

## Оптическая проводимость двухзонного сверхпроводника

П. И. Арсеев<sup>1)</sup>, С. О. Лойко, Н. К. Федоров

Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 28 декабря 2007 г.

После переработки 11 февраля 2008 г.

В рамках двухзонной модели сверхпроводника, являющейся обобщением стандартной модели БКШ на случай сложной кристаллической структуры, получено выражение для проводимости сверхпроводника на произвольной частоте внешнего электромагнитного поля. Вывод произведен на основе микроскопической теории в рамках диаграммной техники для неравновесных процессов. Проведено сравнение рассчитанных при  $T = 0$  зависимостей  $\sigma(\omega)$  с результатами однозонных моделей с  $s$ - и  $d$ -симметрией параметра порядка. Показано, что поведение оптической проводимости как функции частоты существенно зависит от уровня допирования.

PACS: 74.20.Rp, 74.25.Nf

Оптические свойства твердых тел исследуются путем измерения в широком интервале частот спектров пропускания или отражения, по которым можно определить комплексный показатель преломления, а с ним действительную и мнимую части диэлектрической проницаемости или проводимости. С помощью этих данных можно получить информацию о некоторых электронных свойствах системы, в частности, о зонной структуре, низколежащих возбуждениях, электронной динамике. В обычных сверхпроводниках еще до возникновения теории БКШ спектроскопические измерения указали на существование щели в энергетическом спектре [1]. С открытием явления ВТСП такие эксперименты проводились и для этих соединений [2–8]. Оказалось, что результаты этих экспериментов, как и многих других, допускают интерпретацию в рамках разных подходов [9–14], не позволяя сделать однозначный выбор между ними. Обзор последних исследований, связанных с электромагнитным откликом высокотемпературных сверхпроводников, приведен в работе [15]. Следует отметить, что экспериментальные данные обычно сравниваются с результатами однозонной модели типа БКШ с простым изотропным спектром зоны проводимости, а специфика ВТСП проявляется в выборе экзотического спаривающего взаимодействия между электронами. При этом реальный спектр ВТСП-соединений обычно не учитывается. Не претендуя на полное теоретическое описание высокотемпературных сверхпроводников, в данной работе хотелось бы продемонстрировать, что в этих соединениях существенную роль играет анизотропия реаль-

ного спектра, связанная с тем, что функции Блоха имеют более сложный вид из-за наличия нескольких атомов в элементарной ячейке. Основные электронные свойства купратных сверхпроводников связаны с наличием в них  $\text{CuO}_2$ -слоев и обусловлены, главным образом, движением и взаимодействием электронов на  $d$ -орбиталях  $Cu$  и  $p$ -орбиталях  $O$ . Учет переходов электронов между этими орбиталями приводит к многозонному описанию электронной системы  $\text{CuO}_2$ -плоскости, которое может быть упрощено, если оказывается существенной только область энергий вблизи химического потенциала [16]. В частности, при некотором реалистичном выборе параметров модели можно ограничиться учетом двух зон. В этом случае электронная система купратного сверхпроводника описывается гамильтонианом следующего вида [17]:

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}, \alpha} \xi_a(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}, \alpha}^+ a_{\mathbf{k}, \alpha} + \sum_{\mathbf{k}, \alpha} \xi_c(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}, \alpha}^+ c_{\mathbf{k}, \alpha} + \\ + \sum_{\mathbf{k}, \alpha} (W(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}, \alpha}^+ c_{\mathbf{k}, \alpha} + \text{h.c.}) - \\ - \sum_{\mathbf{k}} \left( \Delta_a a_{-\mathbf{k}\downarrow}^+ a_{\mathbf{k}\uparrow}^+ + \text{h.c.} \right) - \sum_{\mathbf{k}} \left( \Delta_c c_{-\mathbf{k}\downarrow}^+ c_{\mathbf{k}\uparrow}^+ + \text{h.c.} \right), \quad (1)$$

где  $a_{\mathbf{k}, \alpha}^+$  и  $c_{\mathbf{k}, \alpha}^+$  – операторы рождения электронов в состояниях с квазиимпульсом  $\mathbf{k}$  и спином  $\alpha$  в зонах  $a$  и  $c$ , соответственно,  $\xi_a(\mathbf{k})$  и  $\xi_c(\mathbf{k})$  – энергии электронов в соответствующих зонах,  $W(\mathbf{k})$  – матричный элемент одночастичной межзонной гибридизации. Электронные состояния в зонах  $a$  и  $c$  построены из электронных орбиталей атомов разного типа и являются “затравочными”, а не точными зонными состояниями кристалла. Последние два слагаемых в (1) описывают взаимодействие между электронами

<sup>1)</sup>e-mail: ars@lpi.ru

в таких “затравочных” зонах. Они сразу записаны в приближении среднего поля. Введенные аномальные средние  $\Delta_a$  и  $\Delta_c$  определяются стандартным образом:

$$\begin{aligned}\Delta_a &= -U_a \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle a_{\mathbf{k}\uparrow} a_{-\mathbf{k}\downarrow} \rangle, \\ \Delta_c &= -U_c \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}\uparrow} c_{-\mathbf{k}\downarrow} \rangle,\end{aligned}\quad (2)$$

где  $U_a$  и  $U_c$  – константы межэлектронного взаимодействия в зонах  $a$  и  $c$ .

Такой гамильтониан возникает не только для описания ВТСП, но и в достаточно общем случае, если в элементарной ячейке содержатся два (или более) атома разных элементов с орбиталями различной симметрии. Тогда в узельном представлении гамильтониан имеет вид

$$\begin{aligned}H_0 &= \sum_{i,j,\alpha} (\varepsilon_{a0} \delta_{ij} + t_{ij}^a) a_{i,\alpha}^+ a_{j,\alpha} + \\ &+ \sum_{i,j,\alpha} (\varepsilon_{c0} \delta_{ij} + t_{ij}^c) c_{i,\alpha}^+ c_{j,\alpha} + \\ &+ \sum_{i,j,\alpha} (W_{ij} a_{i,\alpha}^+ c_{j,\alpha} + \text{h.c.}) + \\ &+ U_a \sum_i a_{i\downarrow}^+ a_{i\downarrow} a_{i\uparrow}^+ a_{i\uparrow} + U_c \sum_i c_{i\downarrow}^+ c_{i\downarrow} c_{i\uparrow}^+ c_{i\uparrow},\end{aligned}\quad (3)$$

где операторы  $a_{i\alpha}$  и  $c_{i\alpha}$  соответствуют электронам на атомах разного типа в одной и той же элементарной ячейке “ $i$ ”,  $t_{ij}^a$  и  $t_{ij}^c$  – матричные элементы одночастичных переходов между состояниями одинаковых атомов, а  $W_{ij}$  – между электронными состояниями разных атомов. Каков бы ни был конкретный механизм сверхпроводящего спаривания, естественно предположить, что взаимодействие между электронами атомов одного типа отличается от взаимодействия между электронами атомов другого типа в исходном представлении сильной связи (3). Для простоты взаимодействие считается, как в уравнениях Горькова, квазилокальным, поэтому взаимодействие между электронами, находящимися на различных атомах в одной элементарной ячейке, можно считать несущественным. Добавление такого взаимодействия, а также нелокального взаимодействия между электронами в разных ячейках решетки, не приводит к существенному изменению результатов. Важно лишь, чтобы исходное взаимодействие между электронами на орбиталях одного и того же типа атомов было изотропным и разным для атомов разного типа. В приближении среднего поля из гамильтониана сильной связи (3) в фурье-представлении получается гамильтониан (1) с изотропными затравочными параметрами порядка в зонах  $a$  и  $c$  (2).

Для определения свойств сверхпроводящего состояния в данной модели необходимо решить систему уравнений для функций Грина, являющуюся двухзонным аналогом уравнений Горькова [18]. Исключением межзонных функций эта система сводится к двум отдельным системам для каждой из зон  $a$  и  $c$ . При этом в каждой из зон возникают эффективные параметры порядка, имеющие следующий вид:

$$\begin{aligned}\tilde{\Delta}_a(\mathbf{k}) &= \frac{W^2(\mathbf{k}) \Delta_c}{\xi_c^2(\mathbf{k}) + \Delta_c^2} + \Delta_a, \\ \tilde{\Delta}_c(\mathbf{k}) &= \frac{W^2(\mathbf{k}) \Delta_a}{\xi_a^2(\mathbf{k}) + \Delta_a^2} + \Delta_c.\end{aligned}\quad (4)$$

Из (4) видно, что эффективные параметры порядка становятся функциями квазиимпульса. Ключевую роль играет зависимость от квазиимпульса матричного элемента одночастичной межзонной гибридизации  $W$ . В том случае, когда атомные орбитали в ячейке имеют различную симметрию, функция  $W(\mathbf{k})$  обращается в нуль вдоль определенных линий в зоне Бриллюэна. Это приводит к сильной анизотропии эффективных параметров порядка (4). До сих пор не делалось никаких предположений о знаках взаимодействий в зонах. Известно, что для существования сверхпроводимости в однозонной модели необходимо наличие притяжения между электронами. В двухзонной модели сверхпроводимость может возникать даже в случае отталкивания в одной из зон, при условии, что ширина этой зоны достаточно велика по сравнению с шириной другой зоны, в которой имеет место межэлектронное притяжение. Тогда аномальные средние (2) в зонах  $a$  и  $c$  имеют разные знаки и эффективные параметры порядка (4) меняют знак как функции  $\mathbf{k}$  в зоне Бриллюэна, проявляя тем самым черты, характерные для параметра порядка  $d$ -типа.

Цель данной работы заключается в исследовании проводимости как функции частоты внешнего электромагнитного поля при  $T = 0$ . В соответствии со стандартной процедурой теории линейного отклика запишем сначала явное выражение для оператора плотности тока. Представим его в виде суммы двух вкладов:

$$\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{q}) = \hat{\mathbf{j}}^{(p)}(\mathbf{q}) + \hat{\mathbf{j}}^{(d)}(\mathbf{q}),\quad (5)$$

где

$$\begin{aligned} \widehat{\mathbf{j}}^{(p)}(\mathbf{q}) = & \frac{e}{2} \sum_{\mathbf{k}, \alpha} \left\{ \left( \frac{\partial \xi_a(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} + \frac{\partial \xi_a(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{\partial \mathbf{k}} \right) \widehat{a}_{\mathbf{k}, \alpha}^+ \widehat{a}_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, \alpha}^+ \right. \\ & + \left( \frac{\partial \xi_c(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} + \frac{\partial \xi_c(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{\partial \mathbf{k}} \right) \widehat{c}_{\mathbf{k}, \alpha}^+ \widehat{c}_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, \alpha}^+ \\ & \left. + \left[ \left( \frac{\partial W(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} + \frac{\partial W(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{\partial \mathbf{k}} \right) \widehat{a}_{\mathbf{k}, \alpha}^+ \widehat{c}_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, \alpha}^+ + \text{h.c.} \right] \right\} \quad (6) \end{aligned}$$

– не содержащая вектор-потенциал “парамагнитная” часть и

$$\begin{aligned} \widehat{\mathbf{j}}^{(d)}(\mathbf{q}) = & -\frac{e^2}{4cV} \sum_{\mathbf{k}, \alpha} \left( \mathbf{A}(\mathbf{q}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \right) \\ & \left\{ \left( \frac{\partial \xi_a(\mathbf{k} - \mathbf{q})}{\partial \mathbf{k}} + 2 \frac{\partial \xi_a(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} + \frac{\partial \xi_a(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{\partial \mathbf{k}} \right) \widehat{a}_{\mathbf{k}, \alpha}^+ \widehat{a}_{\mathbf{k}, \alpha}^+ \right. \\ & + \left( \frac{\partial \xi_c(\mathbf{k} - \mathbf{q})}{\partial \mathbf{k}} + 2 \frac{\partial \xi_c(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} + \frac{\partial \xi_c(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{\partial \mathbf{k}} \right) \widehat{c}_{\mathbf{k}, \alpha}^+ \widehat{c}_{\mathbf{k}, \alpha}^+ \\ & \left. + \left[ \left( \frac{\partial W(\mathbf{k} - \mathbf{q})}{\partial \mathbf{k}} + 2 \frac{\partial W(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} + \frac{\partial W(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{\partial \mathbf{k}} \right) \widehat{a}_{\mathbf{k}, \alpha}^+ \widehat{c}_{\mathbf{k}, \alpha}^+ \right. \right. \\ & \left. \left. + \text{h.c.} \right] \right\} \quad (7) \end{aligned}$$

– линейная по  $\mathbf{A}$  “диамагнитная” часть тока. В правой части формулы (7) опущены слагаемые, не вносящие вклада в линейный отклик сверхпроводника. После усреднения оператора (5) в линейном по полю приближении получим следующее соотношение между плотностью тока и напряженностью электрического поля  $\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$ :

$$j_i(\omega) = \sigma_{lm}(\omega) E_m(\omega), \quad (8)$$

определяющее оптическую проводимость  $\sigma_{lm}$ , которая стандартным образом может быть выражена через коррелятор ток-ток  $Q_{lm}$ :

$$\sigma_{lm}(\omega) = -\frac{e^2}{i(\omega + i0)} [Q_{lm}(\omega) + D_{lm}], \quad (9)$$

где

$$Q_{lm}(\omega) \equiv -\frac{i}{V e^2} \int \langle [\widehat{j}_l^{(p)}(t), \widehat{j}_m^{(p)}(t')] \rangle \theta(t - t') e^{i\omega(t-t')} dt,$$

$\widehat{\mathbf{j}}^{(p)}(t) \equiv \widehat{\mathbf{j}}^{(p)}(\mathbf{q} = 0, t)$ . Величина  $D_{lm}$  описывает вклад в проводимость от диамагнитного члена (7) и равна

$$\begin{aligned} D_{lm} = & \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \alpha} \left\{ \frac{\partial^2 \xi_a(\mathbf{k})}{\partial k_l \partial k_m} \langle \widehat{a}_{\mathbf{k}, \alpha}^+ \widehat{a}_{\mathbf{k}, \alpha} \rangle + \frac{\partial^2 \xi_c(\mathbf{k})}{\partial k_l \partial k_m} \langle \widehat{c}_{\mathbf{k}, \alpha}^+ \widehat{c}_{\mathbf{k}, \alpha} \rangle \right. \\ & \left. + \left[ \frac{\partial^2 W(\mathbf{k})}{\partial k_l \partial k_m} \langle \widehat{a}_{\mathbf{k}, \alpha}^+ \widehat{c}_{\mathbf{k}, \alpha} \rangle + \text{c.c.} \right] \right\}. \end{aligned}$$

Выделение в формуле (9) действительной и мнимой частей приводит к следующему результату:

$$\begin{aligned} \text{Re } \sigma_{lm}(\omega) = & -\frac{e^2}{\omega} \text{Im } Q_{lm}(\omega) + \\ & + \pi e^2 (\text{Re } Q_{lm}(\omega) + D_{lm}) \delta(\omega), \quad (10) \end{aligned}$$

$$\text{Im } \sigma_{lm}(\omega) = \frac{e^2}{\omega} (\text{Re } Q_{lm}(\omega) + D_{lm}). \quad (11)$$

Используя стандартные определения запаздывающих нормальной и аномальной функций Грина в двухзонной модели

$$\begin{aligned} \widehat{G}^A(\mathbf{k}, \varepsilon) = & i \int_{-\infty}^0 d(t - t') e^{i\varepsilon(t-t')} \times \\ & \times \begin{pmatrix} \langle \widehat{a}_{\mathbf{k}, \alpha}(t) \widehat{a}_{\mathbf{k}, \alpha}^+(t') \rangle & \langle \widehat{a}_{\mathbf{k}, \alpha}(t) \widehat{c}_{\mathbf{k}, \alpha}^+(t') \rangle \\ \langle \widehat{c}_{\mathbf{k}, \alpha}(t) \widehat{a}_{\mathbf{k}, \alpha}^+(t') \rangle & \langle \widehat{c}_{\mathbf{k}, \alpha}(t) \widehat{c}_{\mathbf{k}, \alpha}^+(t') \rangle \end{pmatrix}, \\ \sigma_{\alpha\beta}^y \widehat{F}^A(\mathbf{k}, \varepsilon) = & \int_{-\infty}^0 d(t - t') e^{i\varepsilon(t-t')} \times \\ & \times \begin{pmatrix} \langle \widehat{a}_{\mathbf{k}, \alpha}(t) \widehat{a}_{-\mathbf{k}, \beta}(t') \rangle & \langle \widehat{a}_{\mathbf{k}, \alpha}(t) \widehat{c}_{-\mathbf{k}, \beta}(t') \rangle \\ \langle \widehat{c}_{\mathbf{k}, \alpha}(t) \widehat{a}_{-\mathbf{k}, \beta}(t') \rangle & \langle \widehat{c}_{\mathbf{k}, \alpha}(t) \widehat{c}_{-\mathbf{k}, \beta}(t') \rangle \end{pmatrix} \end{aligned}$$

и введя для краткости обозначения  $\widehat{G}'_\varepsilon \equiv \text{Re } \widehat{G}^A(\mathbf{k}, \varepsilon)$ ,  $\widehat{G}''_\varepsilon \equiv \text{Im } \widehat{G}^A(\mathbf{k}, \varepsilon)$ ,  $\widehat{F}'_\varepsilon \equiv \text{Re } \widehat{F}^A(\mathbf{k}, \varepsilon)$ ,  $\widehat{F}''_\varepsilon \equiv \text{Im } \widehat{F}^A(\mathbf{k}, \varepsilon)$ , выражения для  $\text{Re } Q_{lm}$ ,  $\text{Im } Q_{lm}$  и  $D_{lm}$  можно записать в следующем виде [19]:

$$\begin{aligned} \text{Re } Q_{lm}(\omega) = & 4 \int \frac{d^3 k d\varepsilon}{(2\pi)^4} \text{Sp} \left\{ \frac{\partial \widehat{\xi}}{\partial k_l} \times \right. \\ & \times \left[ n_\varepsilon \left( \widehat{G}'_{\varepsilon+\omega} \frac{\partial \widehat{\xi}}{\partial k_m} \widehat{G}''_\varepsilon + \widehat{F}'_{\varepsilon+\omega} \frac{\partial \widehat{\xi}}{\partial k_m} \widehat{F}''_\varepsilon \right) \right. \\ & \left. \left. + n_{\varepsilon+\omega} \left( \widehat{G}'_\varepsilon \frac{\partial \widehat{\xi}}{\partial k_m} \widehat{G}''_{\varepsilon+\omega} + \widehat{F}'_\varepsilon \frac{\partial \widehat{\xi}}{\partial k_m} \widehat{F}''_{\varepsilon+\omega} \right) \right] \right\}, \quad (12) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Im } Q_{lm}(\omega) = & -4 \int \frac{d^3 k d\varepsilon}{(2\pi)^4} (n_\varepsilon - n_{\varepsilon+\omega}) \times \\ & \times \text{Sp} \left\{ \frac{\partial \widehat{\xi}}{\partial k_l} \left( \widehat{G}''_{\varepsilon+\omega} \frac{\partial \widehat{\xi}}{\partial k_m} \widehat{G}''_\varepsilon + \widehat{F}''_{\varepsilon+\omega} \frac{\partial \widehat{\xi}}{\partial k_m} \widehat{F}''_\varepsilon \right) \right\}, \quad (13) \end{aligned}$$

$$D_{lm} = 4 \int \frac{d^3 k d\varepsilon}{(2\pi)^4} n_\varepsilon \text{Sp} \left\{ \frac{\partial^2 \widehat{\xi}}{\partial k_l \partial k_m} \widehat{G}'_\varepsilon \right\}, \quad (14)$$

где

$$\widehat{\xi} = \begin{pmatrix} \xi_a & W \\ W^* & \xi_c \end{pmatrix}.$$

Из (10) видно, что в действительной части проводимости имеется  $\delta$ -функциональный вклад, амплитуда которого определяется величиной

$$D_{lm}^{(s)} \equiv \text{Re} Q_{lm}(\omega = 0) + D_{lm}. \quad (15)$$

Он обычно связывается с откликом сверхпроводящего конденсата на статическое магнитное поле и определяет глубину проникновения поля в сверхпроводник. Интегрируя в (14) по частям и используя для  $\partial \widehat{G}_\varepsilon'' / \partial k_m$  выражение, следующее непосредственно из системы уравнений для функций Грина (двухзонного аналога уравнений Горькова) [18]

$$\begin{aligned} \frac{\partial \widehat{G}_\varepsilon''}{\partial k_m} &= \widehat{G}'_\varepsilon \frac{\partial \widehat{\xi}}{\partial k_m} \widehat{G}''_\varepsilon + \widehat{G}''_\varepsilon \frac{\partial \widehat{\xi}}{\partial k_m} \widehat{G}'_\varepsilon - \\ &- \widehat{F}'_\varepsilon \frac{\partial \widehat{\xi}}{\partial k_m} \widehat{F}''_\varepsilon - \widehat{F}''_\varepsilon \frac{\partial \widehat{\xi}}{\partial k_m} \widehat{F}'_\varepsilon, \end{aligned}$$

перепишем  $D_{lm}$  в виде

$$\begin{aligned} D_{lm} &= -4 \int n_\varepsilon \text{Sp} \left\{ \frac{\partial \widehat{\xi}}{\partial k_l} \frac{\partial \widehat{G}_\varepsilon''}{\partial k_m} \right\} \frac{d^3 k d\varepsilon}{(2\pi)^4} = \\ &= -4 \int n_\varepsilon \text{Sp} \left\{ \frac{\partial \widehat{\xi}}{\partial k_l} \left[ \widehat{G}'_\varepsilon \frac{\partial \widehat{\xi}}{\partial k_m} \widehat{G}''_\varepsilon + \widehat{G}''_\varepsilon \frac{\partial \widehat{\xi}}{\partial k_m} \widehat{G}'_\varepsilon - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \widehat{F}'_\varepsilon \frac{\partial \widehat{\xi}}{\partial k_m} \widehat{F}''_\varepsilon - \widehat{F}''_\varepsilon \frac{\partial \widehat{\xi}}{\partial k_m} \widehat{F}'_\varepsilon \right] \right\} \frac{d^3 k d\varepsilon}{(2\pi)^4}. \quad (16) \end{aligned}$$

Подставив  $D_{lm}$  в форме (16) и выражение (12) для  $\text{Re} Q_{lm}$  с  $\omega = 0$  в (15), получим в результате для  $D_{lm}^{(s)}$ :

$$\begin{aligned} D_{lm}^{(s)} &= 8 \int n_\varepsilon \text{Sp} \left\{ \frac{\partial \widehat{\xi}}{\partial k_l} \left[ \widehat{F}'_\varepsilon \frac{\partial \widehat{\xi}}{\partial k_m} \widehat{F}''_\varepsilon + \widehat{F}''_\varepsilon \frac{\partial \widehat{\xi}}{\partial k_m} \widehat{F}'_\varepsilon \right] \right\} \times \\ &\quad \times \frac{d^3 k d\varepsilon}{(2\pi)^4}. \quad (17) \end{aligned}$$

Из последнего равенства очевидно, что в нормальном состоянии величина  $D_{lm}^{(s)}$  обращается в нуль, а следовательно, исчезает и  $\delta$ -функциональный вклад в проводимость, так как в этом случае аномальные функции  $\widehat{F}_\varepsilon$  обращаются в нуль.

В рассматриваемой модели действительная часть проводимости удовлетворяет следующему правилу сумм:

$$\int_0^\infty \text{Re} \sigma_{lm}(\omega) d\omega = \frac{\pi e^2}{2} D_{lm}. \quad (18)$$

В этом нетрудно убедиться, непосредственно проинтегрировав по частоте выражение (10) с учетом соотношений Крамерса-Кронига, связывающих  $\text{Re} Q$  и  $\text{Im} Q$ . Мы обратимся к правилу сумм (18) при обсуждении полученных результатов.

Рассмотрим случай, когда взаимодействия в зонах имеют разные знаки. Схематическое расположение зон показано на рис.1. В широкой зоне с зако-

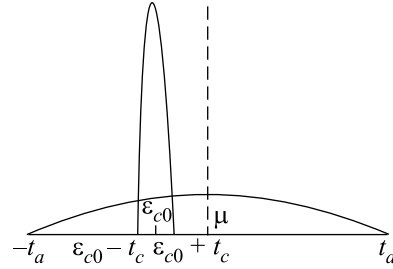


Рис.1. Схематическое расположение зон, соответствующее гамильтониану (1)

ном дисперсии  $\xi_a(\mathbf{k}) = t_a(\cos k_x + \cos k_y)$  имеет место эффективное отталкивание между электронами, а в узкой зоне с дисперсией  $\xi_c(\mathbf{k}) = \varepsilon_{c0} + t_c(\cos k_x + \cos k_y)$  – притяжение, обуславливающее сверхпроводимость. Предполагалось, что химический потенциал  $\mu$  находится в центре широкой зоны. Параметр  $\varepsilon_{c0}$  определяет положение узкой зоны относительно  $\mu$ . Матричный элемент гибридизации брался в виде, соответствующем симметрии  $s$ - и  $d$ -типа исходных атомных орбиталей:  $W(\mathbf{k}) = W_0(\cos k_x - \cos k_y)$ . При вычислениях использовались следующие значения параметров модели:  $t_a = 30$ ,  $W_0 = 5$  (в единицах  $t_c$ ). Кроме того, адекватное вычисление проводимости требует учета какого-либо механизма рассеяния электронов. В данном случае рассматривалось упругое изотропное рассеяние электронов на немагнитных примесях в борновском приближении. При заданных параметрах рассеяния на примесях решение уравнений самосогласования привело к следующим значениям параметров порядка:  $\Delta_a = -0.18$  и  $\Delta_c = 0.81$  (в единицах  $t_c$ ).

Зависимости оптической проводимости от частоты при температуре  $T = 0$  были рассчитаны по формулам (10), (11) с использованием (12)–(14) для разных положений центра узкой зоны  $\varepsilon_{c0}$  относительно химического потенциала. Результаты такого исследования, во-первых, интересно сравнить с результатами в моделях типа БКШ с  $s$ - и  $d$ -симметрией параметра порядка, простейшим обобщением которой является используемая здесь двухзонная модель. Во-вторых, полученные зависимости дают возможность интерпретировать экспериментальные данные в области ВТСП, в частности, эксперименты, результаты которых косвенно свидетельствуют о зависимости симметрии параметра порядка от уровня допирования [20–22], в том числе и оптические измерения [23]. Уровень допирования влияет на концентрацию носителей и, вместе с ней, на положение химического потенциала. Для удобства вычислений положение химического потенциала предполагается фиксированным, а изменение концентрации носителей модели-

руется сдвигом центра узкой зоны  $\varepsilon_{c0}$  относительно химического потенциала. Отметим, что, поскольку в дальнейшем используются значения  $|\varepsilon_{c0}| \ll t_a$ , результаты изменились бы незначительно, если бы, наоборот, положение центра узкой зоны считалось заданным, а зависимости  $\sigma(\omega)$  вычислялись для разных  $\mu$ .

На рис.2а показана действительная часть проводимости  $\text{Re } \sigma$  как функция частоты  $\omega$  в случае, ког-

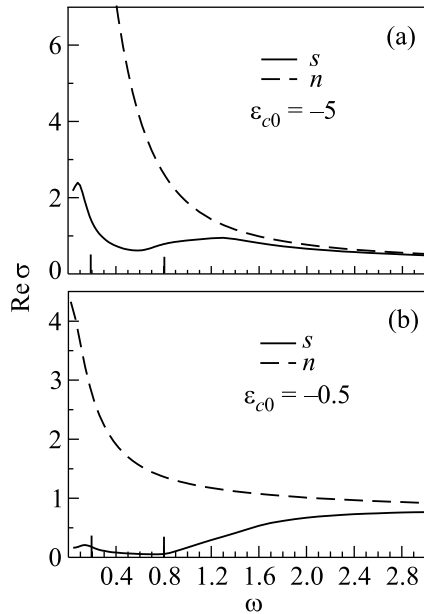


Рис.2. Зависимость действительной части проводимости  $\text{Re } \sigma$  от частоты внешнего электромагнитного поля  $\omega$  для двух значений параметра  $\varepsilon_{c0}$ :  $\varepsilon_{c0} = -5$  (а),  $\varepsilon_{c0} = -0.5$  (б). Сплошная кривая соответствует сверхпроводящему состоянию, пунктирная – нормальному. На горизонтальной оси отмечены частоты, равные используемым при расчетах в данной работе значениям параметров порядка в широкой ( $|\Delta_a| = 0.18$ ) и узкой ( $\Delta_c = 0.81$ ) зонах

да химический потенциал находится вне узкой зоны ( $\varepsilon_{c0} = -5$ ). Отметим, что в отличие от аналогичной зависимости для модели БКШ [24] здесь имеется конечное поглощение при всех частотах, в том числе и в диапазоне  $0 < \omega < \Delta_c$ , что является характерной чертой однозонных моделей с сильноанизотропным параметром порядка, например,  $d$ -типа  $\Delta(\mathbf{k}) = \Delta_0(\cos k_x - \cos k_y)$ . Такое поведение действительной части проводимости связано с отсутствием щели в спектре элементарных возбуждений сверхпроводника. При этом, как и в модели с  $d$ -симметрией параметра порядка,  $\text{Re } \sigma$  сначала убывает с ростом частоты, а затем при некоторой  $\omega$  (здесь  $\omega \sim \Delta_c$ ) начинает увеличиваться и в дальнейшем выходит на асимптотику для нормального состояния. Небольшой

максимум вблизи  $\omega = 0$  связан с наличием отличного от нуля параметра порядка  $\Delta_a$  в широкой зоне.

Ситуация меняется, если химический потенциал сдвигается внутрь узкой зоны. Как видно из рис.2б, в этом случае ( $\varepsilon_{c0} = -0.5$ ) действительная часть проводимости хотя и отлична от нуля при частотах  $0 < \omega < \Delta_c$ , но сильно подавлена по сравнению с рассмотренным выше случаем. Такого рода зависимость  $\text{Re } \sigma(\omega)$  близка к той, которая характерна для однозонной модели с  $s$ -симметрией параметра порядка. Кроме того, сравнение рис.2а и б показывает, что величина  $\text{Re } \sigma$  уменьшается с приближением  $\varepsilon_{c0}$  к 0, причем не только в сверхпроводящем, но и в нормальном состояниях. Качественно эти особенности поведения проводимости можно объяснить, основываясь на анализе формулы Друде с зависящей от частоты величиной обратного времени между столкновениями  $\tau^{-1}(\omega)$ :

$$\text{Re } \sigma(\omega) = \frac{ne^2}{m} \frac{\tau^{-1}(\omega)}{\tau^{-2}(\omega) + \omega^2}. \quad (19)$$

Из (19) следует, что  $\text{Re } \sigma$  тем больше, чем выше концентрация носителей  $n$  и ниже  $\tau^{-1}(\omega)$  (если  $\omega < \tau^{-1}(\omega)$ ). Величину  $\tau^{-1}(\omega)$  можно оценить, если обратиться к приведенным на рис.3а и б кривым плот-

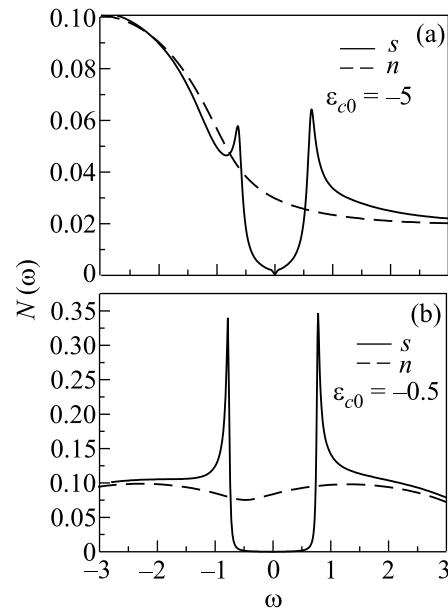


Рис.3. Нормальная и сверхпроводящая плотности состояний для двух положений центра узкой зоны относительно химического потенциала:  $\varepsilon_{c0} = -5$  (а),  $\varepsilon_{c0} = -0.5$  (б)

ности состояний в нормальном и сверхпроводящем случаях для тех же значений параметра  $\varepsilon_{c0}$ , поскольку  $\tau^{-1}(\omega) \propto N(\omega)$ . Из рис.3б видно, что в случае

$\epsilon_{c0} = -0.5$  плотность состояний  $N(\omega)$  практически равна нулю в диапазоне  $|\omega| < \Delta_c$ , то есть рассеяние здесь является очень слабым, что приводит к малой величине  $\text{Re } \sigma$ . Если же  $\epsilon_{c0} = -5$  (рис.3а), то, во-первых, повышается эффективная концентрация носителей  $n$  за счет того, что теперь все состояния узкой зоны находятся ниже химического потенциала, и, во-вторых, плотность состояний, а следовательно, и  $\tau^{-1}(\omega)$  отличны от нуля при любых конечных частотах. В результате действительная часть проводимости в области малых частот возрастает по мере удаления центра узкой зоны от химического потенциала. Таким образом, характер зависимости  $\text{Re } \sigma(\omega)$  меняется с параметром  $\epsilon_{c0}$ , демонстрируя с уменьшением  $|\epsilon_{c0}|$  переход от картины, свойственной сверхпроводникам с  $d$ -симметрией параметра порядка в однозонной модели, к картине, возникающей в модели БКШ. Заметим, что в ВТСП экспериментально наблюдалось подобное изменение поведения оптических свойств этих соединений при переходе от недопированного режима к передопированному [23].

Графическая интерпретация правила сумм (18) состоит в том, что площадь под кривой  $\text{Re } \sigma(\omega)$  должна быть равна величине  $\pi e^2 D/2$  вне зависимости от того, находится ли система в сверхпроводящем или нормальном состоянии. Однако из рис.2а и б видно, что площадь под сплошной кривой меньше, чем под пунктирной. Тем не менее, правило сумм (18) не нарушается, поскольку в сверхпроводящем состоянии существует еще  $\delta$ -функциональный вклад в проводимость (см. (10)), учет которого в интеграле (18) приводит к компенсации “недостающей” площади [25].

Наличие такого вклада в  $\text{Re } \sigma$  тесно связано с тем фактом, что мнимая часть проводимости в сверхпроводящем состоянии, изображенная на рис.4а и б сплошными линиями, обратно пропорциональна частоте при малых значениях последней (см. формулы (10), (11)). Коэффициент пропорциональности, согласно (11), (15), равен  $e^2 D^{(s)}$  и, очевидно, обращается в нуль при переходе в нормальное состояние, для которого в соответствии с формулой Друде (19) при малых частотах  $\text{Im } \sigma$  линейно зависит от  $\omega$  (пунктирные линии на рис.4а и б).

Полученные в данной модели зависимости  $\sigma(\omega)$  проявляют все основные черты, характерные для сверхпроводящего состояния вообще:  $\delta$ -функциональный вклад в действительную часть проводимости, возникающая при анализе правила сумм “недостающая” площадь, а также зависимость вида  $1/\omega$  мнимой части проводимости при  $\omega \rightarrow 0$ . Следует отметить, что все перечисленные здесь особенности тесно связаны между собой, и знание, например, ве-

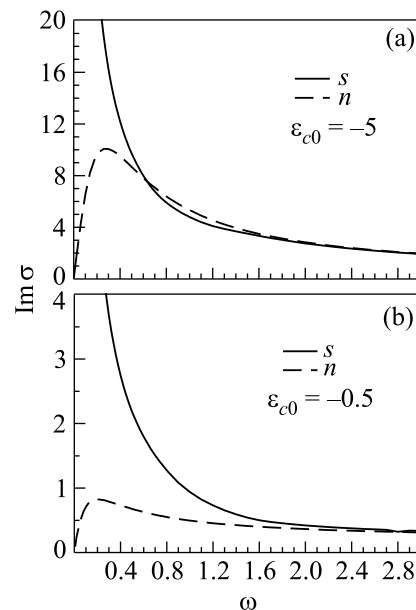


Рис.4. Зависимость мнимой части проводимости  $\text{Im } \sigma$  от частоты внешнего электромагнитного поля  $\omega$  для двух значений параметра  $\epsilon_{c0}$ :  $\epsilon_{c0} = -5$  (а),  $\epsilon_{c0} = -0.5$  (б)

личины “недостающей площади” означает знание коэффициента перед  $1/\omega$  в  $\text{Im } \sigma$ . Поэтому правило сумм является полезным инструментом для проверки правильности численного расчета проводимости в сложных моделях, в которых невозможно получить для нее аналитическое выражение. В наших расчетах эти величины совпадают с погрешностью не более 1%.

Отличительной чертой именно ВТСП-систем является наличие конечного поглощения в области малых частот, причем наиболее отчетливо оно проявляется в недопированных и некоторых оптимально допированных образцах [23]. И, несмотря на то, что появление поглощения может быть объяснено и в рамках однозонной модели с  $d$ -симметрией параметра порядка, в такой простой модели возникает следующая серьезная проблема. Дело в том, что учет рассеяния электронов на примесях в этой модели приводит, как известно, к подавлению сверхпроводимости. В результате появляется существенное ограничение на возможную величину концентрации примесей и связанное с ней обратное время между столкновениями  $\tau^{-1}$ . Детальные вычисления в модели с  $d$ -симметрией параметра порядка показали, что экспериментально наблюдаемая остаточная проводимость в области малых частот оказывается слишком большой для любого реалистичного выбора  $\tau^{-1}$  [9, 11]. Такая проблема не возникает в используемом в данной работе подходе, поскольку примеси в нем слабо влияют

на критическую температуру сверхпроводящего перехода [26].

Таким образом, показано, что в соединениях с достаточно сложной кристаллической структурой поведение оптической проводимости в сверхпроводящем состоянии не обязано следовать зависимости, полученной в модели БКШ с определенным типом симметрии параметра порядка (в нашем случае  $s$ - или  $d$ -типа). При наличии в элементарной ячейке нескольких атомов с орбиталями различной симметрии рассмотренный подход приводит к зависимости  $\sigma(\omega)$ , резко отличающейся от результата Маттиса-Бардина [24], несмотря на то, что затравочное взаимодействие между электронами предполагалось изотропным. Для той симметрии атомных орбиталей, которая характерна для CuO плоскостей [17], воспроизводятся качественные черты зависимостей, наблюдаемых экспериментально в высокотемпературных сверхпроводниках: конечное поглощение во всем интервале частот, минимум действительной части проводимости и резкий ее подъем в области малых частот. Следует отметить, что рост  $\text{Re } \sigma(\omega)$  при малых  $\omega$  в экспериментах оказывается более сильным, чем показано на рис.2. Это можно объяснить тем, что измерения спектров пропускания и отражения обычно проводятся при конечных температурах. В этом случае дополнительный вклад в проводимость вносят еще и термически возбужденные квазичастицы. В данной работе такой вклад отсутствует в связи с тем, что исследуется случай  $T = 0$ .

Существенно также, что характер зависимостей  $\text{Re } \sigma(\omega)$  сильно меняется при легировании (изменении химпотенциала), хотя величина и симметричные свойства межэлектронного взаимодействия остаются неизменными. Зависимость, свойственная сильноанизотропному параметру порядка  $d$ -типа, меняется на характерную для обычных сверхпроводников с параметром порядка  $s$ -типа. Такое поведение проводимости также качественно согласуется с рядом экспериментальных данных для ВТСП.

В заключение хотелось бы еще раз подчеркнуть, что в реальном соединении с несколькими атомами в элементарной ячейке существенное отличие сверхпроводящих свойств от модели БКШ может возникать из-за нетривиального строения электронных состояний на уровне Ферми (суперпозиция атомных орбиталей разной симметрии), а не только за счет сложного типа сверхпроводящего спаривания.

Настоящая работа выполнена при поддержке гранта Российского фонда фундаментальных исследований # 05-02-17074, программы Президента РФ по поддержке ведущих научных школ НШ-4464.2006.2.

1. R. E. Glover and M. Tinkham, Phys. Rev. **104**, 844 (1956).
2. A. V. Puchkov, T. Timusk, S. Doyle et al., Phys. Rev. B **51**, 3312 (1995).
3. D. N. Basov, R. Liang, D. A. Bonn et al., Phys. Rev. Lett. **74**, 598 (1995).
4. C. C. Homes, B. P. Clayman, J. L. Peng et al., Phys. Rev. B **56**, 5525 (1997).
5. N. L. Wang, S. Tajima, A. I. Rykov et al., Phys. Rev. B **57**, R11081 (1998).
6. C. Bernhard, T. Holden, J. Humlicek et al., Solid State Commun. **121**, 93 (2002).
7. A. Pimenov, A. V. Pronin, A. Loidl et al., Europhys. Lett. **64**, 246 (2003).
8. J. Hwang, T. Timusk, and G. D. Gu, J. Phys. Cond. Matter **19**, 125208 (2007).
9. J. P. Carbotte, C. Jiang, D. N. Basov et al., Phys. Rev. B **51**, 11798 (1995).
10. M. J. Graf, M. Palumbo, D. Rainer et al., Phys. Rev. B **52**, 10588 (1995).
11. S. M. Quinlan, P. J. Hirschfeld, and D. J. Scalapino, Phys. Rev. B **53**, 8575 (1996).
12. C. T. Rieck, K. Scharnberg, and J. Ruvalds, Phys. Rev. B **60**, 12432 (1999).
13. J. P. Carbotte and E. Schachinger, Phys. Rev. B **69**, 224501 (2004).
14. S.-J. Xiong and L. Chen, Phys. Rev. B **70**, 014502 (2004).
15. D. N. Basov and T. Timusk, Rev. Mod. Phys. **77**, 721 (2005).
16. O. Jepsen, O. K. Andersen, I. Dasgupta et al., J. Phys. Chem. Solids **59**, 1718 (1998).
17. С. О. Лойко, Н. К. Федоров, П. И. Арсеев, ЖЭТФ **121**, 453 (2002).
18. P. I. Arseyev, N. K. Fedorov, and B. A. Volkov, Solid State Commun. **100**, 581 (1996).
19. П. И. Арсеев, С. О. Лойко, Н. К. Федоров, УФН **176**, 3 (2006).
20. N.-C. Yeh, C.-T. Chen, G. Hammerl et al., Phys. Rev. Lett. **87**, 087003 (2001).
21. J. A. Skinta, M.-S. Kim, T. R. Lemberger et al., Phys. Rev. Lett. **88**, 207005 (2002).
22. A. Biswas, P. Fournier, M. M. Qazilbash et al., Phys. Rev. Lett. **88**, 207004 (2002).
23. A. V. Pronin, A. Pimenov, A. Loidl et al., Phys. Rev. B **68**, 054511 (2003).
24. D. C. Mattis and J. Bardeen, Phys. Rev. **111**, 412 (1958).
25. M. Tinkham and R. A. Ferrell, Phys. Rev. Lett. **2**, 331 (1959).
26. P. I. Arseev, N. K. Fedorov, and S. O. Loiko, Solid State Commun. **124**, 257 (2002).