Физика низких температур, 1996, т. 22, № 5, с. 547–550

Фононная структура в туннельной проводимости — возможный ключ к механизму высокотемпературной сверхпроводимости

А. И. Дьяченко, В. М. Свистунов

Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина НАН Украины, Украина, 340114, г. Донецк, ул. Р. Люксембург, 72

Прямым решением уравнений Элиашберга исследовано, насколько эффекты анизотропии влияют на фононную структуру в производной d^2I/dV^2 туннельного тока. Проанализировано s- и d-спаривание, а также влияние примесного рассеяния. Показано, что при сильной анизотропии энергетической щели сверхпроводника $\Delta(\mathbf{k})$ фононная структура в d^2I/dV^2 остается «изотропной» и должна наблюдаться при $eV = \hbar\omega + \langle\Delta\rangle$, где ω — частота фононной особенности, а эффективная щель $\langle\Delta\rangle$ близка к максимальной величине $\Delta(\mathbf{k})$. Факторы, размывающие фононную структуру, можно учесть, заменяя в формуле Дайнса для $N(\omega, \Gamma)$ комплексный параметр энергетической щели $\Delta(\omega)$ на $\Delta(\omega + i\Gamma)$.

Прямим рішенням рівнянь Еліашберга досліджено, наскільки ефекти анізотропії впливають на фононну структуру в похідній d^2I/dV^2 тунельного струму. Проаналізовано s- і d-спарювання, а також вплив домішкового розсіяння. Показано, що при сильній анізотропії енергетичної щілини надпровідника $\Delta(\mathbf{k})$ фононна структура в d^2I/dV^2 залишається «ізотропною» і повинна спостерігатися при $eV = \hbar\omega + \langle\Delta\rangle$, де ω — частота фононної особливості, а ефективна щілина $\langle\Delta\rangle$ близька до максимальної величини $\Delta(\mathbf{k})$. Фактори, які розмивають фононну структуру, можна урахувати, замінюя в формулі Дайнса для $N(\omega, \Gamma)$ комплексний параметр енергетичної щілини $\Delta(\omega)$ на $\Delta(\omega + i\Gamma)$.

Туннельный эффект убедительно доказал существование энергетической щели в высокотемпературных сверхпроводниках (ВТСП) [1,2]. С фононной структурой в проводимости туннельных контактов ситуация сложнее [2,3]. Между тем уверенное ее наблюдение может помочь разобраться в механизме ВТСП. Например, если этот механизм — просто модифицированное электрон-фононное взаимодействие (ЭФВ), то для обеспечения высокой критической температуры T_c при сохранении структурной устойчивости решетки в сверхпроводнике должен преобладать вклад высокочастотных фононных мод с $\hbar\omega \geq 40$ мэВ. В таком случае $T_c = 120$ К достигается при константе ЭФВ $\lambda \approx 2$ и кулоновском псевдопотенциале $\mu^* = 0{,}1$ [4]. Преобладание такого высокочастотного вклада привело бы к усилению соответствующих фононных особенностей в производной туннельной проводимости $d\sigma/dV = d^2I/dV^2$ по сравнению с их интенсивностью в фононной плотности состояний $F(\omega)$. Если же механизм ВТСП существенно иной природы, то возможны две основные ситуации. При высокочастотной природе механизма спаривания (характерные частоты возбуждений $\Omega >> \omega_D$, ω_D — дебаевская частота) низколежащие фононные моды будут искажаться этим механизмом слабо, поэтому фононная структура в $d\sigma/dV$ должна соответствовать интенсивности пиков $F(\omega)$. Низкочастотные же моды нефононной природы ($\Omega << \omega_D$) можно отличить от фононных особенностей по их энергетическому положению и по интенсивности (относительно фононов).

Реализация такой программы не требует разрешения полной задачи восстановления анизотропной по волновому вектору $\mathbf{k}$ функции ЭФВ $g(\omega, \mathbf{k}) = \alpha^2(\omega, \mathbf{k})\, F(\omega, \mathbf{k})$, строгое решение которой в настоящее время проблематично. На первый момент достаточно установить надежное соответствие между фононными особенностями в производной туннельного тока d^2I/dV^2 и структурой фононного спектра $F(\omega)$, чтобы по относительной величине фононных рефлексов судить об эффективности той или иной фононной моды.

Как показано в данной работе, наблюдению фононных особенностей в производной туннельного тока d^2I/dV^2 анизотропных ВТСП способствует тот факт, что пик плотности состояний $F(\omega)$ при $\omega = \Omega_0$ приводит к пику $-d^2I/dV^2$ при смещении $eV_0 = \hbar\Omega_0 + \overline{\Delta}$, где $\overline{\Delta}$ — характерная для данного

© А. И. Дьяченко, В. М. Свистунов, 1996

анизотропного сверхпроводника эффективная энергетическая щель. Соотношение $eV_0 = \hbar\Omega_0 + \bar{\Delta}$ сохраняется даже в том случае, когда туннелирование происходит практически в одном кристаллографическом направлении, скажем, нормально к плоскости ab, когда энергетическая щель Δ_c купратов может существенно отличаться от $\bar{\Delta} \approx \langle\Delta_{ab}\rangle$.

Отражение фононной структуры в туннельных характеристиках сильно анизотропных сверхпроводников

Основной задачей вычислений было выяснение характера отражения структуры фононной плотности состояний $F(\omega)$ в производной туннельной проводимости d^2I/dV^2 анизотропного сверхпроводника. Соответствующие анизотропные уравнения Элиашберга и метод их решения приведены в работе [5]. Для изотропных сверхпроводников производная d^2I/dV^2 хорошо отражала сингулярности Ван-Хова в $F(\omega)$, что, в первую очередь, связано с корневой БКШ-особенностью в плотности состояний квазичастиц $N(\omega)$. Различные типы ванхововских сингулярностей при $\omega = \omega_0$ приводили к большому разнообразию поведения d^2I/dV^2 в окрестности напряжений смещения $eV = \Delta_0 + \omega_0$ [6]. В нашем случае ядра анизотропных уравнений Элиашберга [5] задаются функциями $N_c(\omega) = \{N(\omega, \mathbf{k})\, f(\mathbf{k})\}_{\mathbf{k}}$, $Q_c(\omega) = \{Q(\omega, \mathbf{k})\, f(\mathbf{k})\}_{\mathbf{k}}$, усредненными (с некоторым весовым множителем $f(\mathbf{k})$) по поверхности Ферми. Эти функции имеют только слабую логарифмическую сингулярность при $\omega = \bar{\Delta} \approx \Delta_{\max}$, где $\Delta_{\max}$ — максимальное значение энергетической щели в плоскости ab. Такая особенность легко размывается (в частности, распаривающим воздействием реальных [4] и виртуальных [5] фононов). Кроме того, пространственные неоднородности, которые обычно имеются в купратах, существенно «замывают» слабые сингулярности Ван-Хова в фононном спектре. Поэтому в туннельных характеристиках наиболее ярко будут проявляться пики фононной плотности состояний $F(\omega)$ и конец фононного спектра ω_D.

Процедура вычисления состояла в следующем. Задавалась функция $g(\omega) = \alpha^2(\omega)\, F(\omega)$, где $F(\omega)$ — известный (либо модельный [5]) фононный спектр, а амплитуда $\alpha^2(\omega)$ подбиралась таким образом, чтобы в изотропном пределе вычисленное значение критической температуры сверхпроводника составляло $T_c = 92$ К. Параметр μ^* изменялся в пределах $\mu^* = -0{,}05$–$0{,}15$ (отрицательным значениям кулоновского псевдопотенциала μ^* соответствуют различные нефононные механизмы спаривания с большими характерными частотами $\Omega_{\text{eff}} >> \omega_D$). Одновременно вычислялась соответствующая изотропная энергетическая щель Δ_0 при $T = 0$. Это значение использовалось для затравки итерационного решения анизотропных уравнений [5]. После 6–8 итераций определялась анизотропная щель $\Delta(\omega, \mathbf{k})$, которая использовалась для вычисления усредненной туннельной плотности состояний $N(\omega) = \langle N(\omega, \mathbf{k})\rangle_{\mathbf{k}}$, а также плотностей состояний $N(\omega, \mathbf{k})$ в заданных направлениях $\mathbf{k}$.

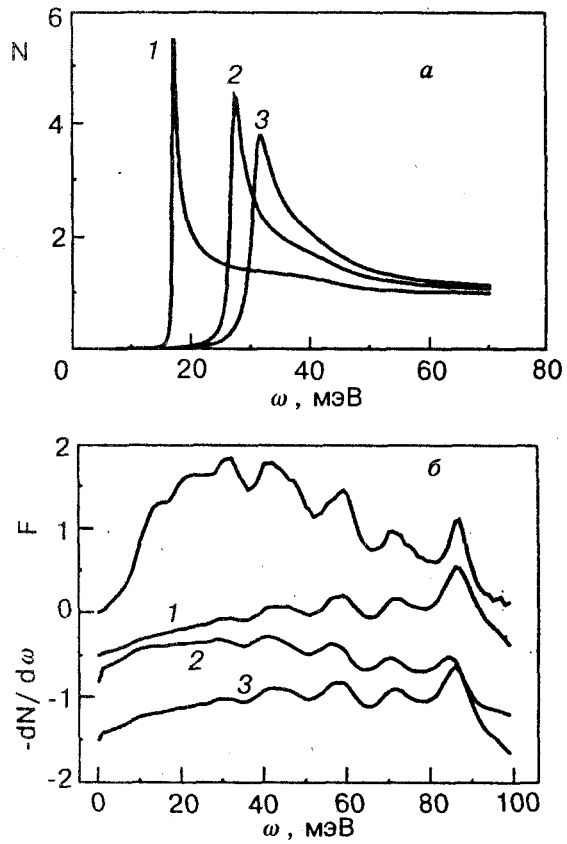

Рис. 1. Туннельные плотности состояний $N(\omega)$ анизотропного сверхпроводника (*а*) и соответствующие производные $dN/d\omega \sim d^2I/dV^2$ (*б*) (пояснения даны в тексте). Сдвиг кривых по оси ординат произволен, кривые $dN/d\omega$ сдвинуты по оси абсцисс влево на величину «эффективной» щели $\bar{\Delta}$.

Фононные плотности состояний купратов $F(\omega)$ обнаруживают значительное сходство, что позволило использовать в расчетах фононный спектр $F(\omega)$ лантана [7], который содержит все характерные для оксидов особенности $F(\omega)$ (рис. 1,*б*). На рис. 1,*а* приведена функция $N(\omega, \mathbf{k})$, вычисленная для трех направлений туннелирования (вдоль оси c (*1*), под углом 45° к плоскости ab (*2*) и в плоскости ab (*3*); электроны туннелируют в конусе с углом раствора ±5°). Как видно из рис. 1,*б*, независимо от направления туннелирования $\mathbf{k}$

пики в фононной структуре при энергиях Ω_i отражаются в виде пиков $-N(\omega) \sim -d^2I/dV^2$ при частотах $\omega_i = \Omega_i + \bar{\Delta}$.

Причина, по которой фононные особенности не следуют за значением энергетической щели в направлении туннелирования k, а «привязаны» к эффективной щели $\bar{\Delta}$, связана с тем, что весовой множитель $f(\mathbf{k})$ [5] дает преимущество направлениям k, расположенным в плоскости *ab*. Поэтому ядро $Q_c(\omega) = \{Q(\omega, \mathbf{k})\, f(\mathbf{k})\}_{\mathbf{k}}$ имеет сравнительно острый максимум при $\omega = \bar{\Delta}$, что в конечном итоге и определяет положение фононной структуры. Фононные особенности не только «привязаны» к одной и той же эффективной щели $\bar{\Delta}$, но имеют также сходную форму (рис. 1,*б*), которая задается формой ядра $Q_c(\omega)$ в окрестности $\bar{\Delta}$.

Размытие фононной структуры

Таким образом, даже сильная анизотропия энергетической щели не препятствует проявлению фононной структуры в производной туннельной проводимости d^2I/dV^2. Этот результат связан со структурой уравнений Элиашберга и имеет поэтому общий характер, т.е. справедлив как для *s*-, так и для *d*-спаривания (последнее утверждение проверялось прямым расчетом). Однако процессы разрыва пар размывают фононную структуру в d^2I/dV^2, так как при этом увеличивается фактор затухания Γ. При обработке экспериментальных данных для описания плотности состояний сверхпроводников с учетом эффектов распаривания обычно используют формулу Дайнса [1,2]

$$N_D(\omega) = \mathrm{Re}\left\{\frac{(\omega + i\Gamma)}{\left[(\omega + i\Gamma)^2 - \Delta^2\right]^{1/2}}\right\}.$$

Покажем, что при сильном ЭФВ обобщение формулы Дайнса имеет вид

$$N(\omega + i\Gamma) \equiv N_\Gamma(\omega) =$$

$$= \mathrm{Re}\left\{\frac{(\omega + i\Gamma)}{\left[(\omega + i\Gamma)^2 - \Delta^2(\omega + i\Gamma)\right]^{1/2}}\right\}, \quad (1)$$

где $\Delta(\omega)$ — комплексный параметр энергетической щели сверхпроводника при отсутствии процессов разрыва пар. Воспользуемся аналитичностью функции распаривания $\varphi(\omega)$ и параметра перенормировки $Z(\omega)$ в верхней части комплексной переменной $z = \omega + i\Gamma$. В этой плоскости вместо обычного уравнения (анализируем изотропный предел уравнений [5])

$$\mathrm{Im}\,\{\varphi(\omega)\} = \pi \int_0^{\omega} d\Omega\, \alpha^2F(\Omega)\, Q(\omega - \Omega)$$

получаем

$$\mathrm{Im}\,\{\varphi(z)\} = \pi \int_0^{\infty} d\Omega\, \alpha^2F(\Omega)\, Q_0(z - \Omega) \quad ,$$

где интегральное ядро Q_0 задается соотношением

$$Q_0(z) \approx \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, Q(x)\, \frac{\Gamma}{(\omega - x)^2 + \Gamma^2} =$$

$$= \frac{1}{\pi}\, \mathrm{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{Q(x)}{x - \omega - i\Gamma}\, dx =$$

$$= \mathrm{Re}\left\{-\frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{Q(x + i\delta)}{x - z}\, dx\right\} = Q_\Gamma(\omega)\,,$$

$$Q_\Gamma(\omega) \equiv \mathrm{Re}\left\{\frac{\Delta(\omega + i\Gamma)}{\left[(\omega + i\Gamma)^2 - \Delta^2(\omega + i\Gamma)\right]^{1/2}}\right\},$$

т.е.

$$\mathrm{Im}\left\{\varphi(\omega + i\Gamma)\right\} = \pi \int_0^{\infty} d\Omega\, \alpha^2F(\Omega)\, Q_\Gamma(\omega - \Omega)\,. \quad (2)$$

Аналогично для функции перенормировки $Z(\omega)$ получаем

$$\mathrm{Im}\left\{(\omega + i\Gamma)\, Z(\omega + i\Gamma)\right\} =$$

$$= \pi \int_0^{\infty} d\Omega\, \alpha^2F(\Omega)\, N_\Gamma(\omega - \Omega)\,. \quad (3)$$

Действительные части функций φ и Z находятся из мнимых частей (2), (3) с помощью дисперсионных соотношений [5]. Уравнения (2), (3) являются обобщенными уравнениями Элиашберга, учитывающими с помощью поправки Γ влияние различных факторов распаривания (в том числе и эффекты анизотропии). Однако решать их нет необходимости, достаточно воспользоваться аналитическим продолжением решения невозмущенных уравнений для $\Delta(\omega)$, тогда решение дается формулой $\Delta(\omega, \Gamma) \equiv \Delta(\omega + i\Gamma)$, а плотность состояния — формулой (1) (рис. 2). Обращение уравнений (2), (3) позволяет определить усредненную по направлениям k функцию ЭФВ $\alpha^2F(\omega)$ анизотропного сверхпроводника, следуя схеме:

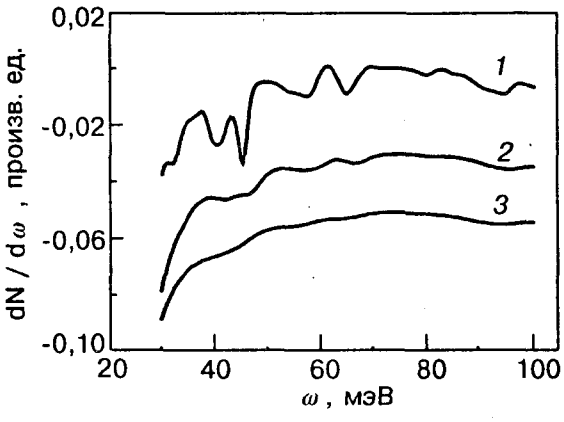

Рис. 2. Сглаживание фононной структуры в $dN/d\omega \sim d^2I/dV^2$ при параметрах Дайнса Γ, мэВ: 0 (*1*), 2 (*2*) и 4 (*3*); энергетическая щель $\Delta_0 = 20$ мэВ.

экспериментальная кривая $d^2I/dV^2 \to N_\Gamma(\omega) \to$ $\to \Delta(\omega + i\Gamma) \to \Delta(\omega) \to \alpha^2F(\omega)$.

Заключение

Давно отмечен парадоксальный факт, что в проводимости туннельного контакта с анизотропным сверхпроводником анизотропия фононной структуры практически отсутствует [8]. В то же время анизотропные эффекты хорошо проявляются в родственном эксперименте — микроконтактной спектроскопии [9]. Как следует из проведенного анализа, такое различие обусловлено устройством интегральных ядер в уравнениях Элиашберга. С другой стороны, фононная структура в туннельных характеристиках устойчива к различным причинам, замывающим туннельную плотность состояний $N(\omega, \mathrm{k})$ анизотропного s- (d-)сверхпроводника. Она может существенно размыться только при достаточно большом факторе распаривания Γ, когда $\Gamma/\Delta \geq 0{,}1$ (рис. 2).

Работа выполнена в рамках проектов «Сэндвич» и «Экситон», поддержанных Государственным комитетом Украины по вопросам науки и технологий и Комитетом Сороса по индивидуальным грантам (АИД) и грантом ISSEP SPU 042058 (ВМС).

1. J. R. Kirtley, *Int. J. Mod. Phys.* **4**, 201 (1990).
2. В. М. Свистунов, М. А. Белоголовский, А. И. Хачатуров, *УФН* **163**, 61 (1993).
3. T. Hasegava, H. Ikuta, and K. Kitazava, in: *Physical Properties of High Temperature Siperconductors*, vol. III, D. M. Ginsberg (ed.), World Scientific, Singapore (1992).
4. В. Л. Гинзбург, Е. Г. Максимов, *СФХТ* **5**, 1543 (1992).
5. А. И. Дьяченко, *ФНТ* **20**, 793 (1994).
6. D. J. Scalapino and P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **133**, 921 (1964).
7. B. Renker, F. Gompf, E. Gering, et al., *Z. Phys.* **B67**, 15 (1987).
8. Е. Л. Вольф, *Принципы электронной туннельной спектроскопии*, Наукова думка, Киев (1990).
9. И. К. Янсон, А. Г. Батрак, *Письма в ЖЭТФ* **27**, 212 (1978).

Phonon structure in tunnel conductivity as a possible key to high-T_c superconductivity mechanism

A. I. Diachenko and V. M. Svistunov

Through a direct solution of the Eliashberg equations it is studied how much the anisotropy effects impact on the reflection of the phonon structure in the derivative d^2I/dV^2 of the tunnel current. The s- and d-pairing, as well as the impurity scattering influence, are analysed. It is shown that with strong anisotropy of the energy gap $\Delta(\mathrm{k})$ of the superconductor, the phonon structure remains «isotropic» in the d^2I/dV^2 and is expected at $eV = \hbar\omega + \langle\Delta\rangle$, where ω is the frequency of the phonon feature, and the effective gap $\langle\Delta\rangle$ is close to the maximum value $\Delta(\mathrm{k})$. The factors responsible for smearing of the phonon structure can be taken into account replacing the complex parameter of the energy gap $\Delta(\omega)$ by $\Delta(\omega + i\Gamma)$ in the Dynes formula for $N(\omega, \Gamma)$.