

# О ВОЗМОЖНОЙ ПРИРОДЕ ПСЕВДОЩЕЛЕВЫХ АНОМАЛИЙ В ВТСП

*K. B. Мицен,\*, O. M. Иваненко*

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

Поступила в редакцию 24 марта 2008 г.

В рамках предложенной модели ВТСП, в которой взаимодействие электронов валентной зоны с двухатомными отрицательными  $U$ -центрами полагается ответственным за аномальные свойства этих соединений, дано объяснение природы псевдощели и псевдощелевых аномалий (включая гигантский эффект Нернста, аномальный диамагнетизм выше  $T_c$ , «перенос» оптического спектрального веса и др.). Для ВТСП  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$  рассчитаны температура открытия псевдощели  $T^*$  и  $T_c$  в зависимости от уровня допирования  $\delta$ . Рассчитанные зависимости количественно согласуются с экспериментально измеренными без использования масштабных подгоночных параметров. Хорошее согласие полученных результатов с экспериментом может служить аргументом в пользу предложенной модели ВТСП.

PACS: 74.20.Mn

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Одной из наиболее ярких особенностей ВТСП является возникновение в спектре возбуждений так называемой псевдощели, т. е. резкого уменьшения плотности состояний спиновых и зарядовых возбуждений при температуре  $T^*$ , которая может намного превышать  $T_c$ . Псевдощель наиболее отчетливо наблюдается в недодированной и слабее в оптимально додированной фазах, причем температура открытия псевдощели  $T^*$  повышается с уменьшением додирования в то время как  $T_c$  падает [1–4].

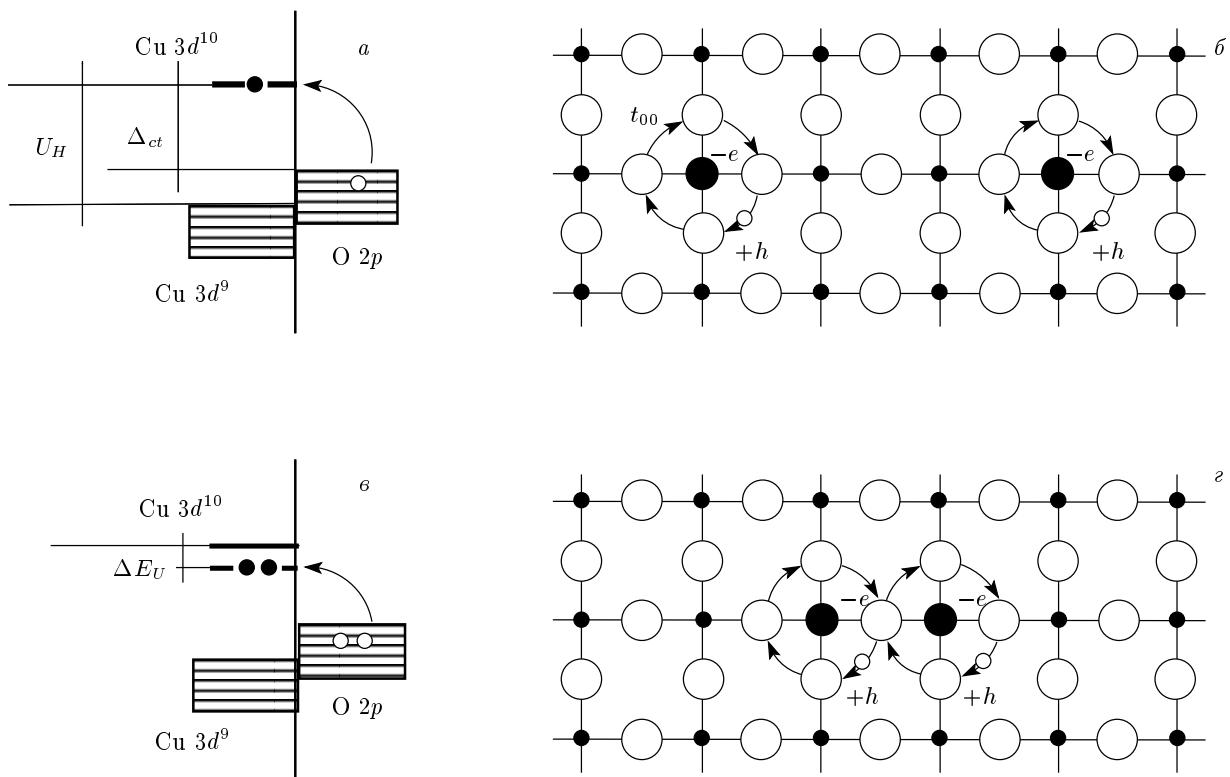
В псевдощелевой области наблюдаются аномалии различных свойств ВТСП [4], к которым следует отнести все особенности, обусловленные уменьшением плотности одночастичных состояний в области «будущей» сверхпроводящей щели (что наблюдается в экспериментах по измерению оптических [5] и туннельных [3, 6] спектров, теплоемкости [1], ЯМР [7], проводимости вдоль оси  $c$  [8] и др.), а также гигантский эффект Нернста [9], аномальный диамагнетизм [10] и пр.

Относительно природы псевдощели и псевдощелевых аномалий существуют различные точки зрения. По мнению большинства исследователей, наблюдаемые аномалии дают основание предполагать

существование в псевдощелевой фазе сильных сверхпроводящих флуктуаций и, таким образом, псевдощель является как бы предвестником сверхпроводимости. Существует и иная точка зрения, заключающаяся в том, что псевдощель и сверхпроводящая щель в ВТСП — это проявления двух конкурирующих параметров порядка, поскольку влияние различных факторов, таких как, например, додирование и разупорядочение, на эти щели разнонаправлено [11].

С другой стороны, как было отмечено, псевдощелевая фаза существует в диапазоне концентраций, соответствующем области недодирования. Характерным свойством образцов в этой области додирования является выраженная пространственная неоднородность электронной плотности и параметра порядка на наномасштабах [12]. При этом важно отметить, что степень неоднородности, как и псевдощель, уменьшается с ростом додирования и исчезает при переходе в оптимально додированную фазу. И, более того, искусственно создание неоднородности в изначально однородных оптимально додированных образцах (например, путем ионного облучения) сопровождается возникновением псевдощели, которая обнаруживается в ARPES [13]. В связи с этим возникает естественный вопрос о связи псевдощелевых аномалий с наномасштабной простран-

\*E-mail: mitsen@sci.lebedev.ru



**Рис.1.** а) Электронный спектр недопированной CuO<sub>2</sub>-плоскости;  $U_H$  — энергия отталкивания двух электронов на ионе Cu. Щель  $\Delta_{ct}$  для возбуждения с наименьшей энергией соответствует переносу электрона с кислорода на ближайший ион Cu с образованием дырки, распределенной по четырем окружающим ионам кислорода (б). в) Энергия двух таких псевдоатомных возбуждений может быть понижена на  $\Delta E_U$ , если они находятся рядом и образуют псевдомолекулу (в)

ственной неоднородностью.

В настоящей работе мы хотим показать, что такое разнонаправленное влияние не противоречит однай и той же (сверхпроводящей) природе обеих щелей. И более того именно такого поведения  $T_c$  и  $T^*$  с изменением уровня допирования или степени беспорядка следует ожидать, если имеют место определенная особенность в электронном спектре ВТСП и связанный с этой особенностью особый механизм электрон-электронного взаимодействия. Кроме того, все наблюдаемые псевдощелевые аномалии [1, 5–10], как следует из приведенного ниже рассмотрения, являются проявлениями этих особых свойств ВТСП.

## 2. МОДЕЛЬ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ВТСП

В работах [14, 15] мы предложили механизм формирования в ВТСП двухатомных отрицательных

$U$ -центров (NUC) и показали, что многие аномальные свойства ВТСП могут являться следствием взаимодействия электронов кислородной подзоны с этими NUC. Такое взаимодействие, как было показано ранее [16–25], может сопровождаться сильной перенормировкой эффективного межэлектронного взаимодействия при учете процессов рассеяния с промежуточными виртуальными связанными состояниями NUC, которое, в свою очередь, способно обеспечить в системе сверхпроводящее спаривание при достаточно высоких температурах.

Суть предложенного механизма можно понять из рис. 1а, где приведен электронный спектр CuO<sub>2</sub>-плоскости недопированного ВТСП. Известно, что электронная структура диэлектрической фазы ВТСП в окрестности энергии Ферми  $E_F$  хорошо описывается моделью диэлектрика со щелью, связанной с переносом заряда. В этой схеме энергии 3d<sup>9</sup>- и 3d<sup>10</sup>-состояний Cu отстоят друг от друга величину  $U_H$ , энергию отталкивания двух элек-

tronov на Cu. Энергия же самого низколежащего возбуждения  $\Delta_{ct}$  (порядка 2 эВ) соответствует переносу электрона с кислорода на соседний ион меди (рис. 1a). Дырка при этом распространена по четырем окружающим кислородным ионам вследствие перекрытия орбиталей соседних кислородных ионов ( $t_{00}$  — интеграл пересека между  $p\sigma$ -орбиталями ближайших кислородных ионов) (рис. 1б). Это возбуждение (электрон на меди и дырка на окружающих кислородных ионах) напоминает водородный атом. Можно пойти дальше и предположить, что энергия двух возбуждений будет меньше (рис. 1в), если два таких псевдоатома находятся рядом и образуют как бы псевдомолекулу водорода (рис. 1г). Это оказывается возможным при определенных условиях за счет образования связанного состояния (гайтлер-лондоновского типа) двух электронов на соседних ионах Cu и двух дырок, возникающих в ближайшей окрестности этой пары катионов. Подобная система из двух взаимодействующих пар электронов и дырок рассматривалась в работе [26]. В нашей модели связанное состояние возникает за счет возможности дырок находиться в пространстве между ионами Cu, притягиваясь одновременно к двум электронам, находящимся на этих ионах. Помимо этого, дополнительный вклад в энергию взаимодействия дает и «экономия» одной разорванной АФМ-связи при переходе двух электронов на соседние ионы Cu.

Таким образом, в энергетическом спектре исходного диэлектрика в случае ВТСП появляется парный уровень, лежащий на  $\Delta E_U$  ниже дна верхней хаббардовской  $3d^{10}$ -подзоны (рис. 1б). Дополнительное понижение энергии  $\Delta E_U$  за счет перехода двух электронов на соседние катионы в нашем случае может быть оценено, исходя из аналогии с молекулой  $H_2$ . Эта аналогия тем более уместна, что расстояние между ионами Cu в  $CuO_2$ -плоскости  $R_{Cu} \sim 4 \text{ \AA}$ , т. е.  $R_{Cu} \sim \varepsilon_\infty R_0$ , где  $\varepsilon_\infty \approx 4.5-5$  [27] — высокочастотная диэлектрическая проницаемость, а  $R_0$  — расстояние между ядрами в молекуле  $H_2$ . Поэтому  $\Delta E_U \sim \Delta E_{H_2}/\varepsilon_\infty^2 + J \approx 0.35 \text{ эВ}$ , где  $\Delta E_{H_2} = 4.75 \text{ эВ}$  — энергия связи в молекуле  $H_2$ , а  $J = 0.12 \text{ эВ}$  — энергия одной АФМ-связи [28]. Если уменьшать  $\Delta_{ct}$  до тех пор, пока щель для двухчастичных переходов исчезнет, но сохранится щель  $\Delta'_{ct}$  для одночастичных переходов, то мы получим систему, в которой электроны валентной зоны смогут эффективно взаимодействовать с парными состояниями NUC.

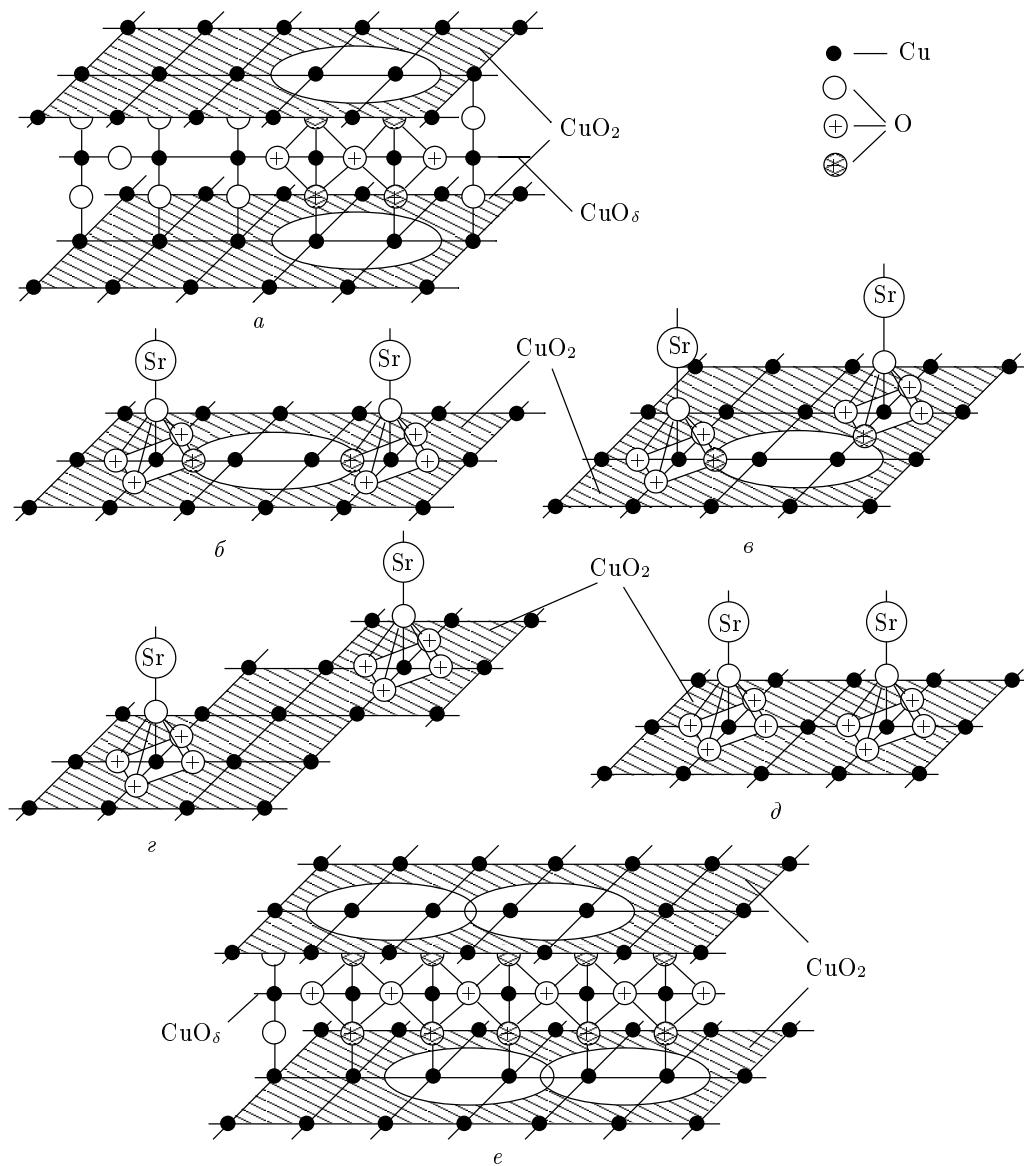
Как это можно осуществить на практике? Самый простой способ — расположить в непосредствен-

ной близости от каждого катиона Cu (из данной пары Cu-ионов в  $CuO_2$ -плоскости) соответствующий положительный заряд, который понизит энергию  $3d^{10}$ -состояния каждого катиона Cu таким образом, чтобы парный уровень NUC оказался ниже потолка валентной зоны. И именно это, как мы далее увидим, имеет место в ВТСП при допировании.

На рис. 2 приведены структурные фрагменты ВТСП-соединений  $YBa_2Cu_3O_{6+\delta}$  и  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ . В первом случае допирование изначального диэлектрического соединения  $YBa_2Cu_3O_6$  осуществляется путем введения в плоскость цепочек избыточного кислорода с концентрацией  $\delta$ . В случае, когда в цепочке три позиции подряд заняты кислородными ионами, в каждом из образованных кислородных квадратов находится по одной дырке (кружок с «+»), каждая из которых распределена по четырем кислородным ионам данного квадрата. При этом дополнительные положительные заряды величиной примерно  $+e/4$ , которые находятся на ионах кислорода, ближайших к плоскостным ионам Cu (заштрихованные кружки с «+»), оказывают определяющее влияние на уровни энергии Cu, понижая энергию  $3d^{10}$ -состояния этих ионов. Поскольку можно считать, что экранирование заряда существует на расстояниях больших межатомного, но отсутствует на меньших расстояниях, эти заряды фактически не экранированы. Принимая во внимание только взаимодействие ближайших соседей, можно оценить понижение энергии этого состояния на ближайшем ионе Cu за счет допирования:  $\Delta E = e^2/4r \approx 1.8-1.9 \text{ эВ} \leq \Delta_{ct}$  (здесь  $r \approx 0.2 \text{ нм}$  — расстояние между ближайшими ионами Cu и O). Мы полагаем, что такого понижения энергии достаточно, чтобы парное состояние, которое лежит на 0.17 эВ (в расчете на 1 электрон) ниже одночастичного, достигло потолка валентной зоны и на этой паре Cu-ионов сформировался активный NUC.

Рассмотрим теперь  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ . В этом случае допированные дырки, возникающие при замещении  $La^{3+}$  на  $Sr^{2+}$ , находятся в  $CuO_2$ -плоскости и локализованы на четырех ионах кислорода, принадлежащих кислородному октаэдру, смежному с ионом Sr [29, 30]. Как и в предыдущем случае, дополнительные положительные заряды величиной примерно  $+e/4$ , которые находятся на ионах кислорода, ближайших к ионам Cu (заштрихованные кружки с «+»), понижают энергию  $3d^{10}$ -состояния Cu на 1.8–1.9 эВ, что достаточно, чтобы сформировать NUC.

Легко видеть, что возможны только два варианта относительного расположения двух ближайших



**Рис.2.** *a*) В  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$  NUC (эллипс) образуется на какой-либо данной паре ионов Cu в  $\text{CuO}_2$ -плоскости при наличии в  $\text{CuO}_3$ -цепочке над (под) этой парой ионов трех заполненных кислородных позиций подряд. *b, e*) В  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  возможны NUC двух типов с расстояниями между проекциями ионов Sr 3a или  $a\sqrt{5}$ . *g*) В промежуточном случае, когда расстояние между проекциями ионов Sr равно  $a\sqrt{8}$  NUC, не образуется. *d*) Если расстояние между проекциями ионов Sr равно  $2a$ , то щель для перехода на центральный ион Cu закрывается и для одиночестичных возбуждений. *e*) Формирование линейных кластеров NUC в  $\text{CuO}_2$ -плоскостях  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$  последовательностью кислородных ионов в цепочках. На рисунке в  $\text{CuO}_2$ -плоскостях показаны только ионы меди (*a–e*), а для  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  еще и те ионы кислорода, которые находятся в октаэдрах, смежных с ионом Sr (*b–d*)

допированных дырок (или, что то же, двух ближайших проекций Sr на CuO<sub>2</sub>-плоскость), чтобы они могли сформировать активный NUC (рис. 2б,б). Эти случаи соответствуют двум возможным расстояниям между ними, равным  $3a$  и  $a\sqrt{5}$ . Отметим, что в промежуточном случае (рис. 2г), когда расстояние

между допированными дырками равно  $a\sqrt{8}$ , нет такой пары соседних ионов Cu, чтобы по соседству с каждым из них находилась допированная дырка, и NUC не формируется! Этот случай отвечает изолятору и, как будет видно далее, эта особенность является причиной «1/8»-аномалии. При расположении

допированных дырок на расстоянии  $2a$  щель  $\Delta_{ct}$  для внутреннего иона Cu закрывается также и для одноделоконных переходов (рис. 2d). Этот случай соответствует обычному металлу.

Таким образом, как мы считаем, в результате допирования у потолка валентной зоны, расположенного в окрестности точек  $(\pm\pi/2; \pm\pi/2)$  [31], возникает парное резонансное состояние, гибридизованное с зонными состояниями. При этом переход пар электронов на NUC будет приводить к возникновению дополнительных дырок в валентной зоне. Отметим, что возникающие дырки, находясь одновременно в поле действия нескольких NUC, могут свободно перемещаться по кристаллу. Можно условно рассматривать ВТСП как кристалл, состоящий из положительно заряженных NUC и коллективизированных дырок, концентрация которых, однако, зависит от температуры (см. ниже).

Как ранее отмечалось, взаимодействие зонных электронов с NUC сопровождается перенормированной эффективного межэлектронного взаимодействия, которое способно обеспечить в электронной системе спаривание при достаточно высоких температурах. Потенциал спаривания  $\Delta_s$  в данном случае будет зависеть от импульса, обращаясь в нуль в узельном направлении (т. е. для электронов, движущихся только в кислородной подрешетке) и достигая максимума  $\Delta_s \sim \Delta'_{ct}$  в антиузельном (медь-кислородном) направлении (т. е. для электронов, имеющих наибольшую частоту переходов на NUC).

Время жизни парного состояния NUC определяется шириной парного уровня  $\Gamma$ , которая с учетом двухчастичной гибридизации равна [22, 23]

$$\Gamma \approx kT(V/E_F)^2 \quad (1)$$

(здесь  $V \sim 1$  эВ — константа одночастичной  $p-d$ -гибридизации,  $E_F \sim 0.4$  эВ — энергия Ферми [31],  $T$  — температура). Отсюда уширение парного уровня  $\Gamma \sim 5kT$ . Соответствующее уширение зонных состояний  $\gamma$  также пропорционально  $T$  [22].

При  $T = 0$  поверхность Ферми будет ограничена замкнутым контуром вокруг точки  $(\pi/2; \pi/2)$  [31]. С ростом температуры за счет переходов связанных пар зонных электронов на NUC область дырочных состояний на уровне Ферми будет вытягиваться от точки  $(\pi/2; \pi/2)$  в направлении малой дисперсии, образуя дугу толщиной  $\Gamma \sim 5kT$  вдоль границы «остаточной» (remnant) ферми-поверхности [31].

### 3. МЕХАНИЗМ ГЕНЕРАЦИИ ДЫРОЧНЫХ НОСИТЕЛЕЙ

Итак, NUC играют роль парных акцепторов, приводя к генерации свободных дырочных носителей в  $\text{CuO}_2$ -плоскости. Если  $N_U$  — концентрация активных NUC, а  $\eta$  — их средняя заселенность ( $0 < \eta < 2$ ), то концентрация образующихся дырочных носителей  $n = \eta N_U$ . Как следует из модели, именно эти носители, в отличие от локализованных допированных зарядов, обеспечивают проводимость в нормальном состоянии. Если пренебречь значением концентрации дырок при  $T = 0$ , то величина  $n(T)$  будет определяться равенством скоростей переходов парный уровень–зона и обратно. Частота переходов парный уровень–зона равна  $\eta\Gamma \propto T\eta$ . Скорость обратного процесса определяется частотой электрон–электронного рассеяния и пропорциональна  $\Gamma^2(2 - \eta) \propto T^2(2 - \eta)$ . Таким образом,  $\eta\Gamma \propto (2 - \eta)T^2$  и отсюда

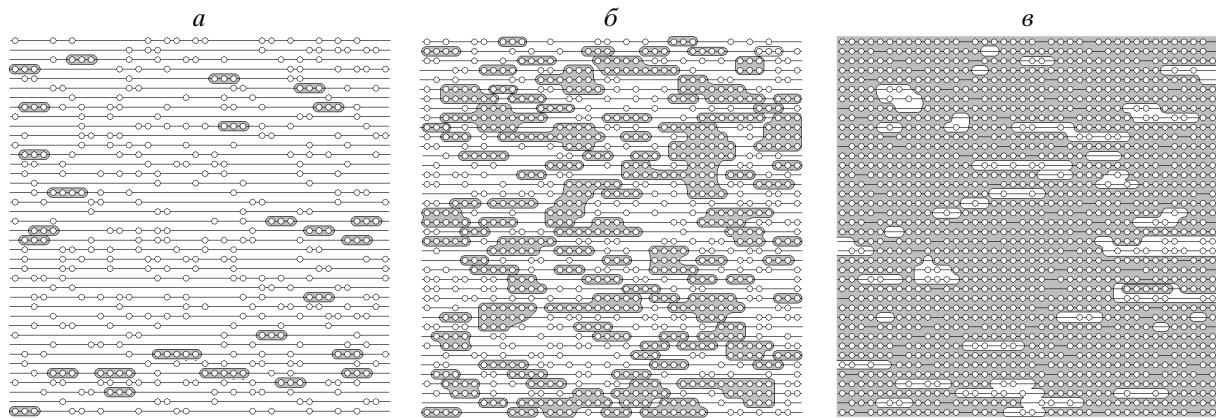
$$\eta = 2T/(T + T_0), \quad n = 2N_UT/(T + T_0), \quad (2)$$

где постоянная  $T_0$  не зависит от температуры. Частота переходов парный уровень–зона, равная  $\eta\Gamma$ , является одновременно и частотой дырочно–дырочно-го рассеяния  $\nu_{pp}$  с виртуальным переходом дырочных пар на NUC.

Теперь, исходя из соотношения (2) и зная условия формирования NUC, рассчитаем концентрацию носителей в конкретном ВТСП-соединении  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$  в зависимости от уровня допирования  $\delta$  и температуры.

Согласно проведенному выше рассмотрению NUC в  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$  образуется на какой-либо данной паре ионов Cu в  $\text{CuO}_2$ -плоскости при наличии в  $\text{CuO}_3$ -цепочке над (под) этой парой ионов трех заполненных кислородных позиций подряд (рис. 2a). Суммарная концентрация таких кислородных «троек» при случайном распределении кислородных ионов в цепочках равна  $\delta^3$  в расчете на одну элементарную ячейку  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$ .

Изолированная тройка кислородных ионов в цепочке формирует два NUC, по одному в каждой из двух  $\text{CuO}_2$ -плоскостей (рис. 2a). Однако в последовательности, состоящей из  $N_O > 3$  кислородных ионов в цепочке, лишь каждая вторая тройка может формировать отдельные NUC (не имеющие общих ионов Cu) в каждой из  $\text{CuO}_2$ -плоскостей (рис. 2e). Можно считать поэтому, что для  $N_O > 3$  каждая «тройка» формирует NUC, но только в одной  $\text{CuO}_2$ -плоскости (рис. 2e).



**Рис. 3.** Кластеры кислородных ионов в цепочках, формирующие конечные кластеры NUC, для случайного распределения:  $a - \delta = 0.3$ ,  $b - \delta = 0.6$ ,  $c - \delta = 0.85$ . Светлые кружки — ионы кислорода в цепочках; кластеры кислородных ионов с  $N_0 \geq 3$  заштрихованы

Будем считать, что несколько NUC, лежащих на одной прямой в  $\text{CuO}_2$ -плоскости, принадлежат одному одномерному кластеру, если ионы меди, на которых они сформированы, образуют непрерывный узельный одномерный кластер в данной  $\text{CuO}_2$ -плоскости. Соответственно, формирующие данный одномерный кластер NUC ионы кислорода в цепочках будут образовывать непрерывный кислородный одномерный кластер в плоскости цепочек.

Итак, каждому одномерному кластеру NUC в  $\text{CuO}_2$ -плоскости соответствует непрерывный образующий кластер кислородных ионов в  $\text{CuO}_3$ -цепочке. Будем считать, что непрерывные последовательности кислородных ионов, относящиеся к соседним цепочкам, образуют единый двумерный кластер NUC, если они «перекрываются» по трем или более ионам кислорода в соседних цепочках (т. е. имеет место переколяция по NUC). Это будет соответствовать образованию непрерывных двумерных кластеров NUC в  $\text{CuO}_2$ -плоскостях. Переколяция по NUC наступает при некоторой пороговой концентрации кислорода  $\delta = \delta_c$ , которая может быть определена для случайного распределения кислородных ионов в цепочках методом Монте-Карло. На рис. 3 приведены полученные таким методом для решетки  $40 \times 40$  картины случайного распределения кислородных ионов в цепочках для  $\delta = 0.3, 0.6, 0.85$ .

Суммарное (для обеих  $\text{CuO}_2$ -плоскостей) количество NUC в кластерах в расчете на одну элементарную ячейку  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$  при случайном распределении кислородных ионов равно  $N_U = \delta^3 + N_3(\delta)$ , где  $N_3(\delta)$  — зависящее от  $\delta$  количество изолированных «троек» кислородных ионов в цепочках, кото-

рое равно  $N_3(\delta) = \delta^3(1 - \delta)^2$ . Соответственно,

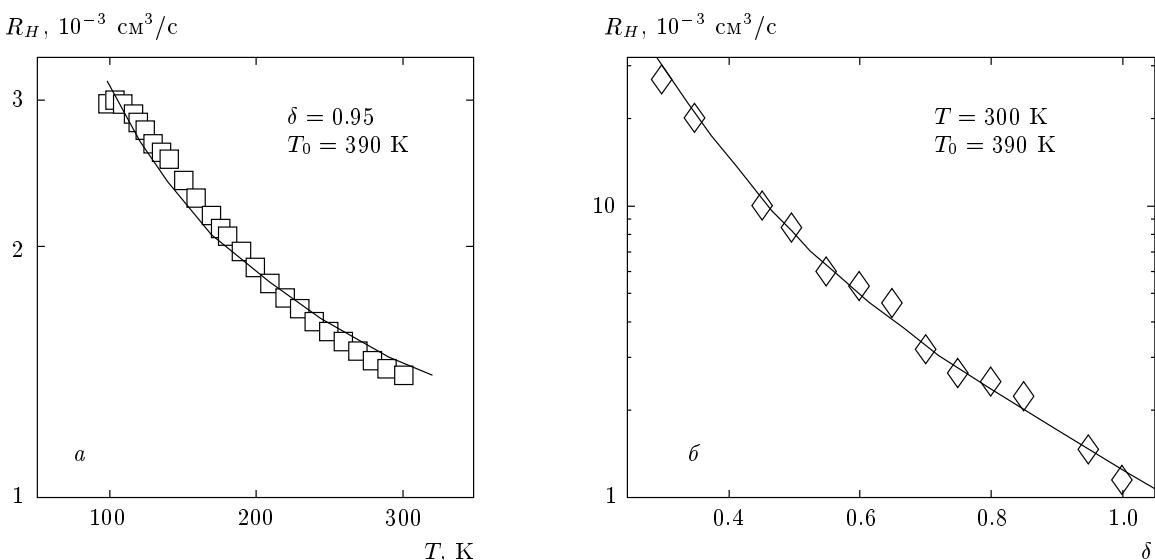
$$N_U(\delta) = \delta^3 \{1 + (1 - \delta)^2\}. \quad (3)$$

При  $\delta < \delta_c$  NUC образуют конечные кластеры различного размера. Внутри каждого кластера числа заполнения NUC  $\eta$  и концентрация дырок, возникающих в  $\text{CuO}_2$ -плоскости, в расчете на один NUC зависят от температуры. В соответствии с формулами (2)  $\eta = 2T/(T + T_0)$ , где  $T_0$  — не зависящая от  $T$  постоянная, которая может быть определена из холловских измерений. Объемная концентрация NUC  $P = N_U(\delta)/V_{UC}$ , где  $V_{UC} = 173 \text{ \AA}^3$  — объем элементарной ячейки  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$ . Соответственно, объемная концентрация дырочных носителей  $n$ , генерируемых в  $\text{CuO}_2$ -плоскостях при заполнении NUC электронами, равна  $n = \eta N_U(\delta)/V_{UC}$ , а постоянная Холла

$$R_H(\delta, T) = \frac{1}{ne} = \frac{1}{2e} \times \\ \times \frac{V_{UC}}{\delta^3 \{1 + (1 - \delta)^2(1 - \delta^3)\}^3} \frac{T + T_0}{T}, \quad (4)$$

где  $e$  — заряд электрона. На рис. 4а приведена температурная зависимость холловской постоянной в монокристалле  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.95}$  из работы [32], в которой благодаря использованию бездвойниковых однодоменных монокристаллов  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$  с различными  $\delta$  удалось впервые разделить вклады в холловскую постоянную от  $\text{CuO}_2$ -плоскостей и цепочек. Как видно на рис. 4а, эти данные могут быть с хорошей точностью описаны уравнением (4) с  $T_0 \approx 390$  К.

На рис. 4б приведена экспериментальная зависимость  $R_H(\delta)$  для  $T = 300$  К, полученная в той же ра-



**Рис. 4.** Зависимости константы Холла в однодоменном монокристалле  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$  от температуры и додирования: *a* —  $\delta = 0.95$  [32], *б* —  $T = 300 \text{ K}$  [32]. Сплошные кривые на обоих рисунках — зависимость (4) при  $T_0 = 390 \text{ K}$

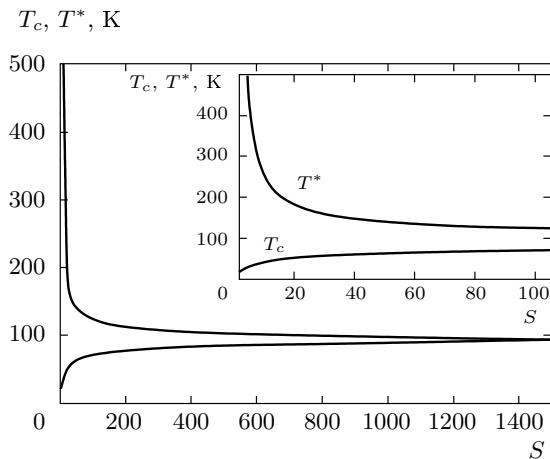
боте [32]. Видно, что экспериментальные данные хорошо описываются зависимостью (4) с  $T_0 = 390 \text{ K}$  во всем диапазоне додирования. Отметим, что рассчитанные кривые на рис. 4*a*,*б* не содержат масштабных подгоночных параметров. Единственный подгоночный параметр  $T_0$ , который лишь описывает температурную зависимость  $R_H(T)$ , позволяет с хорошей точностью рассчитать абсолютные значения  $R_H$  во всей области изменения  $\delta$  и  $T$ . Тот факт, что концентрация дырок растет с уровнем додирования в соответствии с формулой (4), может служить весомым аргументом в пользу существования в  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$  двухатомных NUC указанного типа и подтверждением предложенного механизма генерации дырочных носителей в ВТСП.

Зная  $T_0$  и частоту дырочно-дырочного рассеяния  $\nu_{pp} = 2\Gamma T/\hbar(T + T_0)$ , можно оценить по формуле Друде  $\rho = m\nu_{pp}/ne^2$  удельное сопротивление для случая оптимального додирования, когда в каждой ячейке есть NUC. Для этого случая оценка дает  $\rho(100 \text{ K}) \sim 50 \text{ мкОм} \cdot \text{см}$  в согласии с результатами многочисленных экспериментов.

#### 4. ФЛУКТУАЦИИ И ПРИРОДА «ПСЕВДОЩЕЛЕВОЙ» ФАЗЫ

Ранее [14] мы предположили, что наблюдаемая в различных экспериментах псевдощель является не чем иным, как той же сверхпроводящей щелью, но возникающей при температуре  $T > T_c$  в результате

те больших флюктуаций числа частиц из-за переходов электронов между парным уровнем NUC и кислородной зоной. В отличие от обычного сверхпроводника с электрон-фононным взаимодействием, где сверхпроводящая щель закрывается за счет тепловых возбуждений над поверхностью Ферми, уменьшающих число состояний, куда могут рассеиваться электронные пары, в нашем случае механизмом, приводящим к подавлению сверхпроводимости, является заполнение NUC реальными электронами. Поэтому флюктуационное уменьшение заселенности парного электронного уровня будет способствовать увеличению сверхпроводящего взаимодействия и может приводить к флюктуационному «включению» сверхпроводимости при  $T^* > T > T_{c\infty}$  (здесь  $T_{c\infty}$  — равновесное значение  $T_c$  для бесконечного кластера из NUC). В то же время флюктуационное увеличение заселенности парного уровня будет приводить к уменьшению сверхпроводящего взаимодействия и к флюктуационному «выключению» сверхпроводимости при  $T_c < T < T_{c\infty}$ . Большие флюктуации заселенности NUC, соответствующие существенному отклонению  $T^*$  и  $T_c$  от  $T_{c\infty}$ , возможны в недодированных образцах, когда значительная часть NUC принадлежит конечным кластерам. С уменьшением степени додирования средний размер конечных кластеров уменьшается и относительные флюктуации заселенности NUC в этих кластерах нарастают (т. е.  $T^*$  увеличивается, а  $T_c$  уменьшается). С другой стороны, в передодированном образце, ко-



**Рис. 5.** Зависимости температур  $T^*$  и  $T_c$  от размера кластера  $S$  на интервале  $S < 1500$ . На вставке: то же, но на интервале  $S < 100$

торый можно рассматривать как единый бесконечный проводящий кластер, большие флуктуации становятся невозможны. Исходя из предложенной модели можно определить зависимости  $T^*$  и  $T_c$  от уровня допирования  $\delta$  для конкретного соединения  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$ . Мы будем считать, что при  $\delta < \delta_c$ , когда NUC образуют конечные кластеры различного размера, образец представляет собой джозефсоновскую среду, где сверхпроводимость во всем объеме достигается за счет джозефсоновой связи между сверхпроводящими кластерами. За размер  $S$  кластера NUC в  $\text{CuO}_2$ -плоскости будем принимать количество ионов Cu, находящихся внутри этого кластера. При этом за минимальный размер кластера  $S_{min}$ , в котором возможна сверхпроводимость, следует принять  $S_{min} = 4$  (т. е. кластер с  $N_U = 2$ ), поскольку для меньшего кластера невозможно говорить о сверхпроводящей конденсации.

Рассмотрим кластер в  $\text{CuO}_2$ -плоскости, объединяющий некоторое число NUC и включающий  $S \geq 4$  медных ионов. Тогда, согласно формулам (2), число электронов на NUC в данном кластере при температуре  $T$  равно  $N = TS/(T+T_0)$ . В результате флуктуаций число электронов на NUC в данном кластере может изменяться на  $\pm\sqrt{N} = \pm(TS/(T+T_0))^{1/2}$ . Условие для флуктуационного «включения» («выключения») сверхпроводимости в данном кластере при температуре  $T^*$  ( $T_c$ ) можно записать как  $N(T) \pm \sqrt{N(T)} = N_c$ , где  $N_c = T_{c\infty}S/(T_{c\infty} + T_0)$  — число электронов на NUC в точке сверхпроводящего

перехода бесконечного кластера. Таким образом,

$$\frac{TS}{T+T_0} \pm \left( \frac{TS}{T+T_0} \right)^{1/2} = \frac{T_{c\infty}S}{T_{c\infty} + T_0}. \quad (5)$$

При этом знак «минус» соответствует  $T = T^*$ , а знак «плюс» —  $T = T_c$ . Решая уравнения (5) и полагая  $T_0 = 390$  К, найдем  $T^*$  и  $T_c$  как функции  $S$  (рис. 5). Как видно на рис. 5, с увеличением размера кластера влияние флуктуаций на  $T_c$  уменьшается и становится пренебрежимо малым в кластерах NUC, содержащих более 1500 ионов меди, что соответствует размеру около 150 Å. Так называемое 60 К-плато на кривой  $T_c(\delta)$ , где  $T_c$  в интервале  $0.6 < \delta < 0.8$  изменяется от 50 К до 70 К, соответствует изменению  $S$  на порядок (примерно с 10 до 100). Отметим, что существует минимальное значение  $S$ , при котором кластер при  $T \rightarrow 0$  может оставаться все время сверхпроводящим при наличии флуктуаций заселенности NUC. Поскольку заселенность NUC при  $T = T_c$  равна  $\eta \approx 2/5$ , для кластера с  $N_U \leq 5$  ( $S < 10$ ) любая флуктуация в кластере, увеличивающая на два число электронов на NUC, будет приводить к разрушению сверхпроводящего состояния.

Для определения зависимостей  $T^*(\delta)$  и  $T_c(\delta)$  нам нужно знать порог переколяции по NUC и статистику конечных кластеров NUC в зависимости от  $\delta$ . Порог переколяции по кластерам NUC для случайного распределения кислородных атомов в цепочках, а также статистика конечных кластеров могут быть определены методом Монте-Карло. В соответствии с предложенным механизмом формирования NUC будем считать, что 1) каждый одномерный кластер кислородных ионов в цепочке, включающий  $N_O \geq 4$  ионов кислорода, формирует одномерные кластеры NUC в каждой из  $\text{CuO}_2$ -плоскостей со средним размером  $S = N_O - 1$ , т. е. содержащие  $N_O - 1$  ионов Cu; 2) размер двумерного кластера NUC в  $\text{CuO}_2$ -плоскости равен сумме размеров составляющих его одномерных кластеров NUC. Найденное нами таким методом значение  $\delta_c = 0.80 \pm 0.02$ . Это означает, что при  $\delta > \delta_c$  мы должны были бы иметь  $T_c = T_{c\infty}$ . В эксперименте, однако,  $T_c$  выходит на плато при  $x > 0.85$  [33, 34]. Повышение порога переколяции, как мы полагаем, может быть связано с наличием в цепочках медных вакансий и с отталкиванием атомов кислорода из соседних цепочек [35], что препятствует объединению одномерных кластеров. Эти факторы будут приводить к повышению порога переколяции по кластерам NUC по сравнению со значением, ожидаемым исходя из предположения о случайному распределении кислорода по позициям в цепочках.

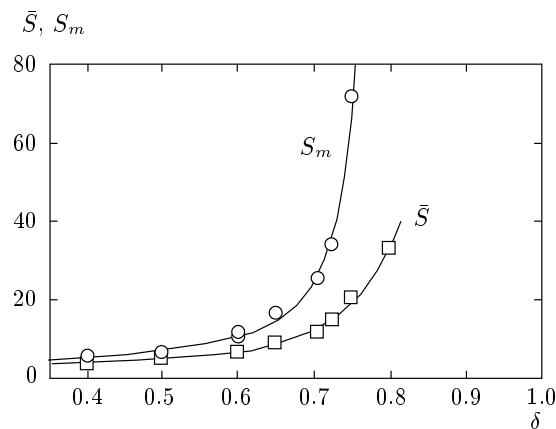


Рис. 6. Зависимость средних размеров конечных кластеров NUC  $S_m$  и  $\bar{S}$  от  $\delta$  для  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$ . Кружки и квадраты — результаты определения соответственно  $S_m$  и  $\bar{S}$  по методу Монте-Карло для решетки  $40 \times 40$ . Кривые проведены «на глаз»

Далее, для упрощения определения зависимостей  $T^*(\delta)$  и  $T_c(\delta)$  предположим, что все конечные кластеры имеют одинаковый размер, равный некоторому среднему размеру кластера. Понятие среднего размера кластера  $S_m$  (mean cluster size) используется в теории протекания и определяется как взвешенное среднее  $S_m = \sum n_i S_i^2 / \sum n_i S_i$ . Как следует из определения, основной вклад в  $S_m$  вносят большие кластеры. И именно таким образом определенную величину  $S_m(\delta)$  следует подставлять в формулу (5) для определения зависимости  $T_c(\delta)$ , поскольку за  $T_c$  мы должны принять температуру сверхпроводящего перехода больших кластеров с более высокой  $T_c$ , шунтирующих малые кластеры и обеспечивающих основной вклад в проводимость и диамагнитный отклик. С другой стороны, для определения  $T^*(\delta)$  лучше использовать обычное среднее  $\bar{S} = \sum n_i S_i / \sum n_i$ , поскольку вклад во флюктуационное «включение» сверхпроводимости вносят конечные (неперколяционные) кластеры. На рис. 6 приведены полученные нами результаты определения  $S_m$  и  $\bar{S}$  по методу Монте-Карло для решетки  $40 \times 40$ . Видно, что при приближении к порогу перколяции  $S_m$  стремится к бесконечности, а  $\bar{S}$  остается конечной и при  $\delta \geq \delta_c$ .

Подставляя полученные значения  $S_m(\delta)$  и  $\bar{S}(\delta)$  в квадратное уравнение (5), получим в качестве двух его решений зависимости  $T_c(\delta)$  и  $T^*(\delta)$  для  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$ . Оба этих решения показаны на рис. 7 треугольниками. Сплошные линии проведены «на глаз». Как следует из модели, область между этими кривыми — это область флюктуаций, в которой ко-

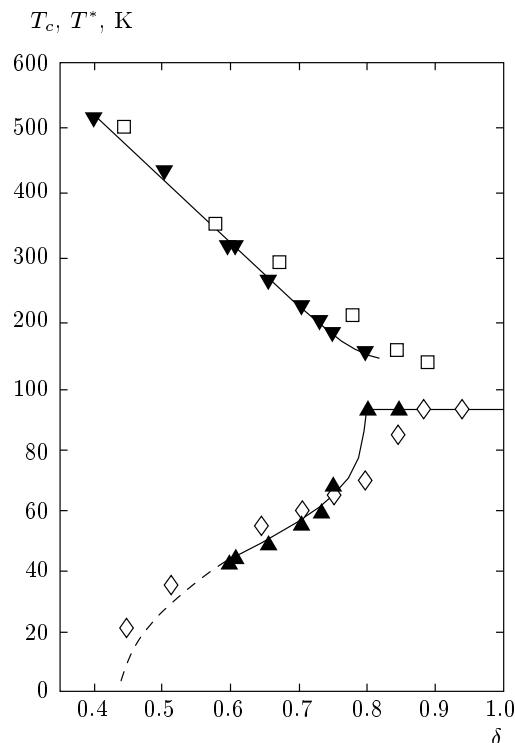
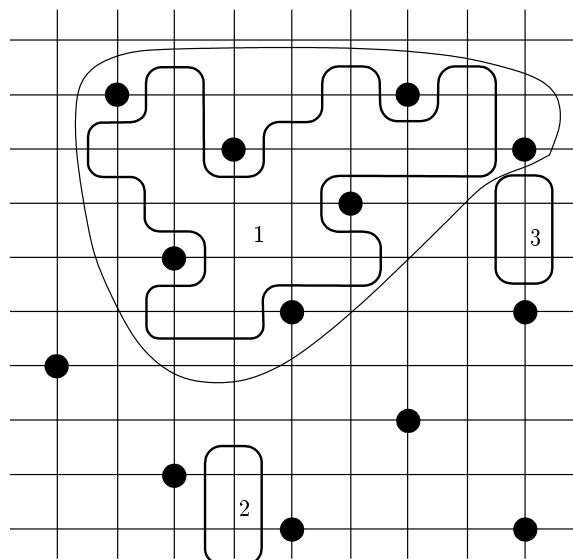


Рис. 7. Сравнение рассчитанных зависимостей температур  $T^*$  ( $\blacktriangledown$ ) и  $T_c$  ( $\blacktriangle$ ) от содержания кислорода  $\delta$  для  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$ ;  $\square$  — результаты измерений  $T^*$  для монокристаллов [37], где  $T^*$  определялась по отклонению температурной зависимости сопротивления  $R_{ab}(T)$  от линейной;  $\diamond$  — результаты магнитных измерений  $T_c$  для монокристаллов  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$  [34]. Сплошные линии проведены «на глаз». Штриховая часть кривой  $T_c(\delta)$  при  $\delta < 0.6$  соответствует области, где средний размер кластера NUC  $S_m < 10$  и флюктуации эффективно разрушают сверхпроводимость

нечные неперколяционные кластеры флюктуируют между сверхпроводящим и нормальным состояниями за счет флюктуаций заселенности NUC. Штриховая часть кривой  $T_c(\delta)$  при  $\delta < 0.6$  соответствует области, где средний размер кластера NUC  $S_m < 10$ . Как отмечалось выше, флюктуации будут эффективно разрушать сверхпроводимость в таких кластерах;  $T_c$  в этом случае будет определяться еще сохраняющимися кластерами с  $S > 10$  и с уменьшением  $\delta$  будет убывать вследствие уменьшения джозефсонской энергии связи между кластерами по сравнению с их кулоновской энергией [36]. Для сравнения на рис. 7 приведены результаты экспериментов, где для монокристаллов  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$  определялись зависимости  $T^*(\delta)$  и  $T_c(\delta)$ . Светлые квадраты — дан-



**Рис. 8.** Образование кластеров NUC в  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ . Сетка — плоскость  $\text{CuO}_2$ , в узлах которой расположены ионы  $\text{Cu}$ ; • — проекции ионов  $\text{Sr}$ ; 1 — непрерывный кластер NUC, который является каркасом микродомена (обведен замкнутой кривой); 2, 3 — одиночные NUC различных типов

ные работы [37], где температура открытия псевдощепли  $T^*$  определялась по отклонению температурной зависимости сопротивления  $R_{ab}(T)$  от линейного поведения. Светлые ромбы — температура сверхпроводящего перехода  $T_c$ , измеренная магнитным методом для монокристалла  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$  в работе [34]. Как видно из сравнения рассчитанных зависимостей  $T_c(\delta)$  и  $T^*(\delta)$  с экспериментальными, согласие следует считать хорошим, несмотря на все условности в их определении.

## 5. ОСОБЕННОСТИ ФАЗОВОЙ ДИАГРАММЫ $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$

Исходя из изложенного выше, рассмотрим теперь особенности фазовой диаграммы  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  и причину низкой  $T_c$  (около 40 К) в этом соединении по сравнению с  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$ . Как мы считаем, причина такой разницы  $T_c$  состоит в том, что в отличие от  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$ , в  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  допированные дырки, формирующие активные NUC, расположены непосредственно в  $\text{CuO}_2$ -плоскости. Поэтому непрерывный кластер NUC в этом случае представляет собой сеть допированных дырок (или, что то же, сеть проекций

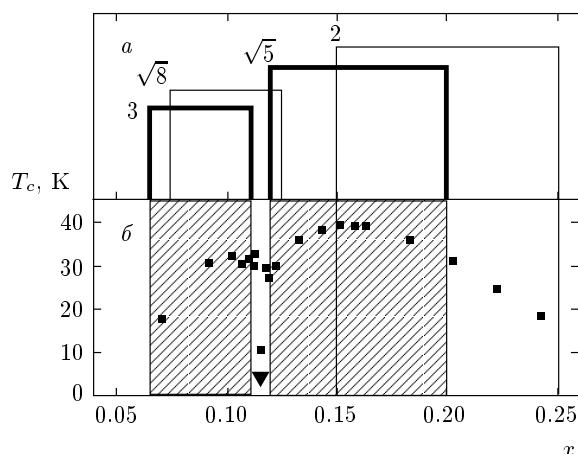
$\text{Sr}$  на  $\text{CuO}_2$ -плоскость), образованную ломаными линиями с длиной звена  $l_{com} = 3$  или  $l_{com} = \sqrt{5}$  (рис. 8). Размеры таких кластеров в  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  ограничены допированными дырками, локализованными в окрестности некоторых ионов  $\text{Cu}$  в  $\text{CuO}_2$ -плоскости, которые не участвуют в формировании активных NUC. Это отличает  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  от других одноплоскостных ( $\text{Ta}_2\text{Ba}_2\text{CuO}_{6-x}$ ,  $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+\delta}$ ), а также в двух- и трехплоскостных ВТСП, где допированные дырки локализованы вне  $\text{CuO}_2$ -плоскости.

Поскольку в кристалле при случайному распределении донанта (в отсутствие тенденции к их упорядочению) возможно одновременное сосуществование различных типов взаимного расположения допированных зарядов, нельзя ожидать существования больших кластеров, свойства которых определялись бы целиком каким-либо одним из четырех рассмотренных на рис. 2б–д вариантов конфигураций. Это же касается и образования больших кластеров NUC. Их размер и количество будут расти при приближении к соизмеримым концентрациям соответственно  $x = 1/9, 1/5$ . Существование физически значимых микродоменов с данным  $l_{com}$  возможно в области концентраций

$$0.593/l_{com}^2 < x \leq 1/l_{com}^2. \quad (6)$$

Эта область ограничена со стороны высоких концентраций величиной  $x_{com} = 1/l_{com}^2$ , так как при больших концентрациях существование физически значимых доменов с данным  $l_{com}$  нарушает условие постоянства средней концентрации. При уменьшении  $x$  микродомены с данным  $l_{com}$  существуют до некоторого значения  $x = x_p$ , которое соответствует двумерному порогу переколяции  $x_p = 0.593$  при хаотическом распределении допированных дырок, т. е. переколяционный кластер служит как бы каркасом данного микродомена (рис. 8).

На рис. 9а приведены интервалы концентраций, соответствующие двумерной переколяции по узлам в решетках с  $l_{com} = 3, \sqrt{5}, \sqrt{8}, 2$  в соответствии с неравенством (6), т. е. интервалы, где согласно сказанному выше возможно существование физически значимых микродоменов с  $l_{com} = \sqrt{5}, 3$  (т. е. кластеров NUC), с  $l_{com} = 2$  (соответствующих фазе обычного металла) и доменов с  $l_{com} = \sqrt{8}$  (соответствующих диэлектрической фазе). Сплошными линиями показаны границы областей существования этих доменов. Жирными линиями выделены области существования доменов с  $l_{com} = 3, \sqrt{5}$ , т. е. кластеров NUC.



**Рис. 9.** *a)* Интервалы концентраций, соответствующие перколяции по узлам в доменах с  $l_{com} = 3, \sqrt{8}, \sqrt{5}, 2$ . Сплошными линиями показаны границы областей перколяционных ломаных с длиной звена  $l_{com}$ . Жирными линиями отмечены границы существования перколяционных кластеров NUC (т. е. ломаных с  $l_{com} = 3, \sqrt{5}$ ). Соответствующее значение  $l_{com}$  указано над левым верхним углом каждого прямоугольника. *б)* Экспериментальная фазовая диаграмма  $T_c(x)$  для  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  [38]. Треугольником на диаграмме отмечен состав ( $x = 0.115$ ), для которого сверхпроводимость не наблюдалась до  $T = 4.2$  К. Области перколяции по NUC заштрихованы

Как видно на рис. 9 $a$ , сверхпроводимость (домены с перколяционными цепочками NUC) существует в областях  $0.066 < x < 0.11$  и  $0.12 < x < 0.20$ . В области  $0.15 < x < 0.20$  существуют как сверхпроводящие домены (в которых существуют перколяционные кластеры с  $l = \sqrt{5}$ ), так и домены нормального металла, причем с ростом  $x$  число нормальных доменов растет. Это соответствует переходу в состояние, когда сверхпроводимость осуществляется лишь за счет эффекта близости, с монотонным понижением  $T_c$  при увеличении  $x$ .

На рис. 9 $b$  для сравнения приведена экспериментальная фазовая диаграмма  $T_c(x)$  для  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  [38]. Совпадение интервалов сверхпроводимости на экспериментальных фазовых диаграммах с интервалами перколяции для  $l_{com} = \sqrt{5}, 3$  может служить подтверждением предположения, что за сверхпроводимость в  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  ответственны именно рассматриваемые фрагменты, включающие пары соседних Cu-ионов в  $\text{CuO}_2$ -плоскости. Следует отметить, что «провал» в  $T_c(x)$  при  $0.11 < x < 0.12$ , связанный с отсутствием

перколяции вдоль цепочек NUC обоих типов, накладывается на область существования (при  $x \rightarrow 1/8$ ) диэлектрических микродоменов с  $l_{com} = \sqrt{8}$ . Именно это, как было показано в работе [39], позволяет наблюдать в этой узкой области статическую несоразмерную магнитную текстуру [40].

Как следует из приведенного выше рассмотрения, представим  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  в виде джозефсоновской среды, в которой множество кластеров NUC различных размеров погружены либо в диэлектрическую (при  $x < 0.125$ ), либо в металлическую (при  $x > 0.15$ ) матрицу. Поэтому проводящий кластер при  $x < 0.15$  будет включать в себя диэлектрические участки, на которых проводимость имеет место за счет процессов квантового туннелирования в комбинации с переносом вдоль оси  $c$ . Поэтому истинная металлическая проводимость возможна только при  $x > 0.15$ . Это соответствует результатам работы [41], где для  $x \leq 0.15$  при  $T \rightarrow 0$  наблюдалась логарифмическая расходимость в сопротивлении при подавлении сверхпроводимости магнитным полем.

Величина  $T_c$  такой джозефсоновской среды будет определяться кластерами NUC некоего среднего размера и будет меньше, чем  $T_{c\infty}$ , вследствие влияния флуктуаций. Поскольку для  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  при оптимальном додировании  $T_c \sim 40$  К, в соответствии с рис. 5 средний размер кластеров, которые определяют  $T_c$ , включает не более 5 NUC. Фактически соединение  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  в областях оптимального додирования и недодирования аналогично по морфологии и свойствам  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$  в области  $\delta < 0.67$ .

Как отмечалось,  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  представляет собой среду, в которой сверхпроводящие микродомены погружены либо в диэлектрическую (недодированные образцы), либо в металлическую (переодорованные образцы) матрицу. В первом случае дополнительным фактором, уменьшающим  $T_c$  при уменьшении размеров сверхпроводящих микродоменов и увеличении расстояния между ними, является возрастание кулоновской энергии микродоменов в сравнении с энергией джозефсоновской связи между ними [36]. Во втором случае фактором, уменьшающим  $T_c$  образцов при продвижении в область передодирования, является уменьшение джозефсоновской энергии по сравнению с тепловой при увеличении расстояния между гранулами [36].

В то же время в таких неоднородных образцах всегда существует вероятность образования достаточно больших кластеров NUC, что, в частности, возможно при существовании определенного механизма упорядочения додантов [39]. Это под-

тврждается наблюдением в  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  областей стационарной диамагнитной активности вплоть до  $T \sim 80$  К [42]. Согласно рис. 5, такие  $T_c$  соответствуют кластерам NUC, включающим до  $10^2$  узлов Cu (т. е. доменам размером около  $40 \times 40 \text{ \AA}^2$ ).

## 6. ПСЕВДОЩЕЛЕВЫЕ АНОМАЛИИ

Рассмотрим теперь более подробно область, лежащую ниже кривой  $T^*(\delta)$  на рис. 5, для чего будем уменьшать температуру, начиная с  $T^*$ . Как следует из формулы (1), частота переходов парный уровень–зона составляет около  $\eta\Gamma/\hbar$ , т. е. время жизни состояния с данной заселенностью для  $T \ll T_0$  составляет  $\tau \sim 1.4 \cdot 10^{-10}T^{-2}$  с (где  $T$  измеряется в кельвинах). С другой стороны, характерное время установления сверхпроводящего параметра порядка в ВТСП  $\tau_\Delta \sim \hbar/\Delta \sim 1.4 \cdot 10^{-14}$  с, т. е. при  $T = 100$  К имеем  $\tau_\Delta \sim \tau$ . Время установления фазовой когерентности в кластере можно оценить как  $\tau_\theta \sim 2m/\hbar n_{2D}$ , где  $n_{2D}$  — двумерная электронная плотность (около 1 электрона/ячейку), а  $m$  — масса электрона. Такая оценка дает  $\tau_\theta \sim 3 \cdot 10^{-15}$  с, что меньше величины  $\tau_\Delta$ . Поэтому можно полагать, что фазовая когерентность успевает отслеживать изменения параметра порядка.

Время жизни флуктуаций  $\tau_f$  зависит от температуры и величины флуктуации (следовательно, от размера кластера NUC). Для кластеров малого размера ( $N_U \leq 5$ ), которые могут быть сверхпроводящими, если только заселенность  $\eta$  всех NUC равна нулю и для которых переход пары электронов хотя бы на один NUC выключает сверхпроводящее спаривание,  $\tau_f \sim \tau/N_U$  (где  $N_U$  — число NUC в кластере), т. е. растет с уменьшением уровня допирования. Для кластеров с  $N_U > 5$  время  $\tau_f$  будет расти с увеличением размера кластера, т. е. с уровнем допирования, стремясь к бесконечности при приближении к порогу переколяции по NUC. Таким образом, время  $\tau_f$  должно иметь минимум для кластеров с  $N_U = 5$ .

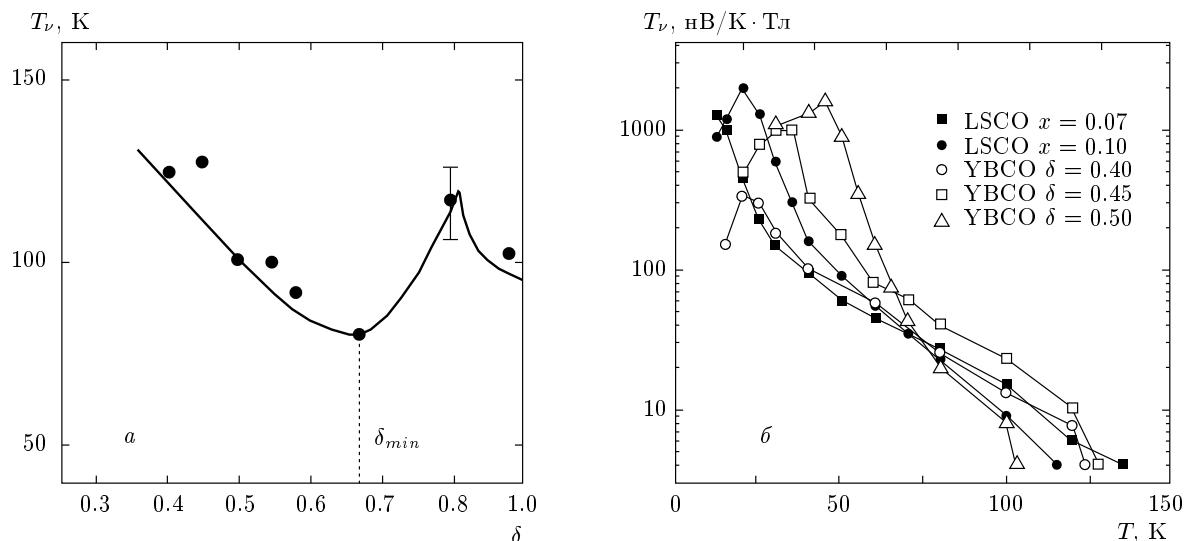
Поскольку  $\tau \propto T^{-2}$ , уменьшая температуру ниже  $T^*(S)$ , мы достигнем температуры  $T_\nu$ , при которой  $\tau_f = \tau_\Delta$ , и, начиная с которой, в кластерах данного размера будет успевать устанавливаться параметр порядка. Такие одновременно существующие сверхпроводящие кластеры могут образовывать джозефсоновски связанные кластерные комплексы. Для кластеров с  $N_U = 5$  условие  $\tau_\Delta = \tau_f = \tau/5$  будет выполнено при  $T_\nu \sim 50$  К. Для меньших кластеров  $T_\nu$  должно расти как  $T_\nu \propto 1/N_U$ , а с увеличением среднего размера кластеров  $N_U > 5$  (т. е. с увеличением допирования) снова возрастать,

достигая  $T_\nu \approx T^*$  вблизи порога переколяции по NUC, когда  $\tau_f$  неограниченно растет. Таким образом,  $T_\nu$  должна быть минимальна для кластеров с  $N_U = 5$ . На рис. 10а приведена экспериментальная зависимость граничной температуры наблюдения сигнала Нернста  $T_\nu$  от уровня допирования для  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$  [45]. Как видно на рисунке, минимальная температура  $T_{min} = 80$  К наблюдается при  $\delta_{min} = 0.66$  и отвечает (в соответствии с рис. 5) среднему размеру кластера с  $N_U = 5$  ( $S = 10$ ). Там же для сравнения приведена кривая  $T_\nu(\delta)$ , ожидаемая, согласно проведенному рассмотрению, в предположении, что  $T_{min} = 80$  К. Для уровней допирования  $\delta < \delta_{min}$  (когда средний кластер включает не более 5 NUC)  $T_\nu$  растет как  $1/\sqrt{N_U}$ , для  $\delta > \delta_{min}$  температура  $T_\nu$  увеличивается с ростом  $N_U$ , стремясь к  $T^*$  при приближении к порогу переколяции по NUC,  $\delta_p = 0.8$ . Видно, что экспериментальная и теоретическая кривые находятся в хорошем согласии.

В результате таких флуктуаций в интервале температур  $T_\nu < T < T^*$  будет наблюдаться уменьшение средней плотности состояний в области сверхпроводящей щели, но без возникновения когерентного сверхпроводящего состояния. В частности, в туннельных экспериментах это будет проявляться на кривых дифференциальной проводимости  $dI/dV$  отсутствием когерентных пиков при наличии минимума в области щели [6]. В оптических экспериментах, в частности, при измерении оптической проводимости  $\sigma_1(\omega)$  вдоль оси  $c$ , должно наблюдаться уменьшение туннельной проводимости в области щелевых частот при отсутствии  $\delta$ -пика на нулевой частоте. При этом спектральный вес из щелевой области будет «размазан» вследствие флуктуаций по области частот размером порядка  $2\pi/\tau_f \gg 2\Delta$  [43].

Ниже  $T_\nu$  (выше  $T_c$ ) можно наблюдать эффекты (например, эффект Нернста [9], диамагнетизм [10] и др.), связанные с существованием короткоживущих когерентных сверхпроводящих кластеров или джозефсоновски связанных сверхпроводящих кластерных комплексов. Существенной особенностью всех эффектов, связанных с существованием таких короткоживущих сверхпроводящих кластеров, должна быть их зависимость от частоты измерений [44].

Особо остановимся на результатах по измерению эффекта Нернста в  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  [9], где верхняя граница наблюдения эффекта  $T_\nu > 120$  К для малых уровней допирования. В соответствии с результатами разд. 5, средний размер кластеров в  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ , которые определяют  $T_c$ , включает не более 5 NUC и в областях оптимального допирования и недодопирования это соединение ана-



**Рис. 10.** *а)* Зависимость граничной температуры наблюдения эффекта Нернста  $T_\nu$  в  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$  от уровня допирования  $\delta$ . Точки — экспериментальная зависимость [45]. Значение  $T_\nu$  при  $\delta = 0.8$  получено путем экстраполяции. Сплошная линия — зависимость  $T_\nu(\delta)$ , следующая из рассматриваемой модели. *б)* Зависимости величины эффекта Нернста от температуры для образцов  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$  и  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  с различными уровнями допирования [9, 45]

логично по морфологии  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$  в области  $\delta < 0.65$ . Подтверждением этого вывода может служить рис. 10 $\delta$  [45], где приведены экспериментальные зависимости сигнала Нернста  $\nu$  от допирования для обоих соединений. Видно, что зависимости очень похожи, что свидетельствует о схожести свойств этих материалов в указанных областях допирования.

При дальнейшем понижении температуры ниже  $T_c$  фазовый объем флюктуирующих двумерных кластеров, одновременно находящихся в сверхпроводящем состоянии, достигает величины, достаточной для образования переколяционного кластера (но с флюктуирующей топологией!), где сверхпроводимость возникает за счет джозефсоновской связи между флюктуирующими кластерами. Эта температура будет соответствовать экспериментально измеряемой  $T_c$ . В такой структуре магнитное поле, проникая в образец, образует систему флюктуирующих двумерных «блинов». При этом, поскольку сила джозефсоновских межгранулярных связей будет также флюктуировать со временем, магнитный поток сможет входить и выходить из образца. Это будет приводить к обратному поведению кривых намагниченности, которое будет наблюдаться до тех пор, пока при температуре  $T_{irr}(H) < T_c$  не возникнет стационарный сверхпроводящий кластер, в котором возможен захват магнитного потока (пиннинг вихрей). Таким образом, эффекты, связанные с

существованием малых кластеров с флюктуационно возникающим когерентным сверхпроводящим состоянием, могут наблюдаться в интервале температур  $T_{irr} < T < T_c$ .

## 7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в настоящей работе на основе предложенного ранее механизма формирования в ВТСП двухатомных NUC мы предлагаем модель ВТСП, в которой взаимодействие электронов валентной зоны с NUC полагается ответственным за аномальные свойства этих соединений, включая, собственно, высокотемпературную сверхпроводимость. В рамках этой модели предложено объяснение природы псевдощели и псевдощелевых аномалий (гигантский эффект Нернста, аномальный диамагнетизм выше  $T_c$ , перенос оптического спектрального веса и др.). Для конкретного соединения  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$  рассчитаны зависимости концентрации дырочных носителей от температуры и допирования, а также температура открытия псевдощели и температура сверхпроводящего перехода как функции допирования. Рассчитанные зависимости  $n(T, \delta)$ ,  $T^*(\delta)$  и  $T_c(\delta)$  совпадают с экспериментально измеренными без использования масштабных подгоночных параметров. Качественное и количественное согласие полученных результатов с экспериментом может служить аргументом в пользу предложенной модели ВТСП.

Авторы благодарят Ю. В. Копаева за обсуждение результатов настоящей работы. Работа выполнена при финансовой поддержке Федерального агентства по науке и инновациям (контракт 2.552.12.7003) и РФФИ (гранты №№ 07-02-12083-офи, 08-02-00881-а)

## ЛИТЕРАТУРА

1. J. W. Loram, K. A. Mirza, J. R. Cooper et al., *J. Supercond.* **7**, 243 (1994).
2. H. Ding, T. Yokoya, J. C. Campuzano et al., *Nature* **382**, 51 (1996).
3. C. Renner, B. Revaz, J.-Y. Genoud et al., *Phys. Rev. Lett.* **80**, 149 (1998).
4. J. C. Phillips, A. Saxena, and A. R. Bishop, *Rep. Progr. Phys.* **66**, 2111 (2003).
5. D. N. Basov and T. Timusk, *Rev. Mod. Phys.* **77**, 721 (2005).
6. K. Anagawa, Y. Yamada, T. Shibauchi et al., *Appl. Phys. Lett.* **83**, 2381 (2003).
7. G. V. M. Williams, J. L. Tallon, R. Michalak et al., *Phys. Rev. B* **54**, 6909 (1996).
8. C. C. Homes, T. Timusk, R. Liang et al., *Phys. Rev. Lett.* **71**, 1645 (1993).
9. Z. A. Xu, N. P. Ong, Y. Wang et al., *Nature* **406**, 486 (2000).
10. Yayu Wang, Lu Li, M. J. Naughton et al., *Phys. Rev. Lett.* **95**, 247002 (2005).
11. M. Hashimoto, T. Yoshida, K. Tanaka et al., *Phys. Rev. B* **75**, 140503 (2007).
12. K. McElroy, J. Lee, J. A. Slezak et al., *Science* **309**, 1048 (2005).
13. I. Vobornik, H. Berger, M. Grioni et al., *Phys. Rev. B* **61**, 11248 (2000).
14. К. В. Мицен, О. М. Иваненко, ЖЭТФ **118**, 666 (2000).
15. К. В. Мицен, О. М. Иваненко, УФН **174**, 545 (2004).
16. E. Simanek, *Sol. St. Comm.* **32**, 731 (1979).
17. C. S. Ting, D. N. Talwar, and K. L. Ngai, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 1213 (1980).
18. В. А. Кондратьев, С. П. Ионов, Изв. АН СССР, сер. физ. **49**, 310 (1985).
19. H.-B. Schuttler, M. Jarrell, and D. J. Scalapino, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 1147 (1987).
20. Б. Я. Мойжес, С. Г. Супрун, ФТТ **29**, 441 (1987).
21. Б. А. Волков, В. В. Тугушев, Письма в ЖЭТФ **46**, 193 (1987).
22. Г. М. Элиашберг, Письма в ЖЭТФ **46** (приложение), 94 (1987).
23. И. О. Кулик, ФНТ **8**, 879 (1987).
24. П. И. Арсеев, ЖЭТФ **101**, 1246 (1992).
25. J. Ranninger and A. Romano, *Phys. Rev. B* **66**, 94508 (2002).
26. А. И. Русинов, До Чан Кат, Ю. В. Копаев, ЖЭТФ **65**, 1984 (1973).
27. D. R. Harshman and A. P. Mills, *Phys. Rev. B* **45**, 10684 (1992).
28. G. Shirane, Y. Endoh, R. J. Birgeneau et al., *Phys. Rev. Lett.* **59**, 1613 (1987).
29. D. Haskel, V. Polinger, and E. A. Stern, *AIP Conf. Proc.* **483**, 241 (1999).
30. P. C. Hammel, B. W. Statt, R. L. Martin et al., *Phys. Rev. B* **57**, R712 (1998).
31. F. Ronning, C. Kim, D. L. Feng et al., *Science* **282**, 2067 (1998).
32. K. Segawa and Y. Ando, *Phys. Rev. B* **69**, 104521 (2004).
33. J. Jacobson, J. M. Newsam, D. C. Johnston et al., *Phys. Rev. B* **39**, 254 (1989).
34. K. Segawa and Y. Ando, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 4907 (2001).
35. R. McCormack, D. de Fontaine, and G. Ceder, *Phys. Rev. B* **45**, 12976 (1992).
36. O. Entin-Wohlman, A. Kapitulnik, and Y. Shapira, *Phys. Rev. B* **24**, 6464 (1981).
37. T. Ito, K. Takenaka, and S. Uchida, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3995 (1993).
38. K. Kumagai, K. Kawano, I. Watanabe et al., *J. Supercond.* **7**, 63 (1994).
39. K. V. Mitsen and O. M. Ivanenko, *Eur. Phys. J. B* **52**, 227 (2006).
40. J. M. Tranquada, J. D. Axe, N. Ichikawa et al., *Phys. Rev. B* **54**, 7489 (1996).
41. Y. Ando, G. S. Boebinger, A. Passner et al., *Phys. Rev. B* **56**, R8530 (1997).
42. I. Iguchi, T. Yamaguchi, and A. Sugimoto, *Nature* **412**, 420 (2001); *J. Low Temp. Phys.* **131**, 451 (2003).
43. C. C. Homes, T. Timusk, D. A. Bonn et al., *Physica C* **254**, 265 (1995).
44. H. Sozeri, L. Dorosinskii, and U. Topal, *Physica C* **434**, 95 (2006).
45. N. P. Ong, Y. Wang, S. Ono et al., *Ann. Phys. (Leipzig)* **13**, 9 (2004).