(\gamma)+} + \text{H.c.}), \end{aligned} \quad (4)$$

где

$$\begin{aligned} W_1(\mathbf{k}) &= -\frac{\tilde{t}_x t_y + \tilde{t}_y t_x}{\sqrt{t_x^2 + t_y^2}}, \\ W_\alpha(\mathbf{k}) &= \frac{t_y \tilde{t}_y - t_x \tilde{t}_x}{\sqrt{(\varepsilon_p - \varepsilon_\alpha)^2 + t_x^2 + t_y^2}}, \quad \alpha = 2, 3, \end{aligned} \quad (5)$$

и введены новые параметры порядка

$$\Delta_{\beta\gamma}(\mathbf{k}) = C_d^{(\beta)}(\mathbf{k}) C_d^{(\gamma)}(-\mathbf{k}) \Delta_d, \quad \beta, \gamma = 1, 2, 3, \quad (6)$$

в которых

$$\begin{aligned} \Delta_d &= -\frac{1}{N} U_d \sum_{\mathbf{k}} \langle d_{\mathbf{k},\uparrow} d_{-\mathbf{k},\downarrow} \rangle, \\ \Delta_{z^2} &= -\frac{1}{N} U_{z^2} \sum_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k},\uparrow} c_{-\mathbf{k},\downarrow} \rangle. \end{aligned} \quad (7)$$

Схематически расположение зон, соответствующее гамильтониану (4), показано на вставке к рис. 1. В рамках реалистичного описания соединений типа BSCCO [16] предполагается, что химический потенциал μ и z^2 -уровень меди расположены вблизи середины верхней зоны $\varepsilon_3(\mathbf{k})$. Остальные параметры задачи выбраны таким образом, что

$$\varepsilon_d < \varepsilon_p, \quad \varepsilon_p - \varepsilon_d \ll t_{d-p},$$

$$t_{z^2-p} \ll |\varepsilon_d|, |\varepsilon_p|, \quad |\Delta_d| < \Delta_{z^2} \ll |\varepsilon_d|, |\varepsilon_p|.$$

Поскольку в дальнейшем нас будет интересовать область энергий вблизи химического потенциала (порядка нескольких Δ_{z^2}), учитывая соотношения между параметрами, мы можем исключить из рассмотрения две нижние зоны $\varepsilon_1(\mathbf{k})$ и $\varepsilon_2(\mathbf{k})$ и ограничиться учетом только верхней зоны $\varepsilon_3(\mathbf{k})$. Помимо включенных в гамильтониан (1) одночастичных переходов, можно учесть дополнительную гибридизацию d_{z^2} -орбитали с окружающими CuO_2 -плоскость атомами, в том числе с BiO- и SrO- комплексами соединений типа BSCCO, а также прямые переходы между d_{z^2} -орбиталями разных атомов меди. В связи с этим будет предполагаться, что затравочная z^2 -зона обладает законом дисперсии

$$\varepsilon_{z^2}(\mathbf{k}) = \varepsilon_{z^2} + t_{z^2}(\cos k_x + \cos k_y)$$

с шириной, много меньшей, чем для зон $\varepsilon_2(\mathbf{k})$ и $\varepsilon_3(\mathbf{k})$. Таким образом, в выбранном приближении исходная задача сводится к двухзонной модели, в которой рассматриваются затравочная зона $\varepsilon_{z^2}(\mathbf{k})$ и зона $\varepsilon_3(\mathbf{k})$ с одночастичной гибридизацией $W_3(\mathbf{k})$ между ними и параметрами порядка Δ_{z^2} и $\Delta_{33}(\mathbf{k})$ в них.

Введем следующие временные функции Грина:

$$G_{z^2}(\mathbf{k}; t, t') = -i \langle T c_{\mathbf{k},\sigma}(t) c_{\mathbf{k},\sigma}^+(t') \rangle,$$

$$g_{\sigma\sigma'} F_{z^2}^+(\mathbf{k}; t, t') = -i \langle T c_{-\mathbf{k},\sigma}^+(t) c_{\mathbf{k},\sigma'}^+(t') \rangle,$$

$$G_{z^2,3}(\mathbf{k}; t, t') = -i \langle T c_{\mathbf{k},\sigma}(t) a_{\mathbf{k},\sigma}^{(3)+}(t') \rangle,$$

$$g_{\sigma\sigma'} F_{z^2,3}^+(\mathbf{k}; t, t') = -i \langle T a_{-\mathbf{k},\sigma}^{(3)+}(t) c_{\mathbf{k},\sigma'}^+(t') \rangle,$$

где $\hat{g} = i\hat{\sigma}^y$. Используя уравнения движения для операторов $a_{\mathbf{k},\sigma}^{(3)}$ и $c_{\mathbf{k},\sigma}$ и перейдя в частотное представление, получим следующую систему уравнений для z^2 -функций Грина:

$$\begin{aligned} (\omega - \varepsilon_{z^2}(\mathbf{k})) G_{z^2}(\mathbf{k}, \omega) - \\ - W_3(\mathbf{k}) G_{z^2,3}^+(\mathbf{k}, \omega) + \Delta_{z^2} F_{z^2}^+(\mathbf{k}, \omega) = 1, \end{aligned} \quad (8a)$$

$$(\omega - \varepsilon_3(\mathbf{k})) G_{z^2,3}^+(\mathbf{k}, \omega) - W_3(\mathbf{k}) G_{z^2}(\mathbf{k}, \omega) + \Delta_3(\mathbf{k}) F_{z^2,3}^+(\mathbf{k}, \omega) = 0, \quad (8b)$$

$$(\omega + \varepsilon_{z^2}(\mathbf{k})) F_{z^2}^+(\mathbf{k}, \omega) + W_3(\mathbf{k}) F_{z^2,3}^+(\mathbf{k}, \omega) + \Delta_{z^2}^+ G_{z^2}(\mathbf{k}, \omega) = 0, \quad (8c)$$

$$(\omega + \varepsilon_3(\mathbf{k})) F_{z^2,3}^+(\mathbf{k}, \omega) + W_3(\mathbf{k}) F_{z^2}^+(\mathbf{k}, \omega) + \Delta_3^+(\mathbf{k}) G_{z^2,3}^+(\mathbf{k}, \omega) = 0, \quad (8d)$$

где

$$\Delta_3(\mathbf{k}) \equiv \Delta_{33}(\mathbf{k}) = \Delta_d \frac{(\varepsilon_p - \varepsilon_3)^2}{(\varepsilon_p - \varepsilon_3)^2 + t_x^2 + t_y^2}. \quad (9)$$

В дальнейшем будет использоваться плотность состояний квазичастиц в z^2 -зоне

$$N(\omega) = -\frac{1}{\pi} \int \text{Im} G_{z^2}^R(\omega, \mathbf{k}) \frac{d^3k}{(2\pi)^3}. \quad (10)$$

Запаздывающая функция Грина определяется решением системы уравнений (8) и имеет следующий вид:

$$G_{z^2}^R(\omega, \mathbf{k}) = \frac{u_{-, \mathbf{k}}^2}{\omega - E_-(\mathbf{k}) + i0} + \frac{u_{+, \mathbf{k}}^2}{\omega - E_+(\mathbf{k}) + i0} + \frac{v_{-, \mathbf{k}}^2}{\omega + E_-(\mathbf{k}) + i0} + \frac{v_{+, \mathbf{k}}^2}{\omega + E_+(\mathbf{k}) + i0},$$

где факторы когерентности

$$u_{\pm, \mathbf{k}}^2 = \mp \frac{(E_{\pm} + \varepsilon_{z^2})(-E_{\pm}^2 + \varepsilon_3^2 + \Delta_3^2) + W_3^2(E_{\pm} - \varepsilon_3)}{2E_{\pm}(E_{\pm}^2 - E_{\mp}^2)},$$

$$v_{\pm, \mathbf{k}}^2 = \mp \frac{(E_{\pm} - \varepsilon_{z^2})(-E_{\pm}^2 + \varepsilon_3^2 + \Delta_3^2) + W_3^2(E_{\pm} + \varepsilon_3)}{2E_{\pm}(E_{\pm}^2 - E_{\mp}^2)}.$$

Законы дисперсии двух ветвей спектра возбуждений имеют вид

$$E_{\pm}^2(\mathbf{k}) = [\varepsilon_{z^2}^2(\mathbf{k}) + \Delta_{z^2}^2 + \varepsilon_3^2(\mathbf{k}) + \Delta_3^2(\mathbf{k}) + 2W_3^2(\mathbf{k})] / 2 \pm \{(\varepsilon_{z^2}^2(\mathbf{k}) + \Delta_{z^2}^2 - \varepsilon_3^2(\mathbf{k}) - \Delta_3^2(\mathbf{k}))^2 + 4W_3^2(\mathbf{k})[(\Delta_{z^2} - \Delta_3(\mathbf{k}))^2 + (\varepsilon_{z^2}(\mathbf{k}) + \varepsilon_3(\mathbf{k}))^2]\}^{1/2} / 2. \quad (11)$$

Система уравнений (8a)–(8d) может быть сведена к системе из двух уравнений на функции Грина G_{z^2} и F_{z^2} с эффективным параметром порядка, определяемым формулой

$$\Delta_{z^2}(\mathbf{k}) = \frac{\Delta_3(\mathbf{k})W_3^2(\mathbf{k})}{\varepsilon_3^2(\mathbf{k}) + \Delta_3^2(\mathbf{k})} + \Delta_{z^2}. \quad (12)$$

Знак параметра порядка $\Delta_3(\mathbf{k})$ из (9) определяется знаком аномального среднего Δ_d из (7), который в зависимости от характера взаимодействия U_d (отталкивание или притяжение) может быть положительным или отрицательным. Величина $\Delta_d = 0$, если $U_d = 0$ или при $U_d > U_d^{crit} > 0$, где U_d^{crit} — некоторое критическое значение отталкивания на $d_{x^2-y^2}$ -орбитали меди, при котором сверхпроводимость в системе оказывается полностью подавленной. Из (12) видно, что в случае не равного нулю взаимодействия U_d на $d_{x^2-y^2}$ -орбитали ($\Delta_d \neq 0$) параметр порядка зависит от квазиимпульса, и в случае отталкивания, $\Delta_3(\mathbf{k})/\Delta_{z^2} < 0$ ($U_d > 0$), величина $\Delta_{z^2}(\mathbf{k})$ меняет знак.

Рассмотренный подход объясняет сильную анизотропию параметра порядка как следствие симметричных свойств одночастичного матричного элемента межзонной гибридизации $W_3(\mathbf{k})$ [15], который из-за различия между типами симметрии затравочных зон имеет нули вдоль диагоналей зоны Бриллюэна. Ветвь спектра возбуждений $E_-(\mathbf{k})$ в этом случае обращается в нуль в точках [6], находящихся на линиях в \mathbf{k} -пространстве, на которых эффективный параметр порядка $\Delta_{z^2}(\mathbf{k})$ равен нулю. Следует отметить, что затравочное взаимодействие считалось изотропным, т. е. рассмотренный эффект не зависит от природы механизма спаривания. Кроме того, рассмотренный подход не требует сильной анизотропии спектра и, следовательно, может быть применен к различным типам высокотемпературных сверхпроводников. Модель, предложенная в работе [17], также приводит к формулам вида (11), (12), однако она основана на экзотическом условии изменения знака взаимодействия на различных участках поверхности Ферми.

Диагонализация одночастичной части гамильтониана (1) приводит к задаче с анизотропным притяжением в зонах. При этом эффективные параметры порядка в зонах могут иметь нули, но не обладать чистой d - или $(s+d)$ -симметрией, поскольку их анизотропия определяется зонными представлениями пространственной группы симметрии решетки [15, 18, 19].

Сформулированная модель анизотропии параметра порядка позволяет построить (dI/dV) -характеристики SIS -контактов сверхпроводников типа BSCCO. С учетом кристаллической структуры этих соединений будет предполагаться, что туннелирование вдоль оси c идет в основном через d_{z^2} -орбитали меди CuO_2 -плоскости (и апикальный кислород, не включенный в явном виде в рассматриваемую модель). В контактах типа разломных матричный эле-

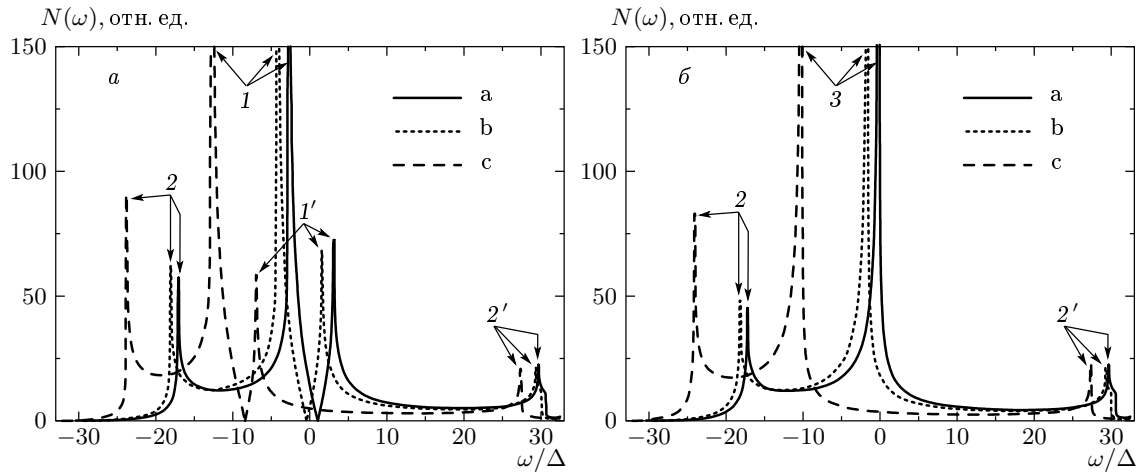


Рис. 2. Нормальная плотность состояний в z^2 -зоне: $t_{z^2} = 1.5$ (а), 0 (б) при $\varepsilon_{z^2} = 0$ (а), -1.5 (б), -10 (с). Пики 1 и 1' связаны с особенностями Ван Хова затравочной z^2 -зоны, пики 2 и 2' образованы особенностями Ван Хова $\varepsilon_3(\mathbf{k})$ -зоны, пики 3 связаны с уровнем ε_{z^2}

мент тунnelирования будет считаться не зависящим от импульса ($T_{\mathbf{k}\mathbf{p}} = T = \text{const}$) в силу случайности образования связей между d_{z^2} -орбиталями по обе стороны контакта. Таким образом, процесс тунnelирования между двумя сверхпроводниками (слоями CuO_2) рассматривается как проходящий через совокупность точечных контактов.

Выражение для зависимости квазичастичного туннельного тока от приложенного к контакту напряжения в этом случае принимает стандартный вид:

$$I(V) = 4e|T|^2 \int_{-\infty}^{\infty} [n(\omega) - n(\omega - eV)] \times N(\omega)N(\omega - eV) d\omega, \quad (13)$$

где

$$n(\omega) = \left[\exp\left(-\frac{\omega}{T}\right) + 1 \right]^{-1}$$

— фермиевская функция распределения, $N(\omega)$ определяется формулой (10). Все расчеты проведены для температуры $T = 0$. Существенный момент настоящего подхода состоит в том, что $N(\omega)$ не является средней плотностью состояний в зоне проводимости (как в однозонной модели БКШ), а представляет собой парциальную плотность на d_{z^2} -орбиталях.

Для нахождения плотности состояний $N(\omega)$ и туннельной проводимости dI/dV в соответствии с выбранным приближением были использованы значения параметров модели сильной связи, соответствующие расчетам зонной структуры ВТСП [20].

Если все параметры измеряются в единицах Δ_{z^2} и положение уровней отсчитывается от химического потенциала, то $t_{d-p} = 75$, $t_{z^2-p} = 15$, $\varepsilon_d = -75$, $\varepsilon_p = -50$. Во всех расчетах предполагалось наличие конечной константы релаксации $\gamma = 0.05$. Параметр, определяющий ширину затравочной $\varepsilon_{z^2}(\mathbf{k})$ -зоны, равен $t_{z^2} = 1.5$.

При выбранных значениях параметров было рассчитано поведение характеристик $N(\omega)$ и dI/dV в зависимости от величины взаимодействия между электронами на $d_{x^2-y^2}$ -орбиталях меди и положения центра (ε_{z^2}) затравочной z^2 -зоны относительно химического потенциала (рис. 2–4). Было проведено сравнение полученных зависимостей с модельными однозонными случаями s - и d -симметрии параметра порядка (соответственно $\Delta = \text{const}$ и $\Delta \propto (\cos k_x - \cos k_y)$).

На рис. 2а представлены кривые $N(\omega)$, рассчитанные в нормальном состоянии ($\Delta_{z^2} = 0$). На них видны раздвоенные пики, связанные с особенностями Ван Хова затравочной $\varepsilon_{z^2}(\mathbf{k})$ -зоны при различных положениях ее центра относительно химического потенциала, и расположенные за ними пики, образованные сингулярностями зоны $\varepsilon_3(\mathbf{k})$. На рис. 2б представлены те же зависимости с заменой спектра $\varepsilon_{z^2}(\mathbf{k})$ на бездисперсный уровень ($t_{z^2} = 0$).

На рис. 3а представлены зависимости $N(\omega)$ в сверхпроводящем состоянии для случая, когда z^2 -зона находится вдали от химического потенциала ($\varepsilon_{z^2} = -10$). Как видно из рисунка, если имеет место отталкивание между электронами на $d_{x^2-y^2}$ -орбиталях ($\Delta_d = -0.5$), плотность квазичас-

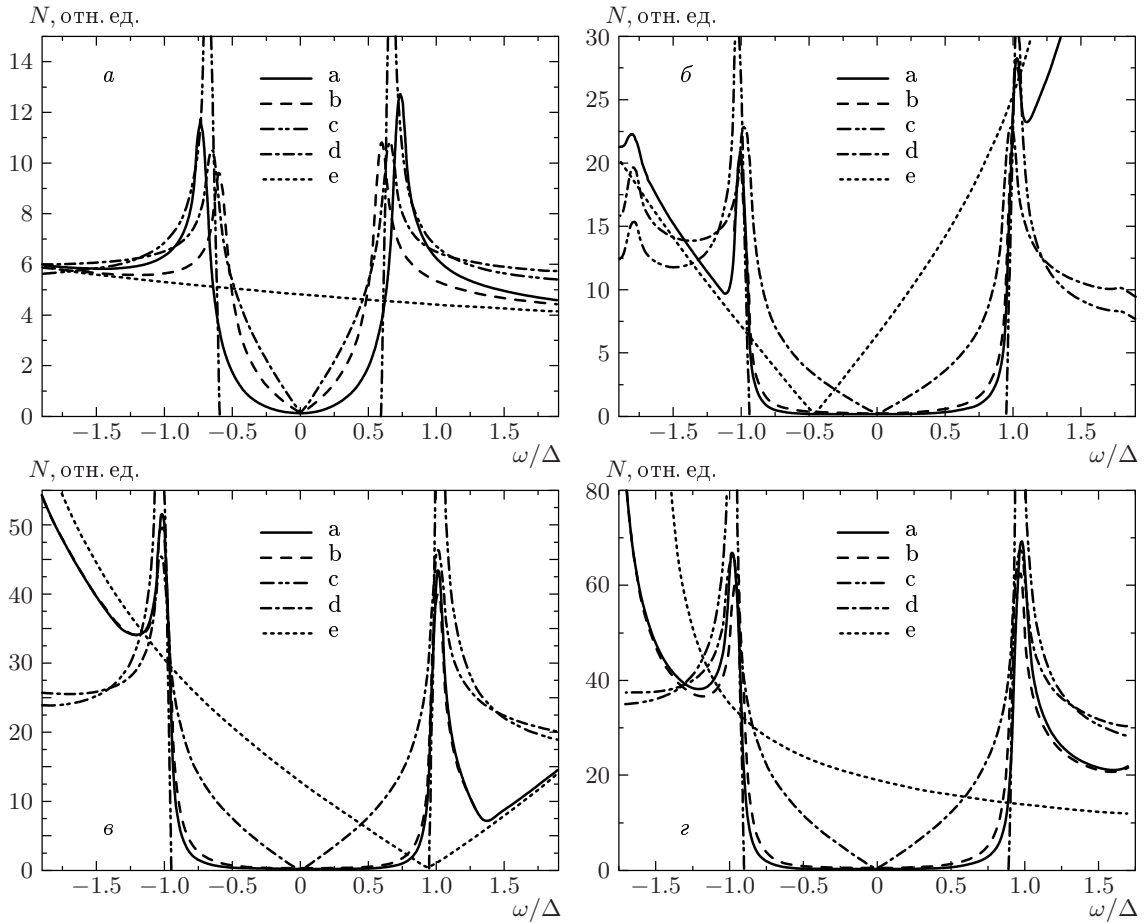


Рис. 3. Плотность состояний в нормальном и сверхпроводящем случаях в z^2 -зоне: *a* — $\epsilon_{z2} = -10$, $t_{z2} = 1.5$, *б* — $\epsilon_{z2} = -1.5$, $t_{z2} = 1.5$, *в* — $\epsilon_{z2} = 0$, $t_{z2} = 1.5$, *г* — $\epsilon_{z2} = -1.5$, $t_{z2} = 0$. Приведены зависимости: *a* — без учета взаимодействия на $d_{x^2-y^2}$ -орбитали ($U_d = 0$), *б* — с учетом отталкивания на $d_{x^2-y^2}$ -орбитали ($U_d > 0$), *с* — в модели с s -симметрией параметра порядка, *d* — в модели с d -симметрией параметра порядка, *e* — нормальная плотность состояний

тиц подобна рассчитанной в модели с d -симметрией параметра порядка, в частности, вблизи $\omega = 0$ она линейно зависит от ω . Если нет взаимодействия на $d_{x^2-y^2}$ -орбитали, расстояние между сверхпроводящими пиками и их высота увеличиваются. Аналитические оценки показывают, что при очень малых частотах $N(\omega) \propto \omega^{3/2}$. Результаты такого типа можно получить и в однозонной модели со сложным спектром и эффективным параметром порядка определенной симметрии. Как уже было замечено ранее, диагонализация одночастичной части гамильтониана (1) с учетом сделанных выше приближений приводит к однозонной модели с анизотропным спариванием. В таком случае симметрия соответствующего параметра порядка может быть аппроксимирована $(s + d)$ -типом симметрии.

Если центр затравочной z^2 -зоны лежит близко к химическому потенциалу (рис. 3б, в), различие кривых *a* и *b* (без учета и с учетом отталкивания) исчезает, что связано с преобладанием влияния особенностей Ван Хофа на масштабах энергий порядка Δ_{z2} . В обоих случаях поведение плотности квазичастиц становится s -подобным. Рассчитанная плотность состояний демонстрирует асимметрию пиков, связанную с расположением особенностей Ван Хофа в нормальной плотности состояний (рис. 2). Ближайшая к химическому потенциалу особенность ван Хофа увеличивает высоту соответствующего пика плотности состояний в сверхпроводящем состоянии. Из сравнения рис. 3б и рис. 3в видно, что при некотором промежуточном значении ϵ_{z2} происходит зеркальное переключение асимметрии пиков, связанное

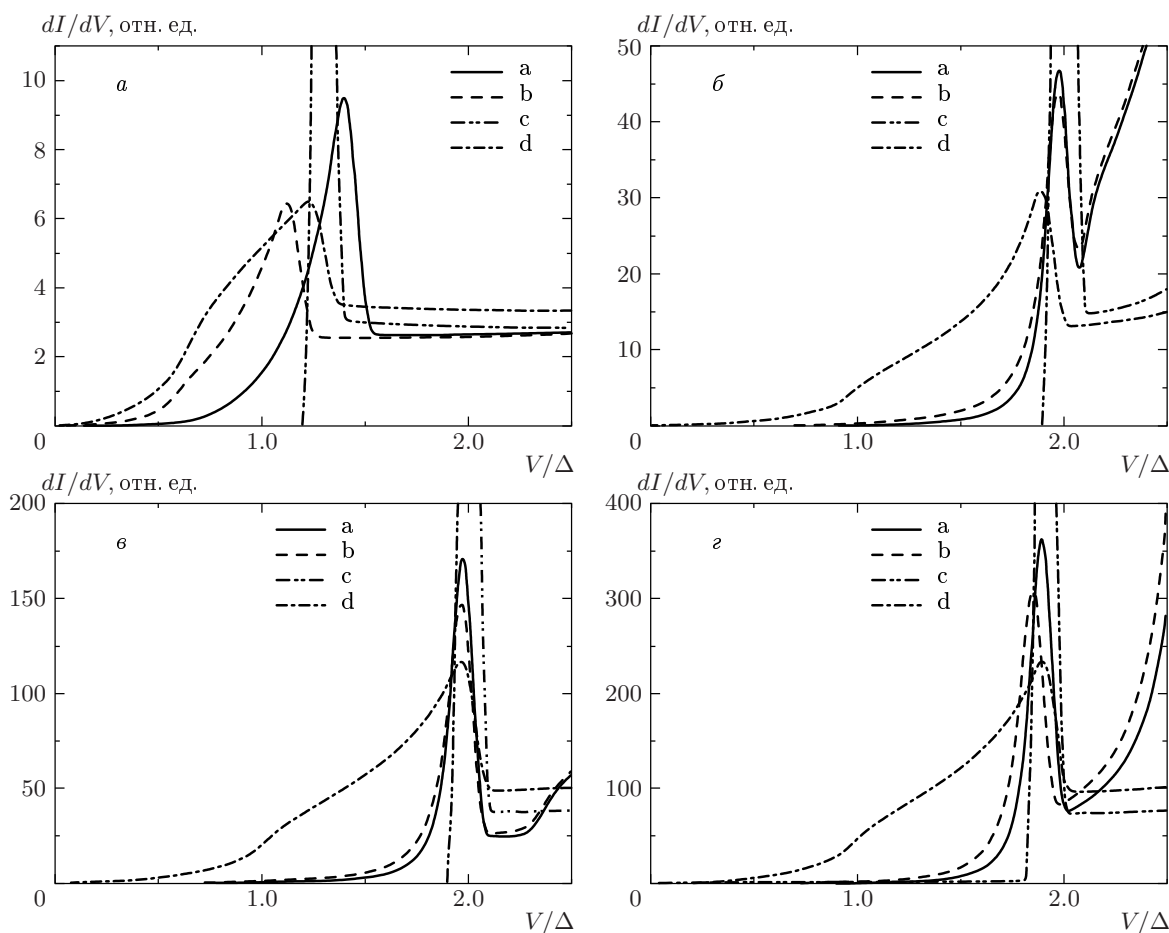


Рис. 4. (dI/dV) -характеристики: $a - \varepsilon_{z^2} = -10, t_{z^2} = 1.5, б - \varepsilon_{z^2} = -1.5, t_{z^2} = 1.5, в - \varepsilon_{z^2} = 0, t_{z^2} = 1.5, г - \varepsilon_{z^2} = -1.5, t_{z^2} = 0$. Приведены следующие зависимости: $a -$ без учета взаимодействия на $d_{x^2-y^2}$ -орбитали ($U_d = 0$), $b -$ с учетом отталкивания на $d_{x^2-y^2}$ -орбитали ($U_d > 0$), $c -$ в модели с s -симметрией параметра порядка, $d -$ в модели с d -симметрией параметра порядка

со структурой спектра задачи.

Из кривых, представленных на рис. 3а, следует, что даже без учета отталкивания на $d_{x^2-y^2}$ -орбитали при удаленном расположении уровня ε_{z^2} от химического потенциала ($\varepsilon_{z^2} = -10$) расстояние между сверхпроводящими пиками меньше $2\Delta_{z^2}$. По мере приближения ε_{z^2} к химическому потенциалу расстояние между сверхпроводящими пиками растет и при $\varepsilon_{z^2} = 0$ положение пиков $N(\omega)$ соответствует величине аномального среднего Δ_{z^2} . При этом их высота существенно возрастает. В данном случае изменение расстояния между пиками при движении уровня ε_{z^2} относительно химического потенциала возникает при фиксированных значениях остальных параметров. Однако более корректное рассмотрение этого явления требует как решения уравнений согласования на аномальные средние как функции парамет-

ров задачи, так и определения констант взаимодействия U_{z^2} и U_d с учетом конкретного механизма спаривания. И то, и другое выходит за рамки данной статьи. Зависимость расстояния между сверхпроводящими пиками от положения химического потенциала в модели с $(s + d)$ -симметрией параметра порядка также была ранее теоретически обнаружена в работе [13].

При сравнении найденных зависимостей $N(\omega)$ рассмотренной модели с однозонными моделями с s - и d -типами симметрии параметра порядка учитывалось расположение сингулярностей Ван Хофа, связанных с затравочной $\varepsilon_{z^2}(\mathbf{k})$ -зоной. Это демонстрирует заметное на масштабах энергий, больших Δ_{z^2} , асимптотическое стремление модельных s - и d -типов плотности состояний к плотности состояний данной задачи, рассчитанной как в нормальном, так

и в сверхпроводящем состоянии (рис. 3в).

Сравнение результатов, представленных на рис. 3б и рис. 3г, показывает, что при уменьшении ширины затравочной z^2 -зоны, определяемой параметром t_{z^2} ($t_{z^2} = 1.5$ на рис. 3б, $t_{z^2} = 0$ на рис. 3г), величина сверхпроводящих пиков возрастает, поскольку при этом особенность в нормальной плотности состояний смещается в сторону химического потенциала (рис. 2).

На рис. 4 представлены (dI/dV) -характеристики SIS -контакта, рассчитанные с помощью формулы (13) по найденным зависимостям $N(\omega)$ для трех положений уровня ε_{z^2} относительно химического потенциала: $\varepsilon_{z^2} = -10, -1.5, 0$, что может модельно соответствовать различным семействам ВТСП. Общей особенностью этих характеристик является то, что при учете отталкивания сверхпроводящий пик появляется при меньших напряжениях и является менее высоким, но при малых напряжениях кривая лежит выше, чем без учета взаимодействия на $d_{x^2-y^2}$ -орбитали меди. Если центр затравочной z^2 -зоны находится вдали от химического потенциала ($\varepsilon_{z^2} = -10$), то (dI/dV) -характеристики подобны рассчитанным в модели с d -симметрией параметра порядка (рис. 4а). По мере приближения уровня ε_{z^2} к химическому потенциалу кривые стремятся к зависимостям, полученным в модели с s -симметрией параметра порядка (рис. 4б, в). При малых напряжениях, $V < \Delta_{z^2}$, вольт-амперная характеристика SIS -контакта сильно подавлена. При этом, как и зависимости $N(\omega)$, (dI/dV) -характеристики демонстрируют чрезвычайно узкие сверхпроводящие пики. Это соответствует ряду экспериментально полученных результатов в соединениях типа BSCCO, например в оптимально допированном [4], передопированном [5] и недоопированном [21] $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$.

Таким образом, в рамках многозонной модели ВТСП с анизотропным эффективным параметром порядка рассчитаны плотность электронных состояний и вольт-амперные характеристики SIS -контактов. Учитывалась гибридизация между p_x -, p_y -орбиталями кислорода и $d_{x^2-y^2}$ -орбиталью меди CuO_2 -плоскости и предполагалось наличие электрон-электронного притяжения на d_{z^2} -орбитали меди. Проведенные расчеты демонстрируют возможность объяснения результатов экспериментальных измерений плотности электронных состояний и туннельных свойств SIN - и SIS -контактов, например s -образных характеристик соединений типа BSCCO, модельным учетом структуры электронного спектра ВТСП. Важно, что анизотропия

параметра порядка и спектра возбуждений объясняется исключительно симметрией кристаллической решетки и атомных орбиталей и не зависит от природы механизма спаривания.

Основным результатом работы является то, что при наличии сильно анизотропного (в том числе d -типа) эффективного параметра порядка $\Delta(\mathbf{k})$ (12) и существовании точек нулей в спектре возбуждений сверхпроводника простой учет реальной зонной структуры ВТСП в достаточно широком диапазоне изменения параметров модели приводит к экспериментально наблюдаемому [4, 5, 21] s -подобному поведению вольт-амперных характеристик SIN - и SIS -контактов. Сравнение кривых, рассчитанных с различными значениями параметров рассмотренной задачи, а также в простейших случаях моделей с s - и d -симметриями параметров порядка, свидетельствует о сильной зависимости как плотности состояний, так и (dI/dV) -характеристик от строения электронных зон высокотемпературных сверхпроводников. Они зависят в том числе от симметрии кристаллической решетки и наличия дополнительного взаимодействия между электронами, модельно введенного на $d_{x^2-y^2}$ -орбитали меди. Все это указывает на необходимость учета зонной структуры высокотемпературных сверхпроводников при интерпретации результатов туннельных исследований.

Авторы благодарны Б. А. Волкову, Е. Г. Максимова и Я. Г. Пономареву за многочисленные обсуждения в процессе работы.

Настоящая работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 99-02-16449).

ЛИТЕРАТУРА

1. Z. Yusuf, J. F. Zasadzinski, L. Coffey, and N. Miyakawa, Phys. Rev. B **58**, 514 (1998).
2. K. Kouznetsov and L. Coffey, Phys. Rev. B **54**, 3617 (1996).
3. C. Renner and O. Fischer, Phys. Rev. B **51**, 9208 (1995).
4. Ya. G. Ponomarev, Chong Soon Khi, Kim Ki Uk et al., Physica C **315**, 85 (1999).
5. M. Suzuki, T. Watanabe, and A. Matsuda, Phys. Rev. Lett. **82**, 5361 (1999).
6. M. R. Norman, M. Randeria, H. Ding, and J. C. Campuzano, Phys. Rev. B **52**, 615 (1995).

7. J. Y. T. Wei, C. C. Tsuei, P. J. M. van Bentum et al., *Phys. Rev. B* **57**, 3650 (1998).
8. A. J. Fedro and D. D. Koelling, *Phys. Rev. B* **47**, 14342 (1993).
9. M. Ledvij and R. A. Klemm, *Phys. Rev. B* **51**, 3269 (1995).
10. W. Rantner and X.-G. Wen, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 3692 (2000).
11. P. Monthoux, A. V. Balatsky, and D. Pines, *Phys. Rev. B* **46**, 14803 (1992).
12. N. Bulut and D. J. Scalapino, *Phys. Rev. B* **45**, 2371 (1992).
13. Yung-mau Nie and L. Coffey, *Phys. Rev. B* **59**, 11982 (1999).
14. K. Schlenga, R. Kleiner, G. Hechtfisher et al., *Phys. Rev. B* **57**, 14518 (1998).
15. P. I. Arseyev, N. K. Fedorov, and B. A. Volkov, *Sol. St. Comm.* **100**, 581 (1996).
16. P. Entel and J. Zielinski, *Phys. Rev. B* **42**, 307 (1990).
17. R. Combescot and X. Leyronas, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3732 (1995).
18. Г. Е. Воловик, Л. П. Горьков, *ЖЭТФ* **88**, 1412 (1985).
19. А. Н. Васильченко, А. В. Сокол, *ЖЭТФ* **96**, 377 (1989).
20. O. Jepsen, O. K. Andersen, I. Dasgupta, and S. Savrasov, *J. Phys. Chem.* **59**, 1718 (1998).
21. Y. DeWilde, N. Miyakawa, P. Gaptasarma, M. Lavarone, L. Ozyuzer, J. F. Zasadzinski, P. Romano, D. G. Hinks, C. Kendziora, G. W. Crabtree, and K. E. Gray, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 153 (1998).