

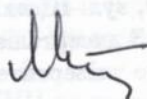
Міністерство освіти України
Одеський державний університет
ім. І.І. Мечникова

На правах рукопису

МЕДВЕДЄВ
Михайло Дмитрович

ВПЛИВ ОСОБЛИВОСТЕЙ ОДНОЕЛЕКТРОННОГО
СПЕКТРУ СИЛЬНОДОПОВАНИХ
МІДНО-ОКСИДНИХ КЕРАМІК НА ФОРМУВАННЯ ІХ
НАДПРОВІДНОЇ ФАЗИ

01.04.02 - теоретична фізика



Автореферат
дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Одеса - 1997



00738117 (R)

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана на кафедрі теоретичної фізики Одеського державного університету ім. І.І. Мечникова.

Науковий керівник: доктор фізико-математичних наук,
професор Адам'ян Вадим Мовсесович

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук,
ст. н. с. Вондарев Віктор Миколайович

доктор фізико-математичних наук,
професор Швець Валерій Тимофійович

Провідна установа: Донецький державний університет

Захист дисертації відбудеться "27" червня 1997 р. о 14 год. 00 хв. На засіданні Спеціалізованої ради К 05.01.10 в Одеському державному університеті ім. І.І. Мечникова (270100, Одеса-100, вул. Щепкіна, 14).

З дисертацією можна ознайомитися в науковій бібліотеці Одеського університету (вул. Преображенська, 24).

Автореферат розісланий "23" травня 1997 р.

Вчений секретар Спеціалізованої вченої ради доктор фіз.-мат. наук, професор Затовський О.В.

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ.

Актуальність теми дослідження. Незважаючи на численні спроби і чималі зусилля, сучасна наука повністю ще не вирішила одну з актуальних і найважливіших її задач - проблему високотемпературної надпровідності (ВТНП). Єдине що вже не викликає сумніву, це те, що високотемпературні надпровідники належать до класу висококорельованих кулонівських систем. Це проявляється в незвичайному конкурентному сполученні магнітних і надпровідних властивостей для єдиної системи носіїв заряду. На основі чисельних моделей ВТНП можна припустити існування нової картини основного стану надпровідника а також і відмінний від ВКШ механізм надпровідного парування. Але це приводить до певних труднощів при спробі охопити всю сукупність відомих властивостей ВТНП.

В дисертаційній роботі представлена модель високотемпературної надпровідності, в основу якої покладена "традиційна" картина ВКШ надпровідного стану. Відповідно до висновків, які були одержаними на її основі, гібридизація широкої та щільної зон, що перетинаються, спричиняє значне поширення області фазового простору одноелектронних збуджень, які в свою чергу формують надпровідний стан і, як наслідок, - істотне зростання температури надпровідного переходу T_C . В зазначеній ситуації рівень Фермі E_F потрапляє на периферію зони провідності в області високої густини одноелектронних станів, що пояснює послаблення ізотопічного ефекту і характерну для реальних ВТНП залежність T_C від допування δ .

Запропонований в роботі підхід до проблеми ВТНП не претендує на повний і всебічний опис цього явища. Він лише явно вказує на деяку спорідненість природи високотемпературної та звичайної надпровідностей.

Мета дисертаційної роботи полягає в дослідженні можливості отримання високих значень критичної температури T_C внаслідок значного збільшення кількості одноелектронних збуджень, що формують надпровідний стан.

Складовими частинами цього дослідження є :

- аналіз двозонної моделі високотемпературної надпровідності в ситуації широкої та плоскої зон, які перетинаються;
- розрахунок параметрів моделі за оптичними характеристиками високотемпературних надпровідників у нормальному стані;
- розгляд реальних ВТНП з'єднань з позиції їх відповідності до моделі, що досліджується.

Наукова новизна. Доведена адекватність моделі, що розглядається, реальним високотемпературним надпровідникам у випадках слабких кулонівських кореляцій зонних електронів та за її відсутності.

На основі запропонованого підходу для надпровідних купратів обчислена температура надпровідного переходу та її залежність від допування.

З оптичних спектрів відбиття та поглинання мідно-оксидних ВТНП у нормальному стані та за значенням другого частотного моменту дійсної частини комплексної електропровідності визначені значення основних параметрів двозонної моделі, що досліджується.

Практичне значення роботи. Теоретично досліджена модель високотемпературної надпровідності у випадку широкої та плоскої зон, які перетинаються, і доведена її пристосованість до опису реальних мідно-оксидних ВТНП. Отримані в роботі результати вказують на можливість підвищення температури надпровідного переходу надпровідних купратів внаслідок особливостей їх зонного спектру, а також пояснюють деякі властивості ВТНП систем.

Використання в роботі "традиційної" теорії БКШ підкреслює деяку пребільшеність особливостей високотемпературної надпровідності у порівнянні із звичайною надпровідністю.

Автор захищає:

1. Аналіз двозонної моделі високотемпературної надпровідності в ситуації, за якої широка і плоска зони перетинаються, та отримання за такої умови високих значень критичної температури T_C .

2. Аналіз відповідності модельних побудов властивостям реальних ВТНП, тобто :

- розрахунок зонного спектру надпровідної кераміки у випадку слабких кулонівських кореляцій зонних електронів та за їх відсутності,

- результати дослідження густини одноелектронних станів на периферії зони провідності,

- залежність температури надпровідного переходу від добування.

3. Вираз для тензора комплексної електропровідності для двухзонної моделі.

4. Оцінку критичної температури T_C з оптичних спектрів відбиття та поглинання надпровідної кераміки у нормальному стані, а також за значенням другого частотного моменту дійсної частини високочастотної електропровідності.

Апробація роботи. Основні результати дисертації доповідалися і обговорювалися на семінарах кафедр теоретичної фізики Одеського та Донецького державних університетів; доповідалися, обговорювалися і опубліковані в матеріалах наступних конференцій: 30 нарада з фізики низьких температур (Дубна, Росія, 1994); 16 Пекарівська міжнародна нарада по теорії напівпровідників; 32 зимова школа з теоретичної фізики ("Solid State Physics: From Quantum Mechanics to Technology", Каграсц, Poland, 1996).

Публікації. За матеріалами дисертації опубліковано 3 роботи, перелік яких наведено в кінці автореферату.

Структура і об'єм дисертації. Дисертація складається з вступу, трьох розділів, висновків і списку цитованої літератури. Робота викладена на 112 сторінках, включає 6 рисунків і список літератури, що містить 102 джерела.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ.

У вступі обгрунтована актуальність теми дисертації, сформульована мета роботи, визначена її наукова новизна, вказані основні

положення, які вносяться на захист, і наведений стислий її зміст.

У першому розділі розглядається двозонна модель у випадку, коли широка та плоска зони перетинаються. Гібридизація широкої валентної зони $\varepsilon_p(\mathbf{k})$, яка утворена р-орбітальями кисню і $d_{x^2+y^2}$ -орбітальями міді, з плоскою ε_d зоною, яка породжена високолокалізованими мідними d_{z^2} -орбітальями, спричиняє утворення двох нових гібридизованих зон

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \frac{\varepsilon_p(\mathbf{k}) + \varepsilon_d}{2} \pm \sqrt{\frac{(\varepsilon_p(\mathbf{k}) - \varepsilon_d)^2}{4} + \beta^2},$$

які розділені вузькою енергетичною щільною Q

$$Q \approx \beta^2 \frac{\varepsilon_f - \varepsilon_g}{(\varepsilon_f - \varepsilon_d)(\varepsilon_d - \varepsilon_g)},$$

де

β - константа гібридизації,

ε_g і ε_f - нижня та верхня межі р-зони, відповідно.

Особливі точки гібридних зон $E_{\pm}(\mathbf{k})$ і $\varepsilon_p(\mathbf{k})$ збігаються. Якщо рівень Фермі ε_F^F , обчислений з врахуванням станів тільки $\varepsilon_p(\mathbf{k})$ зони, лежить вище плоскої ε_d зони, то рівень Фермі гібридизованого зонного спектру E_F опускається у верхню частину зони E_- -к. При цьому відбувається істотне зростання на рівні Фермі густини одноелектронних станів $\rho(\varepsilon)$

$$\rho(E_F) \approx \frac{4}{\theta} \rho(\varepsilon_p^F)$$

де

$$\theta = \frac{4\beta^2}{(\varepsilon_p^F - \varepsilon_d)^2} \ll 1$$

Крім цього відстань від E_F до верхньої межі зони $E_-(\mathbf{k})$ виявляється значно меншою від дебаєвської енергії $\hbar\omega_D$

$$E_{-max} - E_F \approx \beta^2 \left(\frac{1}{\varepsilon_p^F - \varepsilon_d} - \frac{1}{\varepsilon_f - \varepsilon_d} \right) \sim \beta\sqrt{\theta}$$

Це є одна із самих важливих особливостей моделі, що розглядається, тому що всі одноелектронні стани наполовину заповненої зони провідності $E_-(\mathbf{k})$, що лежать вище E_F , будуть брати участь у формуванні

надпровідної фази, що істотно підвищує T_C . За таких умов оцінка знизу для температури надпровідного переходу має вигляд

$$T_C \geq \frac{E_{-max} - E_F}{2k} \left\{ \ln \frac{1 + \frac{4M\omega_D^2}{(\gamma\beta)^2} (E_{-max} - E_F)}{1 - \frac{4M\omega_D^2}{(\gamma\beta)^2} (E_{-max} - E_F)} \right\}^{-1} \quad (1)$$

де

ω_D - частота Дебая,

M - маса елементарної комірки кристалу,

k - постійна Больцмана,

$\gamma = |\langle \psi_p | \nabla | \psi_d \rangle|$,

ψ_p, ψ_d - функції Ванье для зон ϵ_p і ϵ_d , відповідно.

Для $M \sim 10^{-22}$, $\omega_D \sim 10^{13} - 14c^{-1}$, $\gamma = 10^8 \text{ см}^{-1}$, $\epsilon_p^F \sim \epsilon_g \sim \epsilon_d \approx (1 - 0.1)eV$, $\beta(\epsilon_g - \epsilon_p^F)^{-1} \approx 0.1$ температура надпровідного переходу виявилась вищою 100 К.

У другому розділі на основі розрахунків зонного спектру високотемпературних надпровідників, які приведені у наближенні сильного зв'язку, показано, що описана у першому розділі ситуація реалізується в мідно-оксидних ВТНП у випадку слабких кулонівських кореляцій зонних електронів.

Основний внесок в низкоенергетичні одноелектронні збудження надпровідних купратів вносять $d_{x^2+y^2}$ - орбіталі атомів міді, що формують плоску ϵ_d зону, і зв'язують та розривляють p_σ - орбіталі, що утворюють із p_x - та p_y - кисневих орбіталей, що породжують дві широкі валентні $E^\pm k$ зони.

Якщо плоска зона ϵ_d потрапляє біля максимуму однієї з валентних зон, гібридизація спричиняє утворення наполовину заповненої нової зони провідності $E(k)$ з рівнем Фермі навколо її нижньої межі, поблизу якої внаслідок гібридизації виникає чимале збільшення густини одноелектронних станів $\rho(\epsilon)$

$$\rho(E_{min}) \approx \left(\frac{V}{W} \right)^2 \rho(E_{max}^\pm),$$

але

$$\rho(E_{max}) \sim \rho(E_{max}^\pm),$$

де

V - стала гібридизації p_x - і p_y - орбіталей,

W - стала гібридизації $p_{z(y)}$ - і для d - орбіталей.

Розгляд слабкого кулонівського відштовхування U на мідних вузлах спричиняє діелектризацію зонного спектру і виникнення на атомах міді відмінного від нуля магнітного моменту, що має антиферомагнітне упорядкування.

До далекого антиферомагнітного порядку і аналогічного вигляду зонного спектру також веде нестінг Фермі -поверхні з хвильовим вектором $(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ і відповідним матричним елементом гамільтоніана на хвильових функціях d - орбіталей рівним Δ .

У випадку слабких кулонівських кореляцій ($\Delta \ll W$), розрахунки зонного спектру вказують, що виродження по спіну зберігається, а зона провідності $E(\mathbf{k})$ розщеплюється на дві нові зони, які розділено вузькою енергетичною щільною 2Δ , нижня з яких $E^\Delta(\mathbf{k})$ має ширину W^2/V і є наполовину заповненою підчас нульового допущення.

Дослідження густини одноелектронних станів зони $E^\Delta(\mathbf{k})$ виявляє наступні результати :

Для $\Delta < \frac{9W^2}{14V}$ точка $(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ відповідає локальному максимуму зони $E^\Delta(\mathbf{k})$ і

$$\rho(E^{\Delta}_{max}) = \frac{V}{2\pi a^2 W^2} [1 + | \frac{9W^2}{2V\Delta} - 7 |]^{-1/2}$$

У цьому випадку рівень Фермі лежить біля максимуму зони $E^\Delta(\mathbf{k})$ і становить собою кишеню навколо точки $(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$.

При $\Delta \geq \frac{9W^2}{14V}$ локальний максимум $(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ переходить в седлову точку, біля якої, на погляд деяких авторів, розташований рівень Фермі.

У випадку $\Delta \leq \frac{2W^2}{V} \sqrt{\frac{2}{\sqrt{2}+1}}$ точка $(0, 0)$ є локальним мінімумом зони $E^\Delta(\mathbf{k})$

$$\rho(E^{\Delta}_{min}) = [2\pi a^2 | \frac{W^2}{V} - \frac{\Delta^2 V}{8W^2} (1 + \sqrt{2}) |]^{-1}$$

Для більших значень Δ точка $(0, 0)$ стає локальним максимумом зонної енергії.

Чимале збільшення густини одноелектронних станів на рівні Фермі, що лежить біля екстремальних точок зони провідності, спричиняє поширення області фазового простору зонних електронів, що формують надпровідний стан. Це в теорії ВКШ збільшує критичну температуру T_C .

У випадку відсутності кулонівських кореляцій зонних електронів

$$T_C = \frac{\lambda^2}{4\pi M \omega_D^2},$$

де

λ - постійна електрон-фононої взаємодії.

Для $\lambda^2 \sim 1(eV/A)$, $\omega_D \sim 500K$, $M \sim 10^{-22}g$, $T_C \sim 35K$.

При слабких кулонівських кореляціях зонних електронів T_C не може бути визначена з рівняння у явному вигляді, але можна вказати приблизний характер її залежності від допущення δ .

Максимальна температура надпровідного переходу T_{Cmax} і оптимальне допущення δ_0 , яке їй відповідає, пов'язані співвідношенням

$$T_{Cmax} = \frac{W^2}{2V} \left(1 + \left| \frac{9W^2}{2V\Delta} - 7 \right|^{-1/2} - 2\pi\delta_0 \right),$$

з якого за відомих значень T_{Cmax} і δ_0 можливо визначити величину параметра Δ , що характеризує силу кулонівських кореляцій зонних електронів.

В малому околі δ_0

$$T_C(\delta) = T_{Cmax} - \frac{1}{2} \frac{\pi W^2/V - T_{Cmax}}{\delta_0 + \rho} (\delta - \delta_0)^2, \quad (2)$$

де

ρ - густина одноелектронних станів у максимумі зони провідності $E^\Delta(\mathbf{k})$.

При $\delta < \delta_0$

$$\ln \left[\frac{T_{Cmax}}{T_C} \right] = \frac{1}{\rho} \left(\frac{\delta_0}{T_{Cmax}} - \frac{\delta}{T_C} \right).$$

Якщо $\delta > \delta_0$

$$\ln\left[\left(\frac{W^2}{V}\rho - \delta\right) / \left(\frac{W^2}{V}\rho - \delta_0\right)\right] = \frac{1}{2\rho} \left(\frac{\delta_0}{T_{Cmax}} - \frac{\delta}{T_C}\right).$$

Але отримані результати не описують областей допущань, які відповідають виникненню і зникненню сверхпроводимості.

Для $La_{1.85}Sr_{0.15}CuO_4$ $V = 1eV$, $W = 0.4eV$, $T_{Cmax} = 39K$, $\Delta = 0.06eV$, $\frac{\Delta}{T_{Cmax}} \sim 20$, $U = 0.18eV$, $\rho(E_{min}) \sim 6.3\rho(E_{max}^+)$, $\rho(E_{max}^-) \sim 10\rho(E_{max}^+)$. Отже маємо, що $\Delta < \frac{9W^2}{14V} \sim 0.1eV$. Тому в точці $(\frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{4})$ розташован локальний максимум зони провідності, а поверхня Фермі становить собою "кишеню" в околі цієї точки. Згідно з (2) коефіцієнт при $(\delta - \delta_0)^2$ рівний -0.5.

У третьому розділі досліджуються оптичні властивості двозонної моделі, що розглядається. Вузька енергетична щільна Q поблизу рівня Фермі E_F веде до оптичних властивостей ВТНП кераміки у нормальному стані, що відрізняються від відповідних властивостей друдевських провідників та звичайних діелектриків.

Основні параметри двозонної моделі: стала гібридизації β та матричний елемент оператора імпульсу γ , які входять в оцінку (1), можуть бути визначені з оптичних спектрів поглинання та відбиття сполучень, що досліджуються у нормальному стані. Значення коефіцієнтів поглинання $\alpha(\omega)$ та відбиття $r(\omega)$ вираховуються за допомогою тензора комплексної електропровідності $\sigma_{\mu\nu}(\omega)$.

Для частот ω , менших порога міжзонного поглинання електромагнітного випромінювання ω_t рівного $\frac{2\beta}{\hbar}$ у двозонній моделі. $\sigma_{\mu\nu}(\omega)$ рівний провідності майже заповненої зони $E_-(\mathbf{k})$ і має вид формули Друде.

Для $\omega \geq \frac{2\beta}{\hbar}$ міжзонне поглинання вносить додаткове укладення в електропровідність, яке домінує над провідністю зони $E_-(\mathbf{k})$, дійсна частина якого рівна

$$Re\sigma_{\mu\nu}(\omega) = \frac{c_{\mu\nu}(\omega)}{\sqrt{\omega^2 - \omega_t^2}},$$

де

$$C_{\mu\nu}(\omega) = \pi \left(\frac{e\hbar}{m} \right)^2 \left\{ \left\langle \psi_-^{\mathbf{k}} \left| \frac{\partial}{\partial x_\mu} \right| \psi_+^{\mathbf{k}} \right\rangle^1 \left\langle \psi_+^{\mathbf{k}} \left| \frac{\partial}{\partial x_\nu} \right| \psi_-^{\mathbf{k}} \right\rangle^1 \times \right. \\ \times \rho(\varepsilon_p^1) (g(E_+^1(\mathbf{k})) - g(E_-^1(\mathbf{k}))) - \left\langle \psi_-^{\mathbf{k}} \left| \frac{\partial}{\partial x_\mu} \right| \psi_+^{\mathbf{k}} \right\rangle^2 \times \\ \left. \times \left\langle \psi_+^{\mathbf{k}} \left| \frac{\partial}{\partial x_\nu} \right| \psi_-^{\mathbf{k}} \right\rangle^2 \rho(\varepsilon_p^2) (g(E_+^2(\mathbf{k})) - g(E_-^2(\mathbf{k}))) \right\},$$

індекс "1" відповідає значенню виразу, який обчислений за такого значення енергії $\varepsilon_p(\mathbf{k}) = \varepsilon_d + \sqrt{(\hbar\omega)^2 - 4\beta^2}$, та "2" - $\varepsilon_p(\mathbf{k}) = \varepsilon_d - \sqrt{(\hbar\omega)^2 - 4\beta^2}$,
 m і e - маса і заряд електрона, відповідно,
 $g(\varepsilon)$ - функція розподілу Фермі-Драка,
 $\rho(\varepsilon_p)$ - густина одноелектронних станів зони ε_p ,
 $\psi_{\pm}^{\mathbf{k}}$ - хвильові функції гібридизованих $E_p(\mathbf{k})$ зон.

Відповідно за отриманого виразу для $\text{Re}\sigma_{\mu\nu}(\omega)$ тензор комплексної електропровідності звертається до нескінченності за умови $\omega = \omega_t$. Введення відмінного від нуля часу релаксації $\tau(\omega)$ електронів провідності приводить до скінченного значення $\sigma_{\mu\nu}$. У цьому випадку частота ω_t відповідає максимуму експериментально вимірюваної оптичної провідності, а величина $\tau(\omega = \omega_t)$ визначається значенням $\alpha(\omega_t - 0)$:

$$\tau = \frac{1}{c\alpha(\omega_t - 0)} \frac{\xi}{\omega_t \sqrt{\varepsilon_0 \omega_t^2 - \xi}},$$

де

$$\xi = \frac{4\pi n e^2}{m^*},$$

c - швидкість світла,

ε_0 - діелектрична проникність вакууму,

n - концентрація електронів провідності,

m^* - ефективна маса електрона у верхньої межі зони $E_-(\mathbf{k})$.

Для $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$, $\tau \approx 3.2 \cdot 10^{-14} \text{c}$, $\omega_t = 0.2 \text{eV}$, $\omega_t \tau \approx 10$, для $\text{La}_{1.8}\text{Sr}_{0.2}\text{CuO}_4$ $\tau \approx 2 \cdot 10^{-13} \text{c}$, $\omega_t = 0.1 \text{eV}$, $\omega_t \tau = 29$.

Вираз, одержаний у роботі вираз для тензора комплексної електропровідності, буде використаний для обчислення коефіцієнтів відбиття $r(\omega)$ та поглинання $\alpha(\omega)$, за яким вираховується параметр γ двозонної моделі.

Залежність γ^2 від $\alpha(\omega_t + 0)$ має вигляд

$$\gamma^2 = \frac{m^2 \omega_t}{4\pi e^2 \hbar^2} \sqrt{\frac{\omega_t}{\tau}} \frac{f(\frac{\hbar \omega_t}{2kT})}{\rho(E_d)} \left\{ \eta + \frac{p}{\sqrt{2}} - \frac{\eta^2 + \frac{p}{2\sqrt{2}}}{\sqrt{2}-1} \left[\frac{a_1}{\omega_t \tau} + \right. \right. \quad (3)$$

$$\left. \left. + \frac{1}{(\omega_t \tau)^2} \left(\frac{a_1^2}{\sqrt{2}} + a_2(\sqrt{2}-1) \right) \right] + \frac{1}{(\omega_t \tau)^2} \frac{a_1^2}{(\sqrt{2}-1)^2} \left(\eta^2 + \frac{3}{8} \frac{p}{\sqrt{2}} \right) \right\}$$

де

$$\eta = \frac{\alpha(\omega_t+0)}{\omega_t \sqrt{2(\sqrt{2}-1)}},$$

$$a_1 = \Delta_1 - \frac{1}{4}, \quad a_2 = \Delta_2 - \frac{\Delta_1}{4} - \frac{3}{32},$$

$$\Delta_1 = -\frac{f'_a(x)\hbar\omega_t}{2kT f^2(x)}, \quad \Delta_2 = x^2 \left(\frac{f''_a(x)}{2} - \frac{f'_a(x)}{f(x)} \right) \frac{1}{f(x)}, \quad x = \frac{\hbar\omega_t}{2kT},$$

$$f(x) = \text{cth}(x) + \frac{1 + \frac{1}{2} \left(\frac{\epsilon_d - \mu(T)}{kT} \right)^2}{sh(x)}, \quad p = \epsilon_0 - \frac{4\pi e^2 n}{\omega_t^2 m^*},$$

$\mu(T)$ - термодинамічний потенціал,

$\lim_{T \rightarrow 0} f\left(\frac{\hbar\omega_t}{2kT}\right) = 1$, як наслідок нерівності $\frac{\epsilon_d - \mu}{kT} \ll 1$.

Крім цього γ^2 визначає кути хилу θ і φ до осі частот функцій $\alpha(\omega)$ і $r(\omega)$, відповідно, для $\omega = \omega_t + 0$.

$$tg^2(\theta) = \frac{(\pi e \tau \hbar)^2 \sqrt{\omega_t \tau} \rho(\epsilon_d)}{2(\sqrt{2}-1)m^2 f(\frac{\hbar\omega_t}{2kT})} \gamma^2 \quad (4)$$

і

$$tg \varphi = \frac{1}{q_0} \left(\frac{q_1}{q_0} + 1 \right) \sqrt{\frac{2t}{\sqrt{2}+1}} \frac{\tau}{4} \quad (5)$$

де

$$q_0 = 1 + \sqrt{2t} + \sqrt{2t(1+\sqrt{2})} + \frac{p}{\sqrt{2}},$$

$$q_1 = 1 + \sqrt{2t} - \sqrt{2t(1+\sqrt{2})} + \frac{p}{\sqrt{2}},$$

$$t = \frac{1}{\omega_t} \left(\frac{2\pi e \hbar}{m} \right)^2 \gamma^2 \sqrt{\frac{\tau}{\omega_t}} \frac{\rho(\epsilon_d)}{f(\frac{\hbar\omega_t}{2kT})}.$$

Відповідно з результатами, які були одержані у третьому розділі, визначаючи величину параметра γ^2 з результатів (3)-(5) та підставляючи в оцінку (1) для критичної температури, отримуємо зв'язок T_C та коефіцієнтів поглинання та відбиття надпровідного кристалу, який знаходився у нормальному стані, за частоти порогу міжзонного поглинання.

Для $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$, $\gamma^2 = 1.6 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-2}$, $T_C \geq 80 \text{ K}$, для $La_{1.8}Sr_{0.2}CuO_4$ $\gamma^2 = 10^{17} \text{ cm}^{-2}$, $T_C \geq 26 \text{ K}$.

На основі теорії лінійного відгуку Кубо у третьому розділі також був одержаний зв'язок значення добутку параметрів β та γ і другого частотного моменту дійсної частини електропровідності $\mu_2(\mathbf{k})$ надпровідника у нормальному стані.

$$\mu_2(\mathbf{k} = 0) = \frac{\pi e^2 v_f^2}{2mN\hbar^2} \phi(\beta\gamma)^2,$$

де

$$\phi = \frac{1}{V^2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \frac{(1 + \text{th}(\frac{E(\mathbf{p}) - E_F}{2T})) (1 - \text{th}(\frac{E(\mathbf{p}) - E_F}{2T}))}{\frac{E(\mathbf{p}) - E(\mathbf{p} + \mathbf{q})}{\hbar} + \omega_{ph}(\mathbf{q})};$$

N - густина елементарних комірок кристалу,

v_F - швидкість електрону на рівні ϵ_F^F ,

$\omega_{ph}(\mathbf{q})$ - частота акустичного фонону.

По порядку величини

$$\phi \sim \frac{\pi\omega_{\Delta}}{u^3},$$

де

$$\omega_{\Delta} = \omega_{ph}(q_{ph} = \frac{E_{-max} - E_F}{u\hbar})$$

u - швидкість звуку.

В заключному розділі приведені основні результати, які отримані у дисертації, та сформульовані наукові положення, які виносяться на захист.

Основні результати та висновки.

1. Досліджена двозонна модель високотемпературної надпровідності у випадку перетинання широкої та плоскої зон. Показано, що зонна гібридизація формує новий зонний спектр з рівнем Фермі на периферії наполовину заповненої зони провідності. Це приводить до ефекту важких ферміонів, високої густини одноелектронних станів на E_F і до значного поширення області фазового простору одноелектронних збуджень, що формують надпровідну фазу. Отримана оцінка знизу критичної температури T_C і умови її застосування.

2. Розраховано спектр низькоенергетичних одноелектронних збуджень мідно-оксидних надпровідників у випадку слабких кулонівських кореляцій зонних електронів та за їх відсутності. Показано, що модельна ситуація реалізується у надпровідних купратах. Визначена густина одноелектронних станів на межі зони провідності та форма поверхні Фермі. Обчислена температура надпровідного переходу та її залежність від добування.

3. Обчислено тензор комплексної електропровідності, що складається із двох складових: друдевського вкладу, що відповідає внутрішньозонній провідності, і додатка, який зв'язаний з міжзонним поглинанням. Визначені коефіцієнти відбиття і поглинання, а також зв'язок їх значень за частоти порогу міжзонного поглинання із параметрами двузонної моделі, які входять в оцінку T_C : сталої гібридизації β та міжзонним матричним елементом оператора імпульсу γ . Таким чином, значення критичної температури може бути визначена із спектрів поглинання та відбиття надпровідної кераміки у нормальному стані.

4. Опираючись на теорію лінійного відгука Кубо вказано зв'язок другого частотного моменту дійсної частини електропровідності надпровідника у нормальному стані і добутка модельних параметрів β та γ .

5. Визначена низькотемпературна електронна теплоємність надпровідної фази двузонної моделі.

Основні результати дисертації опубліковані в роботах:

1. Адамян В. М., Медведев М. Д. "Высокочастотная проводимость высокотемпературных сверхпроводников", Сверхпроводимость: физика, химия, техника, 1994, т. 7, N 8-9, с. 1359-1364.

2. Медведев М. Д. "Некоторые особенности зонного спектра медно-оксидных ВТСП", Физика низких температур, 1995, т. 21, N 8, с. 810-815.

3. Медведев М. Д. "Сверхпроводимость в модели с перекрывающимися широкой и плоской зонами", Физика твердого тела, 1997, т. 39, N 2.

Medvedev M.D. The influence of the special features of one-electron excitations of copper-oxide ceramics in the strong doping range on the evolution of their superconducting state. Thesis on search of the scientific degree of candidate of physical and mathematical sciences, speciality 01.04.02-theoretical physics. Odessa State University, Odessa, 1997.

The two-band spectral picture of high- T_c superconductivity with a flat band in the interior of a broad valent band is investigated. The band hybridization yields an considerable extension of k -space region of electronic states involving into superconductivity. As a result, it causes the superconducting temperature to be high.

The consistent band-structure analysis shows that the similar situation takes place to all p-type superconducting cuprates. The explicit band spectra and the electronic state density near its extreme points are obtained in the case of weak Coulomb correlations of band electrons. The convex doping dependence of transition temperature T_c is defined.

The connection of the two-band parameters and the optical characteristics of high- T_c superconductors in the normal state is found.

Медведев М.Д. Влияние особенностей одноэлектронного спектра сильно допированных медно-оксидных керамик на формирование их сверхпроводящей фазы.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02-теоретическая физика. Одесский государственный университет, Одесса, 1997.

Исследована двухзонная модель высокотемпературной сверхпроводимости с плоской зоной внутри широкой зоны проводимости, гибридизация которых приводит к значительному расширению области фазового пространства одноэлектронных возбуждений, формирующих сверхпроводящее состояние, и, как следствие, к повышению температуры сверхпроводящего перехода.

Согласно последовательно проведенных зонных расчетов показано, что аналогичная модели ситуация реализуется во всех меднооксидных сверхпроводниках р-типа. Получены выражения для низкоэнергетического зонного спектра и плотности одноэлектронных состояний вблизи его экстремальных точек в случае слабых кулоновских корреляций зонных электронов, а также зависимость критической температуры T_c от допирования.

Для рассмотренной двухзонной модели получена связь основных ее параметров с оптическими характеристиками высокотемпературного сверхпроводника в нормальном состоянии.

Ключові слова: *високотемпературна надпровідність, двозонна модель, критична температура, густина одноелектронних станів, оптичні спектри поглинання та відбиття.*