

СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ И СВЯЗАННЫЕ СОСТОЯНИЯ

Рассмотрена роль связанных состояний электронов в возникновении сверхпроводимости. Найдены условия, при которых возможно образование связанного состояния в эффективном потенциале. Анализируется основное состояние системы при наличии связанных состояний.

Ключевые слова: сверхпроводимость, эффективный потенциал, связанное состояние.

1. Введение

Открытие Беднорзом и Мюллером [1] сверхпроводящего купрата с температурой перехода 30 К и последовавший почти сразу же синтез сверхпроводников с критической температурой порядка 100 К вызвал шквал работ по построению теории высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) (см. [2–22], а также обзоры [23–29]). Но, несмотря на интенсивную работу в течение 20 с лишним лет, приемлемая теория ВТСП так и не создана. Возможно, потому, что все так или иначе находились под грузом фундаментальной идеи теории Бардина-Купера-Шриффера (БКШ), согласно которой сверхпроводимость обусловлена образованием куперовских пар. И поскольку температура сверхпроводящего перехода в ВТСП оказалась гораздо выше энергии фонона – переносчика взаимодействия между электронами в куперовской паре, то представлялось естественным найти им достойную замену. Предлагались разные кандидаты на эту роль – экситоны, плазмоны, магноны, спиновые флуктуации, «спиновые мешки» и так далее, однако ни один из них не оправдал возлагавшихся надежд.

Среди множества предлагавшихся моделей ВТСП наибольшей популярностью пользовалась модель Хаббарда и ее расширенные модификации, описывающие сильные электронные корреляции на узлах кристаллической решетки ([2–15], см. также обзоры [16–22]). В них спаривание электронов, предполагается, происходит из-за антиферромагнитных спиновых флуктуаций. Однако тщательные исследования, проведенные в последнее время [23], показали, что модель Хаббарда не может служить моделью сверхпроводящих купратов.

Следует упомянуть также попытки использования модели латтинжеровской жидкости [22, 24–28], модели с отталкиванием [29–31].

В настоящей статье сделана попытка построения теории сверхпроводимости исходя только из двух фундаментальных фактов: двумерности системы и сильных взаимодействий между частицами.

Что же является необходимым условием перехода в сверхпроводящее состояние?

На этот фундаментальный вопрос в теории БКШ дан однозначный ответ: это образование куперовских пар в результате электрон-фононного взаимодействия. В металлах сверхпроводящее состояние исчерпывающе объясняется наличием куперовских пар. Но все попытки объяснить высокотемпературную сверхпроводимость, основываясь на фундаменте теории БКШ – куперовских парах, оказались неудачными. Поэтому правомерно задаться вопросом: а так ли необходимы куперовские пары для обеспечения сверхпроводящего состояния? Заметим также, что прямого экспериментального наблюдения куперовских пар нет.

Известно, что электрон, находящийся в связанном состоянии в атоме, не излучает, если это состояние является стационарным. На это основополагающее свойство квантовой системы было впервые указано Нильсом Бором в его удивительной по силе интуиции и красоте работе 1913 г., посвященной атому водорода [32]. Важно подчеркнуть здесь весьма важное обстоятельство: движение электрона в атоме в стационарном состоянии – это бездиссипативное движение. В данном случае бездиссипативность означает отсутствие излучения, т. е. потери энергии при движении электрона в атоме. Можно предположить, что с этой точки зрения любая теория сверхпроводимости должна опираться именно на этот факт, т. е. для бездиссипативного, сверхпроводящего движения электрон должен находиться в связанном состоянии. Но это связанное состояние, безусловно, должно принципиально отличаться от связанного состояния, возникающего при мотовской или андерсоновской локализации, приводящей к потере подвижности электронов и переходу в диэлектрическое состояние [33; 34]. То есть это должен быть особый вид связанного состояния, при котором, однако, подвижность сохраняется. Мы будем полагать, что такое состояние может существовать, и назовем его «мобильной локализацией». Очевидно, что подобная локализация не должна происходить на отдельном атоме или ионе. «Мобильная локализация» может иметь место только на некотором эффективном потенциале, обусловленном взаимодействием

электрона с большим числом окружающих частиц.

Постановка вопроса, когда в качестве основы сверхпроводящего состояния рассматривается связанное состояние – «мобильная локализация», существенно смещает акценты при поиске теории сверхпроводимости, способной описать круг явлений, касающийся, в частности, купратов. Задача состоит в том, чтобы определить условия, при которых возможна «мобильная локализация». Заметим, что куперовские пары в теории БКШ, справедливой для сверхпроводящих металлов, являют собой, очевидно, пример «мобильной локализации».

2. Неустойчивость четырех электронов в нормальном состоянии относительно притяжения между ними

Известно, что два электрона, введенные в ферми-систему в основном состоянии, неустойчивы относительно образования связанного состояния, если между ними существует притяжение. Эти электроны, находящиеся в связанном состоянии друг с другом, представляют собой куперовскую пару. Отсюда делается вывод, что все электроны в основном состоянии распадаются на куперовские пары, если между электронами допустить притягивательное взаимодействие. Если обозначить энергию связи куперовской пары через E_{cp} , $E_{cp} < 0$, то в случае, например, четырех электронов они должны распасться на две куперовские пары с минимальной энергией, равной $2E_{cp}$. Однако если допустить притягивательное взаимодействие между всеми парами электронов, то, как будет показано ниже, минимальная энергия этих четырех электронов будет меньше $2E_{cp}$, т. е. выгоднее распасться не на две отдельные куперовские пары, а образовать единую систему из четырех связанных друг с другом электронов. Рассмотрим систему электронов, находящуюся в основном состоянии. Введём в эту систему четыре электрона над уровнем Ферми. Будем полагать для простоты, что эти электроны вытянуты в линию и расположены на одинаковом расстоянии друг от друга, и учитывать взаимодействие между ближайшими соседями. Тогда можно записать уравнение Шрёдингера в виде:

$$\begin{aligned}
& -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^4 \nabla_i^2 \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \vec{r}_4) + \\
& + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^4 V(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \vec{r}_4) = \\
& = E_4 \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \vec{r}_4),
\end{aligned} \quad (1)$$

где $V(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$ – потенциал взаимодействия между ближайшими i и j электронами, E_4 – энергия системы четырёх электронов, отсчитанная от уровня Ферми. Вследствие взаимодействия волновая функция четырёх электронов не может быть факторизована.

Введём функцию

$$\begin{aligned}
\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \vec{r}_4) &= a_1 \psi(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) + \\
&+ a_2 \psi(\vec{r}_2 - \vec{r}_3) + a_3 \psi(\vec{r}_3 - \vec{r}_4).
\end{aligned} \quad (2)$$

Полагая, что $\psi(\vec{r}_i - \vec{r}_j) = \psi(\vec{r}_i' - \vec{r}_j')$ и $a_i = a_j \equiv a$, находим из условия нормировки $a = (3L^3)^{-1}$, L^3 – объём системы. Волновая функция (2) будет иметь вид

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \vec{r}_4) = L^{-3} \psi(\vec{r}_i - \vec{r}_j), \quad (3)$$

где i и j принимают любое из значений от 1 до 4, но так, чтобы $i > j$, $j = i + 1$.

Разложим функцию $\psi(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$ в ряд:

$$\psi(\vec{r}_i - \vec{r}_j) = \sum_{\vec{k}} g(\vec{k}) e^{i\vec{k}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)}. \quad (4)$$

Подставим выражения (3) и (4) в уравнение Шрёдингера (1) и после несложных преобразований получим

$$\frac{\hbar^2}{m} k^2 g(\vec{k}) + 3 \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} g(\vec{k}') = E_4 g(\vec{k}), \quad (5)$$

Предположим, что взаимодействие между электронами является притягивательным, справедливым в узком слое $\vec{k}$ -пространства толщиной $\hbar\omega_D$, где ω_D – дебаевская частота:

$$V_{\vec{k}\vec{k}'} = -\frac{V_0}{L^3}, \text{ при } \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} < \hbar\omega_D, \quad (6)$$

где V_0 – некоторая постоянная взаимодействия. Подставим выражение (6) в уравнение (5) и перейдём от суммирования по $\vec{k}$ к интегрированию по энергии $\varepsilon = \hbar^2 k^2 / 2m$. Заменяя в интеграле плот-

ность состояний на её значение на уровне Ферми $N(0)$, получаем

$$1 \approx 3V_0 N(0) \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\varepsilon}{2\varepsilon - E_4}. \quad (7)$$

При $V_0 N(0) \ll 1$ из (7) получаем выражение для энергии четырёх взаимодействующих электронов E_4 :

$$E_4 = -2\hbar\omega_D e^{-\frac{2}{3V_0 N(0)}}. \quad (8)$$

Энергия двух куперовских пар, как известно, равна:

$$E_{2cp} = -4\hbar\omega_D e^{-\frac{2}{V_0 N(0)}}. \quad (9)$$

Сравнивая (8) и (9), видим, что $E_4 < E_{2cp}$. Очевидно, что учёт взаимодействий $V(\vec{r}_1 - \vec{r}_3)$ и $V(\vec{r}_2 - \vec{r}_4)$ приведёт к ещё большему уменьшению E_4 по сравнению с выражением (8). Таким образом, связанное состояние всех четырёх электронов термодинамически выгоднее образования двух свободных куперовских пар.

3. Связанные состояния в 2D системе

Отличительной особенностью двумерных систем является то, что в них в любой мелкой потенциальной яме возможно образование связанного состояния [34]. Двумерность системы при определенных условиях, а именно при низких плотностях электронов, способствует локализации электронов по моттовскому или андерсоновскому сценарию и переходу в диэлектрическое состояние. Однако, как показано в настоящей статье, в двумерной системе возможна и «мобильная» локализация, не приводящая к потере подвижности при плотностях электронов выше некоторого критического значения. Более того, именно она является необходимым и достаточным условием перехода в сверхпроводящее состояние. Сверхпроводящие свойства системы, такие как температура перехода в сверхпроводящее состояние, величина сверхпроводящей щели, критический ток, определяются главным образом свойствами «мобильно» локализованных электронов.

Очевидно, что в системе сильно взаимодействующих частиц каждая частица будет находиться в некотором эффективном потенциале, определяемом, строго

говоря, всеми остальными частицами. Этот потенциал может быть определен с помощью поляризационного оператора:

$$V_{eff}(\vec{k}, \omega) = V(\vec{k}) [1 - V(\vec{k}) \Pi(\vec{k}, \omega)]^{-1}, \quad (10)$$

где $\Pi(\vec{k}, \omega)$ – поляризационный оператор. Отсюда вытекает условие, при выполнении которого эффективный потенциал будет иметь притягивательный характер:

$$V(\vec{k}) \Pi(\vec{k}, \omega) > 1. \quad (11)$$

Условие (2) будет заведомо выполнено, если поляризационный оператор обладает полюсами. Действительно, запишем поляризационный оператор в следующем виде:

$$\begin{aligned} \Pi(\vec{k}, \omega) = \\ = -2i \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} G(\varepsilon - \omega, \vec{k} + \vec{p}) G(\varepsilon - \omega, \vec{k}), \end{aligned} \quad (12)$$

где одночастичные функции Грина определяются обычным образом:

$$G^{-1}(\varepsilon, \vec{k} + \vec{p}) = (\varepsilon - \omega - \Sigma(\vec{k} + \vec{p}, \varepsilon) + i\delta), \quad (13)$$

$\Sigma(\vec{k}, \varepsilon)$ – собственно энергетическая часть. Таким образом, полюса поляризационного оператора совпадают с полюсами функций Грина. В полюсах поляризационного оператора условие (11) заведомо выполняется. Поскольку полюса функции Грина (13) могут принадлежать квазичастице типа, например, полярона, то определим условие, при котором полюс функции Грина соответствует связанному состоянию. Разлагая собственно энергетическую часть вблизи полюса, получаем условие связанного состояния:

$$\left. \frac{\partial \Sigma(\vec{k}, \omega)}{\partial \omega} \right|_{\omega=E_k} > 0, \quad (14)$$

где энергия электрона в связанном состоянии E_k определяется эффективной массой m^* :

$$E_k = \frac{k^2}{2m^*} - \mu. \quad (15)$$

Можно показать, что при выполнении условия (14) эффективная масса $m^* < m$, что имеет место только в случае связанного состояния. Для двумерной системы условия (11) и (14) эквивалентны. Энергия связанного состояния $E_k < 0$, если иметь в виду, что химический потенциал в нашей

задаче имеет смысл глубины эффективной потенциальной ямы.

Вывод о наличии связанного состояния можно сделать также с помощью t-оператора [36], определяемого следующим образом:

$$t(\vec{k}, \omega) = V_{eff}(\vec{k}) + V_{eff}(\vec{k}) G(\vec{k}, \omega) V_{eff}(\vec{k}). \quad (16)$$

Здесь учтено, что рассеяние происходит на эффективном потенциале $V_{eff}(\vec{k})$. Известно, что каждому связанному состоянию отвечает полюс t-оператора. Видно, что полюсы t-оператора совпадают с полюсами функции Грина. Умножая уравнение (16) слева на функцию Грина свободного движения $G_0(\vec{k}, \omega)$, получим

$$G_0(\vec{k}, \omega) t(\vec{k}, \omega) = G(\vec{k}, \omega) V_{eff}(\vec{k}). \quad (17)$$

Используя выражение (17), получаем уравнение Липпмана-Швингера для t-оператора:

$$t(\vec{k}, \omega) = V_{eff}(\vec{k}) + V_{eff}(\vec{k}) G_0(\vec{k}, \omega) t(\vec{k}, \omega), \quad (18)$$

которое в импульсном представлении для двумерной системы имеет вид:

$$\begin{aligned} t(\vec{k}, \omega) = V_{eff}(\vec{k}) + \\ + \frac{2m}{\hbar^2} \int \frac{V_{eff}(\vec{k} - \vec{q}) t(\vec{q}, \omega)}{k^2 - q^2 + i\delta} \frac{d^2 q}{(2\pi)^2}. \end{aligned} \quad (19)$$

Рассмотрим двумерную систему. Положим, $V_{eff}(\vec{k}) = -Ua^2$, где a – характерный размер потенциальной ямы. Уравнение (19) запишем в виде:

$$\begin{aligned} t(k, \omega) = -Ua^2 + \\ + Ua^2 \frac{2m}{\hbar^2} \int t(k, \omega) \frac{2\pi q}{q^2 - k^2 - i\delta} \frac{dq}{(2\pi)^2}. \end{aligned} \quad (20)$$

Полюс t-оператора (20) даёт энергию связанного состояния [37]:

$$E_0 \approx -\frac{\hbar^2}{ma^2} \exp\left(-\frac{2\pi \hbar^2}{ma^2 U}\right). \quad (21)$$

Видно, что появление связанного состояния возможно при любой малой глубине эффективной потенциальной ямы. При достаточной глубине этой ямы возможно появление в V_{eff} двух и более уровней. В двумерной квантовой потенциальной яме квантование энергии, т. е. наличие связанного состояния, возникает из-за ограничения какой-либо степени

свободы. В двух других направлениях движение не ограничено, т. е. мобильно.

4. Основное состояние 2D системы, сверхпроводящая щель, критическая температура

Подчеркнем, что появление связанного состояния в V_{eff} , т. е. «мобильная локализация», в общем случае не приводит к переходу в диэлектрическое состояние. Однако можно предположить, что в общем случае часть электронов будет локализована по мотовскому или андерсоновскому сценарию. Другая часть – это обычные электроны, движение которых сопровождается диссипацией. И, наконец, третья часть – это электроны, локализованные по «мобильному» сценарию. Соотношение между ними и определяет, будет ли система в состоянии мотовского или андерсоновского диэлектрика, или в металлическом состоянии, или происходит переход «нормальный металл – сверхпроводник». Очевидно, что «мобильная локализация» объясняет поведение двумерных систем, например, Si [38; 39]: резкое увеличение проводимости при понижении температуры при плотности электронов больше некоторой критической величины.

Переход всех электронов системы в состояние «мобильной локализации» представляет собой переход в сверхпроводящее состояние. Этот переход минимизирует энергию системы, а следовательно, приводит к возникновению коррелированного спинового состояния «мобильно локализованных» электронов системы. Иными словами, это минимизированное по энергии спин-коррелированное состояние является коллективным, когерентным, в котором любая пара соседних спинов имеет противоположное направление.

Волновую функцию основного состояния такой системы электронов можно записать в следующем виде:

$$|GS\rangle = A \sum_k a_{1,k\uparrow}^+ a_{2,-k\downarrow}^+ \cdots a_{n,-k\downarrow}^+ |0\rangle, \quad (22)$$

где $n=N/2$, N – число электронов системы. Удобно записать выражение (22), объединив попарно операторы рождения с противоположными спинами. Тогда мы получаем выражение, в точности совпадающее с соответствующим выражением теории БКШ. Однако различие есть, и оно заключается в том, что в нашем случае оператор $a_{k\uparrow}^+ a_{-k\downarrow}^+$ не связан с рождением ку-

перовской пары и объединение попарно этих операторов является чисто формальным.

Щелевая функция определяется так же, как и в БКШ, – аномальной функцией Грина, и уравнение согласования имеет вид:

$$\Delta_0 = V_{eff} \sum_k u_k v_k. \quad (23)$$

Здесь u_k и v_k – функции Боголюбова. В отличие от БКШ, постоянная взаимодействия вычисляется с помощью выражения (10). Критическая температура $T_c \approx \Delta_0$ и, следовательно, определяется глубиной потенциальной ямы V_{eff} :

$$T_c \propto V_{eff} / k_B, \quad (24)$$

где k_B – постоянная Больцмана. При записи выражения (24) мы учли, что плотность состояний в нашем случае будет иметь логарифмическую особенность Ван Хофа. В соответствии с (24) температура перехода достигает значения 100 К уже при $V_{eff} \approx 8 \cdot 10^{-3}$ эВ.

Поскольку T_c не определяется напрямую дебаевской частотой, то изотопический эффект будет выражен слабо. Электрон-фононное взаимодействие включено в V_{eff} , но оно в общем случае не является определяющим.

Заключение

Существует три вида поведения электронов: 1) мотовская и андерсоновская локализации, приводящие к переходу в диэлектрическое состояние. Электроны при этом теряют подвижность; 2) «металлическое», т. е. обычное поведение электронов, сопровождающееся диссипацией; 3) «мобильная локализация», при которой электрон находится в связанном состоянии в V_{eff} , его движение является бездиссипативным, т. е. сверхпроводящим.

Автор благодарит участников Сибирского семинара по сверхпроводимости и смежным проблемам, в частности В.В. Валькова и С.Г. Овчинникова, за плодотворные дискуссии.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Bednorz J.G., Müller K.A. Z. Phys. B: Condens. Matter **64**, 189 (1986).

- [2] *Schrieffer J.R., Wen X.G., Zhang S.C.* Phys. Rev. Lett. **60**, 944 (1988).
- [3] *Schrieffer J.R., Wen X.G., Zhang S.C.* Phys. Rev. B **39**, 11663 (1989).
- [4] *Kampf A.P., Schrieffer J.R.* Phys. Rev. B **42**, 7967 (1990).
- [5] *Anderson P.W.* Phys. Rev. **109**, 1492 (1958).
- [6] *Ren Y., Anderson P.W.* Phys. Rev. B **48**, 16662 (1993).
- [7] *Tao R., Zhang X., Tang X., Anderson P.W.* Phys. Rev. Lett. **83**, 5575 (1999).
- [8] *Anderson P.W.* cond-mat/0510053.
- [9] *Anderson P.W.* Phys. Rev. Lett. **96**, 017001 (2006).
- [10] *Emery V.J.* Phys. Rev. Lett. **58**, 2794 (1987).
- [11] *Emery V.J., Reiter G.* Phys. Rev. B **38**, 4547 (1988).
- [12] *Emery V.J., Kivelson S.A., Lin H.Q.* Phys. Rev. Lett. **64**, 475 (1990).
- [13] *Carlson E.W., Orgad D., Kivelson S.A., Emery V.J.* Phys. Rev. B **62**, 3422 1(2000).
- [14] *Садовский М.В., Тимофеев А.А.* СФХТ **43**, 11 (1991).
- [15] *Chakravarty S., Laughlin R.B., Morr D.K., Nayak C.* Phys. Rev. B, **63**, 094503 (2001).
- [16] *Dogatto E.* Rev. Mod. Phys. **66**, 763 (1994).
- [17] *Van Harlingen D.J.* Rev. Mod. Phys. **67**, 515 (1995).
- [18] *Tsuei C.C., Kirtley J.R.* Rev. Mod. Phys. **72**, 969 (2000).
- [19] *Lee P.A., Nagaosa N. and X.-G. Wen,* Rev. Mod. Phys., **78**, 17 (2006).
- [20] *Овчинников С.Г.* УФН, **167**, 1043 (1997).
- [21] *Изюмов Ю.А.* УФН, **169**, 225 (1999).
- [22] *Максимов Е.Г.* УФН, **170**, 1033 (2000).
- [23] *Aimi T., Imada M.* J. Phys. Soc. Jpn., **76**, 113708 (2007).
- [24] *Anderson P.W.* Phys. Rev. Lett., **64**, 1839 (1990).
- [25] *Anderson P.W.* Phys. Rev. B **42**, 2624 (1990).
- [26] *Ogata M., Anderson P.W.* Phys. Rev. Lett. **70**, 3087 (1993).
- [27] *Anderson P.W., Ramakrishnan T.V., Strong S., Clarke D.G.* Phys. Rev. Lett. **77**, 4241 (1996).
- [28] *Anderson P.W.* Phys. Rev. B **55**, 11785 (1997).
- [29] *Белявский В.И., Капаев В.В., Капаев Ю.В.* ЖЭТФ, **118**, 941 (2000).
- [30] *Belyavsky V.I., Kopaev Yu.V.* Phys. Rev. B **67**, 024513 (2003).
- [31] *Belyavsky V.I., Kopaev Yu.V., Smirnov M.Yu.* Phys. Rev. B **72**, 132501 (2005).
- [32] *Bohr N.* Phil. Mag., **26**, 1-25, 476-502, 857-875 (1913).
- [33] *Мотт Н.Ф.* Переходы металл-изолятор. М.: Наука, 1979.
- [34] *Anderson P.W.* Phys. Rev. **109**, 1492 (1958).
- [35] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. М.: Наука, 1989.
- [36] *Taylor J.R.* Scattering Theory. The Quantum Theory on Nonrelativistic Collisions. NY: John Wiley & Sons, 1972.
- [37] *Левитов Л.С., Шитов А.В.* Функции Грина. Задачи и решения. М.: Физматлит, 2003.
- [38] *Kravchenko S.V., Mason W., Furneaux J.E., Pudalov V.M.* Phys. Rev. Lett., **75**, 910 (1995).
- [39] *Abrahams E., Kravchenko S.V., Sarachik M.P.* Rev. Mod. Phys., **73**, 251 (2001).