

# ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ БОЗОНА И ЭНЕРГИЯ КОНДЕНСАЦИИ В СВЕРХПРОВОДЯЩЕМ СОСТОЯНИИ ПРИМЕСНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

*А. И. Агафонов\*, Э. А. Манькин*

*Российский научный центр «Курчатовский институт»  
123182, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 16 августа 2005 г.

Проведено исследование сверхпроводящего состояния в примесных полупроводниках, у которых сверхпроводящая щель открывается в спектре одночастичных состояний, появляющихся при легировании в области исходной запрещенной зоны. Для описания примесного полупроводника использовалась модель Холстейна – Андерсона. Найденная зависимость размера волновой функции относительного движения пары частиц в связанном состоянии от уровня легирования в передопированной области фазовой диаграммы согласуется с известными экспериментальными данными для  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ . Установлено, что изменение температуры  $T < T_c$  сказывается только на естественной нормировке волновой функции бозонов, которая нормирована на их концентрацию, а размер волновой функции не зависит от температуры. Теоретически полученные энергия конденсации и скачок теплоемкости при переходе сверхпроводник – металл вблизи области оптимального допирования согласуются с экспериментально наблюдаемыми для  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ .

PACS: 74.20.-z, 74.72.-h

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Наиболее важный вопрос, ответ на который напрямую связан с пониманием физики фазовых переходов в купратах, состоит в том, чтобы выяснить какова природа электронных состояний вблизи химического потенциала в этих легированных полупроводниках. До сих пор отсутствует однозначный ответ на этот вопрос. Было предложено два альтернативных сценария перестройки электронного спектра в легированных купратах [1, 2]. Стандартные подходы, основанные на модельных гамильтонианах Хаббарда для описания сильнокоррелированных электронных систем, предполагают первый сценарий, согласно которому химический потенциал смещается из запрещенной зоны в край одной из разрешенных зон уже при малых уровнях легирования. Известно, что эти модели не могут дать удовлетворительного объяснения всей совокупности доступных экспериментальных данных [2].

Результаты исследований легированных купра-

тов различными методиками подтверждают второй сценарий, согласно которому при переходе от диэлектрической фазы к проводящей возникает плотность одночастичных электронных состояний в области исходной запрещенной зоны [2–5]. При этом химический потенциал находится в этих щелевых состояниях и его положение слабо меняется при легировании. В этом случае как псевдощель в нормальном состоянии в недоопированной области фазовой диаграммы, так и сверхпроводящая щель открываются в спектре этих глубоких щелевых состояний, появляющихся при легировании купратов.

Известны несколько теоретических подходов, в которых ВТСП и псевдощель связываются с появлением щелевых состояний в купратах. Предложена теория, в которой эти состояния ассоциируются со страйпами или, в более общем смысле, с зарядовой неоднородностью в купратах [5, 6]. Предположение о пространственной неоднородности распределения носителей заряда в  $\text{CuO}_2$ -плоскостях при их переменном заполнении позволило объяснить тонкую структуру спектра магнитного рассеяния ней-

\*E-mail: aai@issph.kiae.ru

тронов [5, 7, 8]. Однако была представлена и другая возможность описания наблюдаемого расщепления брэгговского пика при допировании в модели Ферми системы с однородным пространственным распределением носителей заряда в купратных плоскостях и существенно анизотропным в пространстве волновых векторов [9].

Недавно был предложен новый подход для ВТСП-материалов [10, 11], основанный на том, что сверхпроводящее состояние сохраняется глубоко в диэлектрическом состоянии, сосуществует с антиферромагнетизмом купратов при малых уровнях допирования, но не проявляет себя лишь из-за разрушения дальнего порядка. Поскольку отсутствуют убедительные данные о возможности сверхпроводимости в моделях Хаббарда (см. работу [10] и ссылки в ней), вместо диагонализации конфликтующих гамильтонианов для модели плоской квадратной решетки узлов был использован подход БКШ, дополненный тем, что в волновую функцию основного состояния введен проекционный оператор, учитывающий кулоновское взаимодействие фермионов на узлах. В этой модели возникает плотность состояний в области щели Мотта–Хаббарда, а химический потенциал не будет резко меняться на величину порядка щели с ростом легирования [10]. Однако в этой модели щелевая плотность состояний остается конечной даже при отсутствии легирования. В то же время экспериментальное исследование структурного пика плотности щелевых состояний с изменением уровня легирования показало, что площадь под ним пропорциональна уровню легирования (см. работу [12] и ссылки в ней).

Для изучения ВТСП-проблемы важную роль играет механизм легирования. В теориях фазовых переходов, контролируемых переменным заполнением купратных плоскостей, постулируется, что атомы примеси поставляют носители заряда, которые свободно мигрируют в купратные слои, меняя число носителей заряда на элементарную ячейку решетки [13, 14]. Как известно, это приводит к перескоку химического потенциала через щель как при дырочно, так и при электронном легировании [4, 15], так что происходит металлизация одной из разрешенных зон исходного соединения.

Нами была представлена теория сверхпроводимости в примесных зонах легированных полупроводников, в которых носители заряда, вводимые примесью, исходно связаны с примесными ионами [16]. Обоснованием такого механизма легирования для ВТСП-материалов служат многочисленные экспери-

ментальные данные (см. работу [16] и ссылки в ней). Исходные ВТСП-материалы являются, как правило, антиферромагнетиками. При этом температура Нееля существенно зависит от уровня легирования. Так, в  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  магнитное упорядочение исчезает при уровне легирования  $x = 0.02$  и при значениях  $x \geq 0.05$  имеют место переходы изолятор–сверхпроводник–металл в парамагнитной фазе легированного соединения.

Целью настоящей работы является исследование сверхпроводящего состояния в примесных полупроводниках, у которых при переходе от диэлектрической фазы к проводящей возникает плотность одночастичных электронных состояний в области исходной запрещенной зоны. Для описания примесного полупроводника используется модель Холстейна–Андерсона, в которой учитывается ансамбль примесных узлов, случайным образом распределенных в исходной решетке, и учтены электронные корреляции на примесных орбиталях. В передоприванной области фазовой диаграммы проводится исследование волновой функции конденсата в зависимости от температуры и уровня легирования, а также энергии конденсации и скачка теплоемкости при переходе сверхпроводник–плохой металл в примесном полупроводнике. Проводится сравнение с данными для  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ .

## 2. МОДЕЛЬНЫЙ ГАМИЛЬТониАН

Электронный спектр в  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  вблизи щели определяется в основном  $\text{CuO}_2$ -решеткой. В  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  купратный слой  $\text{CuO}_2$  находится между двумя промежуточными слоями состава  $\text{La}_{1-x/2}\text{Sr}_{x/2}\text{O}$ . Примесные орбитали, появление которых связано с замещением ионов La ионами Sr, прижаты к купратному слою, а их центры расположены вне  $\text{CuO}_2$ -плоскости. При дополнении базиса одночастичных состояний  $\text{CuO}_2$ -плоскости примесными состояниями в гамильтониане появляется член, отвечающий гибридизации между зонными состояниями и примесными орбиталями. Учитывая сильную анизотропию физических характеристик купратов, мы не будем рассматривать перенос заряда поперек слоев  $\text{CuO}_2$ .

Структура  $\text{Nd}_2\text{CuO}_4$  является подобной  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  за исключением позиций атомов O вне  $\text{CuO}_2$ -плоскостей. В  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$  замещение атомов  $\text{Nd}^{3+}$  атомами  $\text{Ce}^{4+}$  может привести к возникновению однократно заполненного глубокого примесного состояния.

Обобщая одноузельную модель Андерсона–Халдайна [17] для примесного полупроводника с конечной концентрацией примесных атомов, случайным образом распределенных в исходной кристаллической решетке, и учитывая электрон-фононное взаимодействие холстейновского типа (локальная мода) на примесных узлах, гамильтониан представленной модели можно записать в виде

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{j\sigma} \varepsilon_0 n_{j\sigma} + \sum_j U n_{j\sigma} n_{j,-\sigma} + \sum_{j,\mathbf{k}\sigma} \{V_{\mathbf{k}j} a_{\mathbf{k}\sigma}^+ a_{j\sigma} + \text{H.c.}\} + \sum_{j\sigma} \xi \hbar \Omega n_{j\sigma} (b_j + b_j^+) + \sum_j \hbar \Omega \left( b_j^+ b_j + \frac{1}{2} \right). \quad (1)$$

Здесь оператор числа частиц  $n_{\mathbf{k}\sigma} = a_{\mathbf{k}\sigma}^+ a_{\mathbf{k}\sigma}$  относится к исходной зоне полупроводника с законом дисперсии  $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ ;  $\mathbf{k}$  — волновой вектор;  $\sigma = \uparrow, \downarrow$  — спиновый индекс; оператор числа частиц  $n_{j\sigma} = a_{j\sigma}^+ a_{j\sigma}$  относится к ансамблю узлов, случайным образом распределенных в исходной решетке полупроводника;  $\varepsilon_0$  — затравочная энергия электронного локального состояния на узле;  $j$  — номер узла;  $U$  — внутриузельная электронная корреляционная энергия;  $V_{\mathbf{k}j}$  — матричный элемент гибридизации,

$$V_{\mathbf{k}j} = V_{\mathbf{k}l} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j),$$

где  $\mathbf{R}_j$  — радиус-вектор примесного  $j$ -центра;  $\xi$  представляет электрон-фононное взаимодействие;  $b_j^+$  — оператор рождения локального фонона на узле.

В модели (1) используется однозонное приближение для полупроводника. Это вызвано тем, что численный анализ представленных ниже аналитических решений замкнутых систем уравнений для функций Грина удалось провести только в этом приближении.

Собственные состояния гамильтониана (1) зависят от исходного узельного заполнения  $2A_0 = \langle j | n_{j,\uparrow} + n_{j,\downarrow} | j \rangle$ . Будем рассматривать случай одного электрона на примесную орбиталь  $2A_0 = 1$ . Полное число примесных узлов  $N_{im} = \sum_j$  представим в виде  $N_{im} = xN_t$ , где  $N_t$  — полное число состояний в затравочной зоне полупроводника, а  $x$  будем рассматривать как уровень легирования.

Для возникновения сверхпроводимости в модели (1) ключевая роль отводится образованию локальных бозон-фермионных смешанных состояний на примесных узлах [16]. В этом случае узельное состояние имеет вид

$$|\Psi\rangle = (A - \beta^2)^{1/2} |\Psi_F\rangle + \beta \exp(i\phi) |\Psi_B\rangle, \quad (2)$$

где  $A$  — среднее заполнение узельного состояния;  $|\Psi_F\rangle$  — двухчастичное фермионное состояние на узле;  $\beta$  — амплитуда узельного синглетного бозонного состояния  $|\Psi_B\rangle$ . Величиной  $\beta^2$  определяется вероятность нахождения заряженного бозона на узле.

В случае образования узельных бозон-фермионных состояний (2) с  $\beta \neq 0$  гибридизация в (1) приведет к двухчастичным переходам по примесному ансамблю: локальный бозон на  $j$ -узле  $\rightarrow (-\mathbf{k}, \mathbf{k})$ -пара квазичастиц в связанном состоянии с покоящимся центром инерции  $\rightarrow$  локальный бозон на  $j_1$ -узле и так далее. Такие переходы локальных узельных синглетных бозонов вызовут появление распространенных заряженных бозонов, необходимых для возникновения сверхпроводимости [18].

При температуре ниже  $T_c(x)$  распространенные заряженные бозоны конденсируются на основной уровень, характеризующийся тем, что все связанные пары входят в волновую функцию основного состояния в одном и том же внутреннем состоянии с покоящимся центром инерции. Волновая функция относительного движения пары  $f^{(+)}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$  одна и та же для всех пар конденсата. Важный момент в этой теории сверхпроводимости заключается в том, что температура, при которой впервые возникает такая неустойчивость, связана с температурой, при которой возникают узельные бозон-фермионные смешанные состояния (2) в легированном полупроводнике.

### 3. СВЕРХПРОВОДЯЩЕЕ СОСТОЯНИЕ

Рассмотрение проводится в термодинамических переменных, где задано полное число фермионов в легированной системе. В стандартном представлении функции Грина определяются как [19]

$$g_{\sigma\sigma_1}(\nu, \nu_1; \tau - \tau_1) = -\langle T_\tau \{ \tilde{a}_{\nu\sigma}(\tau) \tilde{a}_{\nu_1\sigma}(\tau_1) \} \rangle,$$

$$f_{\sigma\sigma_1}^{(+)}(\nu, \nu_1; \tau - \tau_1) = \langle T_\tau \{ \tilde{\tilde{a}}_{\nu\sigma}(\tau) \tilde{\tilde{a}}_{\nu_1\sigma}(\tau_1) \} \rangle,$$

где  $\nu = j, \mathbf{k}$  и  $\langle \dots \rangle$  означает усреднение по Гиббсу.

Для модели (1) замкнутая система уравнений для функций Грина была получена в работе [16]. При этом уравнения для функций Грина с первым  $j$ -параметром  $g_{\sigma\sigma_1}(j, \nu; \tau)$  и  $f_{\sigma\sigma_1}^{(+)}(j, \nu; \tau)$  были выведены в двух приближениях, которые также использовались в теории Элиашберга [20]. Для появляющихся двухчастичных функций Грина использовались приближение среднего поля и затравочная электрон-фононная вершина в собственно-энергетических частях.

Одним из взаимосогласованных параметров этой системы является параметр  $\lambda(x, T)$ , которым определяются спектральные характеристики спиновых флуктуаций в легированном соединении [16]:

$$\lambda = g_{\uparrow\uparrow}(j, j; \tau \rightarrow 0). \quad (3)$$

Уравнение  $\lambda(x, T) = 0$  определяет температуру  $T_\lambda(x)$ , при которой затухают спиновые флуктуации в электронно-коррелированной системе (1). На фазовой диаграмме температура–уровень легирования для нормальных состояний кривая  $T_\lambda(x)$  разделяет эту диаграмму на недодопированную и передопированную области, а также определяет температуру  $T^*(x) \approx T_\lambda(x)$ , при которой имеет место плавный переход изолятор–парамагнитный плохой металл [21]. При этой температуре  $T^*(x)$  происходит переход от полупроводникового типа проводимости к металлическому.

Было показано [16], что в недодопированной части фазовой диаграммы, где существенны спиновые флуктуации, может существовать смешанное сверхпроводящее состояние, в котором сосуществуют синглетный и триплетный каналы спаривания квазичастиц. Этот результат о возможности смешанного сверхпроводящего состояния в сильно легированном полупроводнике находится в согласии с общим заключением, что такое возможно лишь в том случае, если симметрия твердого тела не включает пространственную симметрию по отношению к инверсии.

В передопированной области ( $\lambda = 0$ ) имеет место только синглетное сверхпроводящее состояние, как это показано в работе [16]. Опуская спиновые индексы, после фурье-преобразования систему уравнений для гриновских функций, описывающих свойства легированного полупроводника в сверхпроводящем состоянии, приведем к виду:

$$g(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1; \omega_n) = g^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}) \times \left( \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1} + \sum_j V_{\mathbf{k}j} g(j, \mathbf{k}_1; \omega_n) \right), \quad (4)$$

$$g(j, \mathbf{k}; \omega_n) = g^{(0)}(l, l) \left( \sum_{\mathbf{k}_1} V_{\mathbf{k}_1} g(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}; \omega_n) + (\beta U - \Delta) f^{(+)}(j, \mathbf{k}; \omega_n) \right), \quad (5)$$

$$f^{(+)}(j, \mathbf{k}; \omega_n) = f^{(0)}(l, l) \left( - \sum_{\mathbf{k}_1} V_{\mathbf{k}_1} f^{(+)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}; \omega_n) + (\beta U - \Delta) g(j, \mathbf{k}; \omega_n) \right), \quad (6)$$

$$f^{(+)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1; \omega_n) = -f^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}) \sum_j V_{j\mathbf{k}} f^{(+)}(j, \mathbf{k}_1; \omega_n), \quad (7)$$

$$g(j, j_1; \omega_n) = g^{(0)}(l, l) \left( \delta_{j, j_1} + \sum_{\mathbf{k}} V_{j\mathbf{k}} g(\mathbf{k}, j_1; \omega_n) + (\beta U - \Delta) f^{(+)}(j, j_1; \omega_n) \right), \quad (8)$$

$$g(\mathbf{k}, j; \omega_n) = g^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}) \sum_{j_1} V_{j_1\mathbf{k}} g(j_1, j; \omega_n), \quad (9)$$

$$f^{(+)}(j, j_1; \omega_n) = f^{(0)}(l, l) \left( - \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}j} f^{(+)}(\mathbf{k}, j_1; \omega_n) + (\beta U - \Delta) g(j, j_1; \omega_n) \right), \quad (10)$$

$$f^{(+)}(\mathbf{k}, j; \omega_n) = -f^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}) \sum_{j_1} V_{j_1\mathbf{k}} f^{(+)}(j_1, j; \omega_n). \quad (11)$$

В этих уравнениях использованы обозначения  $\omega_n = (2n + 1)\pi T$ , затравочные функции Грина

$$g_{\sigma\sigma}^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}; \omega_n) = (i\omega_n - \varepsilon_{\mathbf{k}})^{-1}, \quad (12)$$

$$f_{\sigma\sigma}^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}; \omega_n) = (i\omega_n + \varepsilon_{\mathbf{k}} - 2\mu)^{-1}, \quad (13)$$

$$g^{(0)}(l, l; \omega_n) = \left( i\omega_n - \varepsilon_0 - UA - \Sigma_-(\omega_n) \right)^{-1}, \quad (14)$$

$$f^{(0)}(l, l; \omega_n) = \left( i\omega_n + \varepsilon_0 + UA + \Sigma_+(\omega_n) - 2\mu \right)^{-1}, \quad (15)$$

собственно-энергетические части

$$\Sigma_{\pm}(\omega_n) = -T(\xi\hbar\Omega)^2 \sum_{n_1} d^0(\omega_n \pm \omega_{n_1}) g(j, j; \omega_{n_1}), \quad (16)$$

$$\Delta(\omega_n) = -T(\xi\hbar\Omega)^2 \sum_{n_1} d^0(\omega_n - \omega_{n_1}) f^{(+)}(j, j; \omega_{n_1}) \quad (17)$$

и фононная функция Грина

$$d^0(\omega_m = 2m\pi T) = (i\omega_m - \Omega)^{-1} - (i\omega_m + \Omega)^{-1}. \quad (18)$$

Из формул (4)–(11) видно, что эта система уравнений для гриновских функций распадается на две подсистемы. Первая подсистема уравнений (4)–(7) определяет спектральные плотности распространённых фермионов ( $g(\mathbf{k}, \mathbf{k}; \omega_n)$ ) и бозонов ( $f^{+}(-\mathbf{k}, \mathbf{k}; \omega_n)$ ), а вторая подсистема уравнений (8)–(11) определяет состояния локальных фермионов ( $g(j, j_1; \omega_n)$ ) и бозонов ( $f^{+}(j, j; \omega_n)$ ).

Используя технику конфигурационного усреднения [22] по положениям примесных атомов  $\{\mathbf{R}_j\}$  и проводя частичное суммирование диаграмм, пропорциональных  $x^n$  с  $n \geq 2$ , авторы работы [16] нашли решение подсистем уравнений (4)–(7) и (8)–(11). Это решение самосогласованно зависит от трех параметров. Первый из них есть среднее узельное заполнение:

$$A_\sigma = g_{\sigma\sigma}(j, j; \tau \rightarrow -0). \quad (19)$$

Для немагнитного состояния  $A_\sigma = A_{-\sigma} = A$ , а узельное заполнение приводится к виду

$$A = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \rho_{loc}(\omega) n(\omega - \mu). \quad (20)$$

Здесь  $n(\omega - \mu)$  — распределение Ферми,  $\mu$  — химический потенциал,  $\rho_{loc}(\omega)$  — спектральная плотность локального состояния на узле:

$$\rho_{loc}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} g(j, j; \omega_n)|_{i\omega_n \rightarrow \omega + i0}, \quad (21)$$

которая имеет нормировку

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \rho_{loc}(\varepsilon) d\varepsilon = 1. \quad (22)$$

Из условия сохранения полного числа фермионов получаем уравнение для нахождения второго параметра — химического потенциала  $\mu$  в легированном соединении —

$$\frac{1+x}{2} N_t = x N_t A + \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \rho_{ext}(\omega) n(\omega - \mu). \quad (23)$$

Здесь  $\rho_{ext}(\omega)$  — спектральная плотность распространённых одночастичных состояний в примесном полупроводнике:

$$\rho_{ext}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}, \mathbf{k}; \omega_n)|_{i\omega_n \rightarrow \omega + i0}. \quad (24)$$

Последний параметр определяется величиной  $\beta$ , квадрат модуля которого дает вероятность нахождения локального синглетного бозона на примесном узле:

$$\beta = f^{(+)}(j, j; 0). \quad (25)$$

Используя спектральное представление для функций Грина, получаем

$$\beta = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \rho_{loc}^b(\omega) n(\omega - \mu), \quad (26)$$

где вещественная бозонная спектральная плотность

$$\rho_{loc}^b(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} f^{+}(j, j; \omega_n)|_{i\omega_n \rightarrow \omega + i0} \quad (27)$$

имеет свойство

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \rho_{loc}^b(\varepsilon) d\varepsilon = 0. \quad (28)$$

Аналитическое продолжение (17) с дискретного множества точек на всю верхнюю полуплоскость  $\omega$  имеет вид

$$\Delta(\omega) = (\xi\Omega)^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_{loc}^b(x) dx \times \left[ \frac{n(\mu - x) + N}{\omega - x - \Omega + i\gamma} + \frac{n(x - \mu) + N}{\omega - x + \Omega + i\gamma} \right]. \quad (29)$$

Здесь  $N = (\exp(\Omega/T) - 1)^{-1}$ , а положительная константа  $\gamma$  в расчетах полагалась конечной, так что  $\gamma \ll \Omega$ .

Выражение для аномальной гриновской функции  $f^{+}(-\mathbf{k}, \mathbf{k}; \omega_n)$  позволяет найти фурье-компоненту в  $\mathbf{k}$ -пространстве волновой функции пары частиц в связанном состоянии:

$$f^{+}(-\mathbf{k}, \mathbf{k}; 0) = T \sum_{n=-\infty}^{+\infty} f^{+}(-\mathbf{k}, \mathbf{k}; \omega_n). \quad (30)$$

Используя спектральное представление для

функций Грина [19], выражение (30) можно привести к виду

$$f^{(+)}(-\mathbf{k}, \mathbf{k}; 0) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \rho_{ext}^b(-\mathbf{k}, \mathbf{k}; \omega) \frac{1}{2} \text{th} \left( \frac{\omega - \mu}{2T} \right), \quad (31)$$

где введена спектральная плотность

$$\rho_{ext}^b(-\mathbf{k}, \mathbf{k}; \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} f^{(+)}(-\mathbf{k}, \mathbf{k}; \omega_n) |_{i\omega_n \rightarrow \omega + i0^+}. \quad (32)$$

Положим, что энергия одночастичных состояний в исходной зоне полупроводника зависит только от модуля волнового вектора,  $\varepsilon(k)$ . Тогда из (31) легко получить волновую функцию связанной пары в координатном представлении. В трехмерном случае эта волновая функция имеет вид

$$f^{(+)}(r; 0) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{k_{max}} k^2 dk \frac{\sin(kr)}{kr} f^{(+)}(\varepsilon(k); 0), \quad (33)$$

где  $r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$  — модуль радиуса-вектора между частицами пары;  $k_{max}$  — максимальный модуль волнового вектора и введено обозначение

$$f^{(+)}(\varepsilon(k); 0) = f^{(+)}(-\mathbf{k}, \mathbf{k}; 0),$$

поскольку закон дисперсии зависит только от модуля волнового вектора.

Соответственно, в двумерном случае мы получаем

$$f^{(+)}(r; 0) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{k_{max}} k dk J_0(kr) f^{(+)}(\varepsilon(k); 0), \quad (34)$$

где  $J_0$  — функция Бесселя.

Отметим, что волновые функции (33) и (34) нормированы на концентрацию конденсированных бозонов так, что

$$2 \int |f^{(+)}(r; 0)|^2 d\mathbf{r} = N_{ext}^b, \quad (35)$$

где  $N_{ext}^b$  — концентрация конденсированных бозонов.

Для концентрации локальных бозонов имеем

$$N_{loc}^b = 2\beta^2 N_{im}.$$

Волновая функция связанной пары (33) или (34) позволяет определить размер пары частиц в связанном состоянии. В литературе используются два метода его определения (см. работы [23, 24] и ссылки

в них). В первом методе этот размер  $\xi_0$  вычисляется как

$$\xi_0^2 = \frac{\int r^2 |f^{(+)}(r; 0)|^2 d\mathbf{r}}{\int |f^{(+)}(r; 0)|^2 d\mathbf{r}}. \quad (36)$$

Во втором методе используется представление волновой функции пары в виде произведения осциллирующей части и убывающей с  $r$  амплитуды:

$$f^{(+)}(r; 0) = \frac{a(r)}{r^{d-2}} \phi_{osc}(r), \quad (37)$$

где  $d = 2, 3$  соответственно в двумерном и трехмерном случаях и  $a(r)$  — амплитуда волновой функции:

$$a(r) \propto \exp\left(-\frac{r}{\xi}\right), \quad (38)$$

определяющая размер пары частиц в связанном состоянии  $\xi$ .

В вычислениях использовалась полуэллиптическая модель симметричной валентной зоны исходного полупроводника с шириной зоны  $2D_b$  и полным числом состояний в зоне  $N_t$ . Тогда, полагая, что закон дисперсии зависит только от модуля волнового вектора, можно получить зависимость  $k(\varepsilon)$ , необходимую для вычисления волновой функции связанной пары:

$$k(\varepsilon) = k_{max} \left[ \frac{\varepsilon}{D_b} \left(1 - \frac{\varepsilon^2}{D_b^2}\right)^{1/2} + \frac{1}{\pi} \text{arctg} \left( \frac{\varepsilon}{D_b^2 - \varepsilon^2} \right) + \frac{1}{2} \right]^{1/d}. \quad (39)$$

Здесь  $d = 2, 3$  и  $k_{max} = (3\pi^2 N_t)^{1/3}$  в трехмерном случае,  $k_{max} = (4\pi N_t)^{1/2}$  в двумерном случае.

Ниже представим результаты для волновой функции заряженного бозона в зависимости от температуры и уровня легирования в двумерном случае. Трехмерный случай не дает каких-то принципиальных отличий в представленных ниже зависимостях.

Выражение для электронной энергии на примесный атом имеет вид

$$E(x, T) = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \omega d\omega \left( \frac{1}{x N_t} \rho_{ext}(\omega) + \rho_{loc}(\omega) \right) \times n(\omega - \mu) - U(A^2 + \beta^2). \quad (40)$$

Электронная энтропия на примесный атом вычислялась следующим образом:

$$S(x, T) = -2k_B \int_{-\infty}^{+\infty} \left( (1-n(\omega)) \ln(1-n(\omega)) + n(\omega) \ln(n(\omega)) \right) \times \left( \frac{1}{xN_t} \rho_{ext}(\omega) + \rho_{loc}(\omega) \right) d\omega. \quad (41)$$

При  $\beta = 0$  решение систем уравнений (4)–(7) и (8)–(11) определяет электронные спектры примесного полупроводника в состоянии плохого металла. Затем с помощью формул (40) и (41) получали энергию и энтропию нормального состояния  $E_n(x, T)$  и  $S_n(x, T)$ . Для сверхпроводящего состояния амплитуда узельного бозонного состояния  $\beta \neq 0$  и подстановка в (40) и (41) соответствующих одночастичных спектров позволяли определить энергию и энтропию сверхпроводящего состояния  $E_s(x, T)$  и  $S_s(x, T)$ . Найденные величины позволяли определить энергию конденсации на примесный атом как разность свободных энергий нормального и сверхпроводящего состояний:

$$E_{cond}(x, T) = (E_n(x, T) - TS_n(x, T)) - (E_s(x, T) - TS_s(x, T)). \quad (42)$$

Температурная зависимость энтропии  $S(T, x)$  позволяла определить электронную теплоемкость  $C(T, x)$  на примесный атом:

$$C(T, x) = T \frac{\partial S(T, x)}{\partial T}. \quad (43)$$

В результатах, представленных ниже, плотность как локальных, так и распространенных одночастичных состояний нормирована на концентрацию атомов замещения  $N_{im} = xN_t$ . При вычислениях величина  $V_k = V_{kl}N_t^{1/2}$  полагалась не зависящей от  $\mathbf{k}$ .

#### 4. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

##### *Сверхпроводящая щель*

На рис. 1 сплошными кривыми показаны одночастичные плотности локальных и распространенных состояний в области исходной запрещенной зоны ( $\omega > 1.5$  эВ) в сверхпроводящих состояниях для трех различных температур, меньших  $T_c \approx 55.4$  К. Здесь мы не показываем изменений в плотностях одночастичных состояний в области исходной валентной зоны (см. [16]). Вблизи химического потенциала

открываются энергетические щели в плотностях одночастичных распространенных состояний. Для того чтобы более наглядно представить эту перестройку одночастичных спектров при переходе в сверхпроводящее состояние, на рис. 1 приведены также вблизи  $\mu$  электронные спектры в состоянии плохого металла (штриховые кривые). Как видно, положение и величина щели одинаковы для обоих типов носителей заряда. Показано положение  $\mu$  в сверхпроводящем состоянии при  $T = 45$  К, которое понижается на 0.36 мэВ по сравнению с металлическим состоянием при той же температуре.

Отметим, что в области положения сверхпроводящей щели плотность одночастичных состояний резко понижается, но остается конечной как для локальных, так и для распространенных состояний. Это приводит, в частности, к особенности температурной зависимости электронной теплоемкости, которая будет обсуждаться ниже.

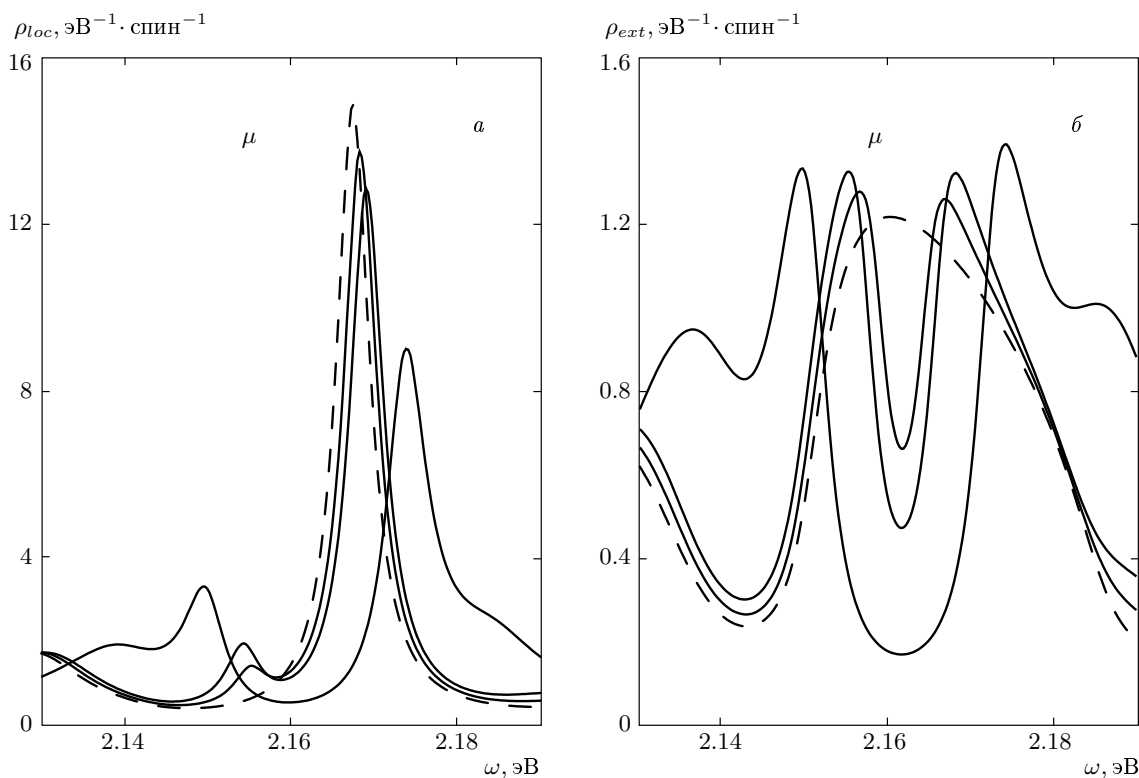
Для фиксированного уровня легирования спектральная плотность узельного бозона затухает при увеличении температуры. Соответственно, параметр  $\beta$  и сверхпроводящая щель уменьшаются, а плотность одночастичных состояний плавно растет в области щели. Такое поведение спектральных плотностей предопределяет температурный переход сверхпроводник–металл. На рис. 2 показаны температурные зависимости параметра  $\beta$  и щели  $\Delta_s$  в электронных спектрах, определенные по положению двух максимумов в плотностях около  $\mu$ . Вблизи температуры сверхпроводящего перехода  $T_c \approx 55.4$  К обе эти величины хорошо аппроксимируются характерными зависимостями

$$\begin{aligned} \beta &= 0.0915 \sqrt{1 - T/T_c}, \\ \Delta_s &= 107.56 \sqrt{1 - T/T_c} \text{ (мэВ)}. \end{aligned} \quad (44)$$

При постоянной температуре  $T < T_c(x)$  с ростом уровня легирования параметр  $\beta$ , характеризующий узельные бозоны, и сверхпроводящая щель уменьшаются. Это приводит к индуцированному легированию переходу сверхпроводник–металл. Изменения в электронных спектрах отличаются от представленных на рис. 1 лишь тем, что спектры как целое смещаются вправо с ростом  $x$  (см. [16]).

##### *Волновая функция конденсата в зависимости от температуры и уровня легирования*

В теории БКШ волновая функция куперовской пары сильно осциллирует, а ее амплитуда убывает почти экспоненциально на расстояниях между частицами пары  $r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ , превышающих  $\xi_0$ . По-



**Рис. 1.** Одночастичные спектры примесных зон вблизи химического потенциала в сверхпроводящем состоянии для температур  $T = 45, 54, 55$  К (сплошные кривые). Штриховая кривая показывает электронный спектр в металлическом состоянии при  $T = 55.5$  К сразу за переходом сверхпроводник – металл,  $T_c \approx 55.4$  К. Уровень легирования  $x = 0.15$ . Параметры:  $D_b = 1.5$  эВ,  $\varepsilon_0 = D_b - 0.2$  эВ,  $V_k = 1.3$  эВ,  $U = 0.5$  эВ,  $\xi = 6$ ,  $\hbar\Omega = 30$  мэВ и  $\gamma = 0.1\hbar\Omega$

этому в теории появляется микроскопический масштаб — размер куперовской пары или длина когерентности, которые существенно зависят от температуры.

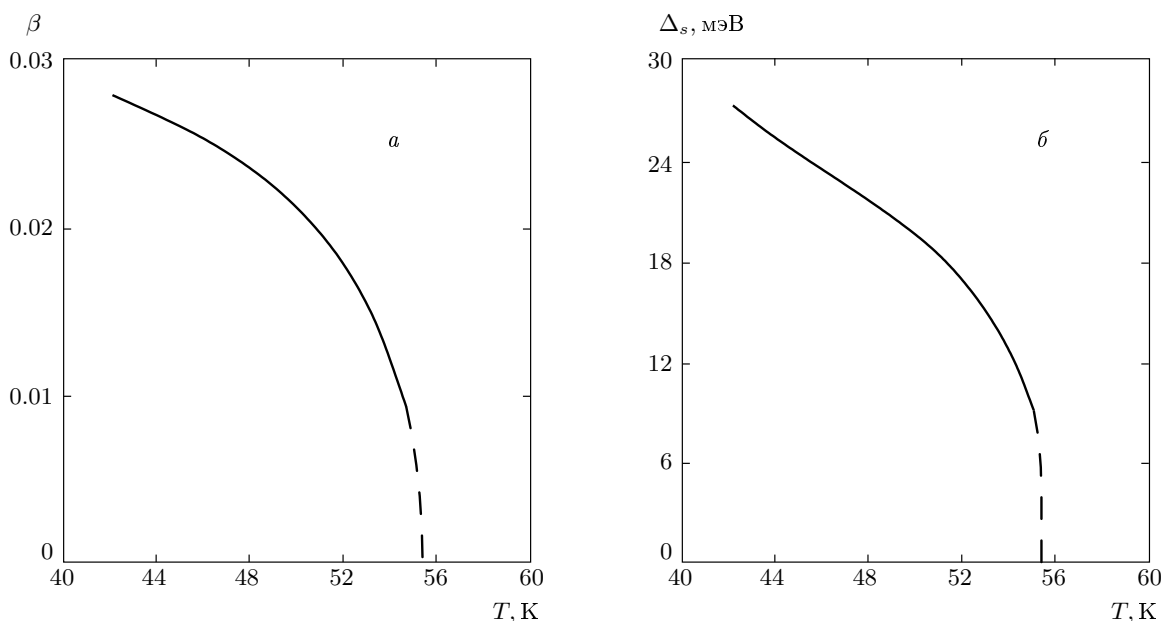
Теперь представим результаты для двумерной волновой функции пары частиц в связанном состоянии в теории сверхпроводимости в примесных полупроводниках. На рис. 3а показана зависимость волновой функции  $f^{(+)}(-\mathbf{k}, \mathbf{k}; 0)$  от собственных значений энергий  $\varepsilon(k)$  исходного полупроводника для трех различных температур, одна из которых близка к температуре сверхпроводящего перехода  $T_c$ . Видно, что эта зависимость представляет собой широкий пик, площадь под которым уменьшается с ростом температуры. Положение максимума волновой функции приходится на энергию, которая не зависит от температуры.

Как отмечалось выше, волновые функции (33) и (34) нормированы на концентрацию конденсированных бозонов. Это находит свое отражение в том, что площадь под пиками на рис. 3а уменьшается с рос-

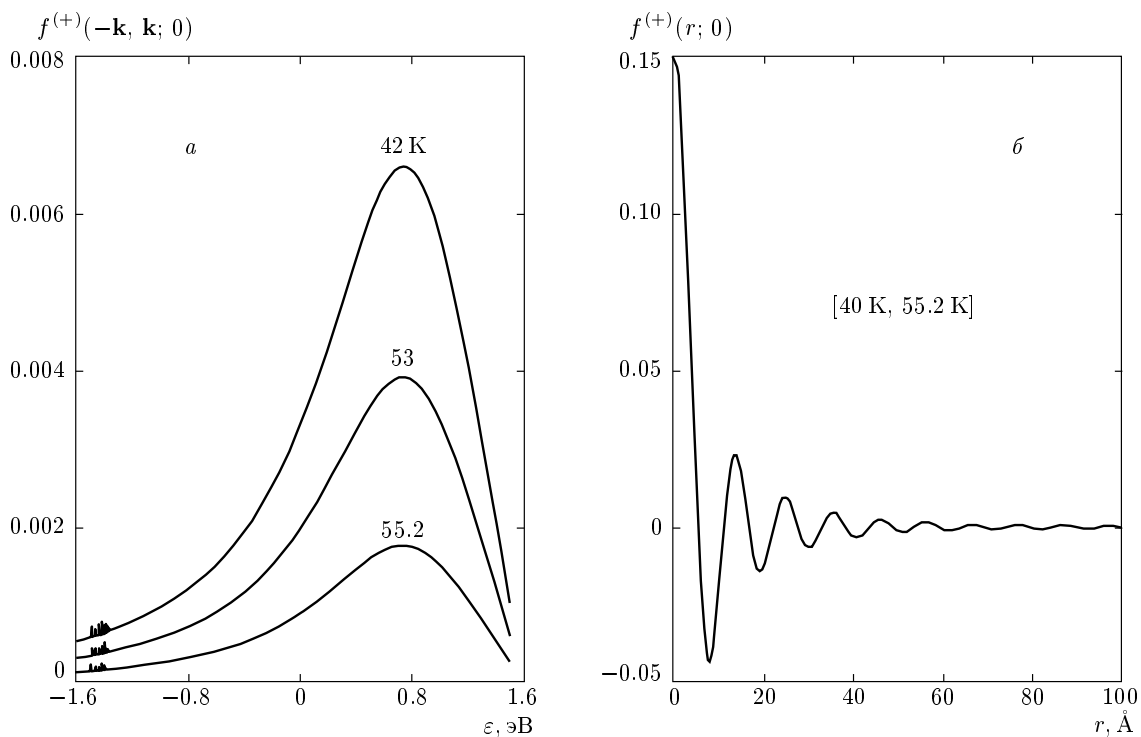
том  $T < T_c$ . Волновая функция бозона в координатном представлении  $f^{(+)}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2; 0)$  вычислялась по формуле (34). Чтобы показать, как меняется с температурой пространственная зависимость волновой функции бозона, мы, исключая естественную нормировку, переходим к ее нормировке на единицу. Результаты расчета показаны на рис. 3б. Оказалось, что такая волновая функция бозона не зависит от температуры.

Подчеркнем, что этот результат (об отсутствии температурной зависимости волновой функции пары в связанном состоянии) является общей закономерностью при различных разумных изменениях модельных параметров. Это существенно отличается от результата в модели БКШ, в которой  $\xi_0 \propto (1 - T/T_c)^{-1/2}$ . Этот, на первый взгляд, неожиданный результат имеет простое объяснение. Переход в сверхпроводящее состояние в легированном полупроводнике связан с температурой, при которой возникают узельные бозон-фермионные смешанные состояния (2). Образование распространен-

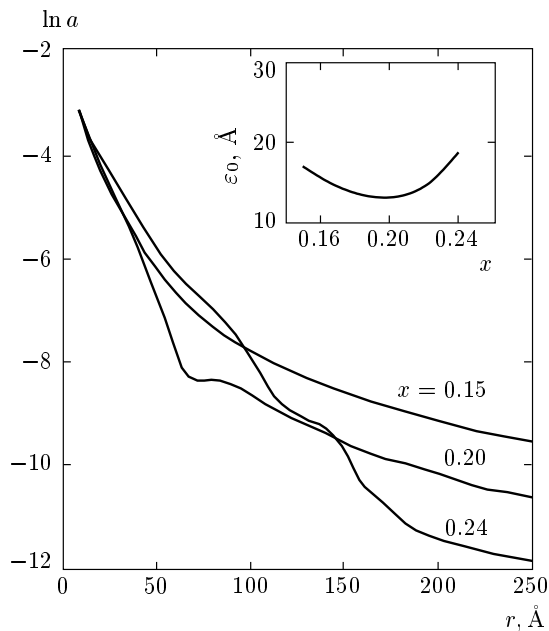




**Рис. 2.** Температурные зависимости амплитуды узельного бозонного состояния  $\beta(T)$  и сверхпроводящей щели  $\Delta_s$ . Штриховые кривые — аппроксимация этих зависимостей по формуле (44). Уровни легирования и параметры те же, что и на рис. 1



**Рис. 3.** а) Волновая функция связанной пары квазичастиц  $f^{(+)}(-\mathbf{k}, \mathbf{k}; 0)$  как функция собственных значений энергий  $\epsilon_k$  исходного полупроводника для трех различных температур. б) Нормированная на единицу волновая функция связанной пары в координатном представлении. Легирование и параметры те же, что и на рис. 1



**Рис. 4.** Координатная зависимость амплитуды волновой функции связанной пары для трех различных уровней легирования. На вставке: зависимость размера волновой функции от уровня легирования. Параметры те же, что и на рис. 1

ных заряженных бозонов обусловлено гибридизацией, приводящей к двухчастичным переходам по примесному ансамблю: локальный бозон на  $j$ -узле  $\rightarrow \rightarrow (-\mathbf{k}, \mathbf{k})$ -пара квазичастиц в связанном состоянии с покоящимся центром инерции  $\rightarrow$  локальный бозон на  $j_1$ -узле и т. д. Очевидно, что влияние температуры на этот эффект ансамбля примеси является несущественным.

Зависимость амплитуды волновой функции пары связанных частиц от расстояния между ними для трех различных уровней легирования  $x$  представлено на рис. 4. Видно, что на малых расстояниях уменьшение этой амплитуды с ростом  $r$  близко к экспоненциальному. При уровне легирования  $x = 0.15$  характерная корреляционная длина, определяющая это затухание амплитуды, равна  $12.9 \text{ \AA}$ , а среднее значение размера волновой функции бозона, вычисленное по формуле (36), приводит к величине  $\xi_0 = 17.2 \text{ \AA}$ .

Отметим, что амплитуда волновой функции пары связанных частиц и, соответственно, корреляционная длина  $\xi_0$  не зависят от температуры. При анализе экспериментальных работ мы не нашли данных для температурной зависимости размера волновой функции бозона для сверхпроводящих леги-

рованных купратов.

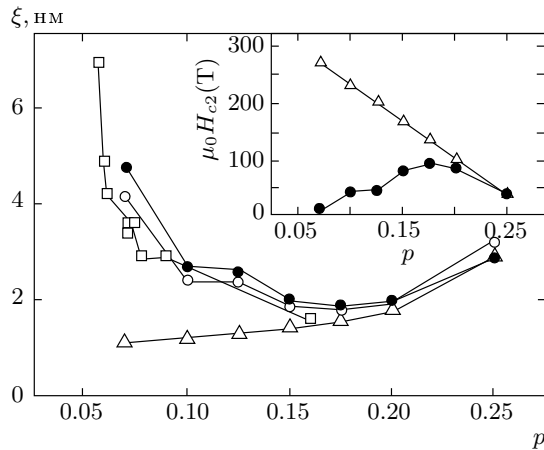
В решение системы уравнений для сверхпроводящего состояния (4)–(11), в котором учитываются вклады от различных процессов рассеяния [16], уровень легирования  $x$  входит сложным образом. Поэтому волновая функция пары частиц в связанном состоянии оказывается зависящей от  $x$ . Сначала при увеличении уровня легирования подавляются корреляции в относительном движении пары на больших расстояниях, как это ясно показано на рис. 4 для двух кривых, соответствующих уровням легирования  $x = 0.15$  и  $x = 0.20$ . Затухание корреляций в относительном движении частиц, образующих связанную пару, вызвано их рассеянием на примесном ансамбле. При этом корреляционная длина на малых расстояниях между частицами не меняется. В результате средний размер пары  $\xi_0$ , определенный по формуле (36), уменьшается при изменении уровня легирования от  $x = 0.15$  до  $x = 0.20$ , как это показано на вставке на рис. 4.

Последующее увеличение  $x$  приводит к дальнейшему уменьшению корреляции в относительном движении пары связанных частиц на больших расстояниях за счет рассеяния на примесном ансамбле. Но при этом происходит увеличение корреляционной длины волновой функции пары на малых расстояниях между частицами, как это показано на рис. 4 для двух кривых, соответствующих уровням легирования  $x = 0.20$  и  $x = 0.25$ . В результате средний размер пары  $\xi_0$ , определенный по формуле (36), увеличивается при изменении уровня легирования от  $x = 0.20$  до  $x = 0.25$ , как это показано на вставке на рис. 4.

Полученная зависимость среднего размера пары  $\xi_0$  от уровня легирования  $x$ , имеющая минимум вблизи  $x \approx 0.20$  (см. вставку на рис. 4), качественно согласуется с экспериментальными данными, показанными на рис. 5, для размера волновой функции пары как функции дырочного легирования в  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  [25]. В этой работе также отмечалось расхождение экспериментальных данных с тем, что ожидается в модели предварительно образованных пар в нормальной фазе.

*Энергия конденсации и скачок теплоемкости при переходе сверхпроводник – металл*

Существует большое число экспериментальных и теоретических работ, посвященных изучению энергии конденсации и скачка теплоемкости при переходе в сверхпроводящее состояние в легированных купратах (см. работы [26–28] и ссылки в них). Одна



**Рис. 5.** Полученная из экспериментальных данных зависимость длины когерентности от уровня легирования в  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  (темные и светлые кружки) [25], треугольники — результаты расчета в модели предварительно образованных пар, квадраты — экспериментальные данные для YBCO-123

из главных проблем заключается в большой энергии конденсации на примесный атом, например на атом O в  $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{CuO}_y$  [29], и большой величине скачка электронной теплоемкости на носитель заряда в купратах, по сравнению с величиной, предсказываемой в теории БКШ [30–33].

На рис. 6 показаны зависимости электронной энергии, вычисленные по формуле (40) для нормального состояния плохого металла (кривая  $n$ ) и сверхпроводящего состояния (кривая  $s$ ) при  $x = 0.15$ . Видно существенное понижение электронной энергии в сверхпроводящем состоянии, связанное с открытием сверхпроводящей щели, по сравнению с энергией нормального состояния. При температуре  $T_c$  обе кривые должны пересечься. Энтропия (41) в нормальном состоянии (кривая  $n$ ) и в сверхпроводящем состоянии (кривая  $s$ ) также показана на рис. 6. Из-за баланса энтропии при температуре  $T_c$  должно выполняться соотношение  $S_s = S_n$ . Было установлено, что в нормальном состоянии энтропия хорошо описывается зависимостью  $S_n/k_B = 0.03616(T/1K)^{0.335}$  на примесный атом. Для сверхпроводящего состояния  $S_s/k_B = 1.1443 \cdot 10^{-8}(T/1K)^{4.0561}$  на примесный атом. Более резкая температурная зависимость у последней связана с открытием сверхпроводящей щели.

На рис. 7а представлена зависимость энергии конденсации (42) от температуры для двух уровней

легирования  $x = 0.15$  и  $x = 0.20$ . При низких температурах видна тенденция к насыщению зависимости  $E_{cond}(T)$ . При этом в передопированной области энергия конденсации уменьшается с ростом  $x$ . Когда температура увеличивается, приближаясь к  $T_c(x)$ ,  $E_{cond}$  уменьшается и обращается в нуль при температуре перехода.

В экспериментальных данных энергию конденсации часто определяют как величину  $U_0$ , связанную с разностью энтропии в нормальном и сверхпроводящем состояниях (см., например, [28, 34]):

$$U_0 = \int_0^{T_c} (S_n - S_s) dT. \quad (45)$$

Экспериментальные данные, полученные в работе [34] с помощью выражения (45) для  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ , приведены на рис. 7б. В передопированной области энергия конденсации уменьшается с ростом уровня легирования. Согласно рис. 7б [34], для  $x = 0.15$  экспериментальное среднее значение энергии конденсации составляет примерно 2 Дж/моль и соответствует  $U_0 \approx 1$  мэВ на примесный атом Sr. Теоретические результаты показаны на рис. 7а. Для энергии конденсации при  $x = 0.15$  имеем  $E_{cond} \approx 0.9$  мэВ при низких температурах. Таким образом, имеется согласие между экспериментальными и теоретическими данными.

Поскольку мы также вычисляли энтропию нормального и сверхпроводящего состояний (рис. 6), были проведены расчеты энергии конденсации  $U_0$  по формуле (45). Однако следует отметить, что в (45) проводится интегрирование от нулевой температуры до  $T_c$ . При численном анализе полученного сверхпроводящего состояния существовало ограничение по температуре, связанное с вычислительными возможностями и точностью счета. По этой причине на рис. 6 показаны данные при температурах  $40 \text{ K} < T < T_c$ . Выше мы привели сплайновые выражения для энтропии в нормальном и сверхпроводящем состояниях при  $x = 0.15$  в указанном диапазоне температур. Используя эти выражения и для более низких температур  $T < 40 \text{ K}$ , мы получили оценочное значение для энергии конденсации  $U_0 \approx 0.4$  мэВ на примесный атом. В этом случае согласие с экспериментальным значением  $U_0$  [34] хуже. Тем не менее качественное согласие по порядку величины имеется и здесь.

В работе [34] были также приведены данные и для скачка электронной теплоемкости в  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  при одном уровне легирования  $x = 0.14$ . Экспериментальные результаты показаны

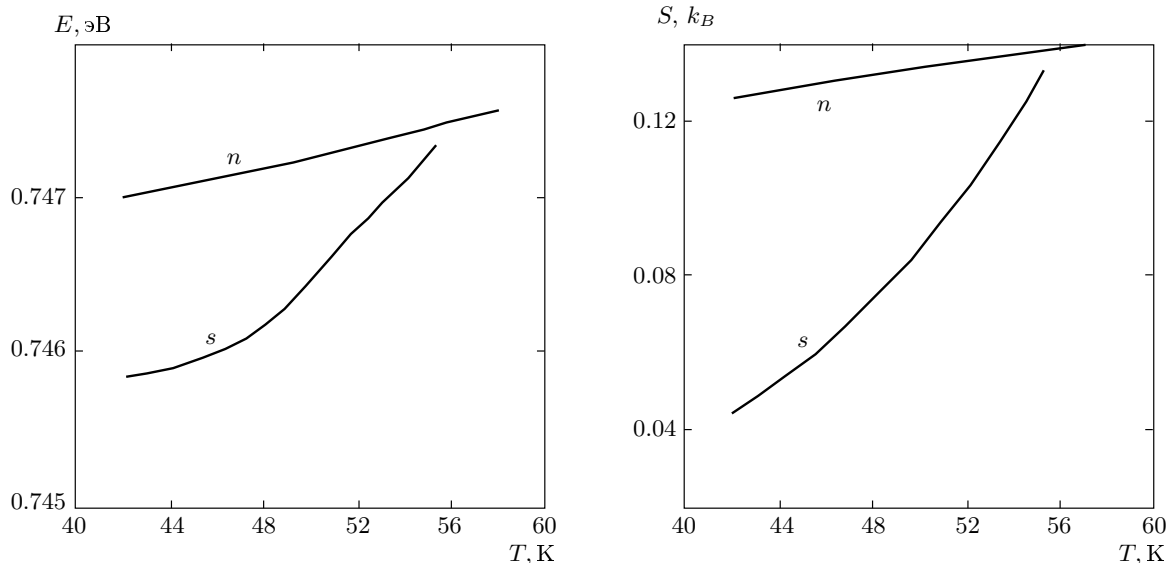


Рис. 6. Температурные зависимости электронной энергии  $E$  и энтропии  $S$  для нормального состояния (кривые  $n$ ) и сверхпроводящего состояния (кривые  $s$ ) при  $x = 0.15$ . Параметры те же, что на рис. 1

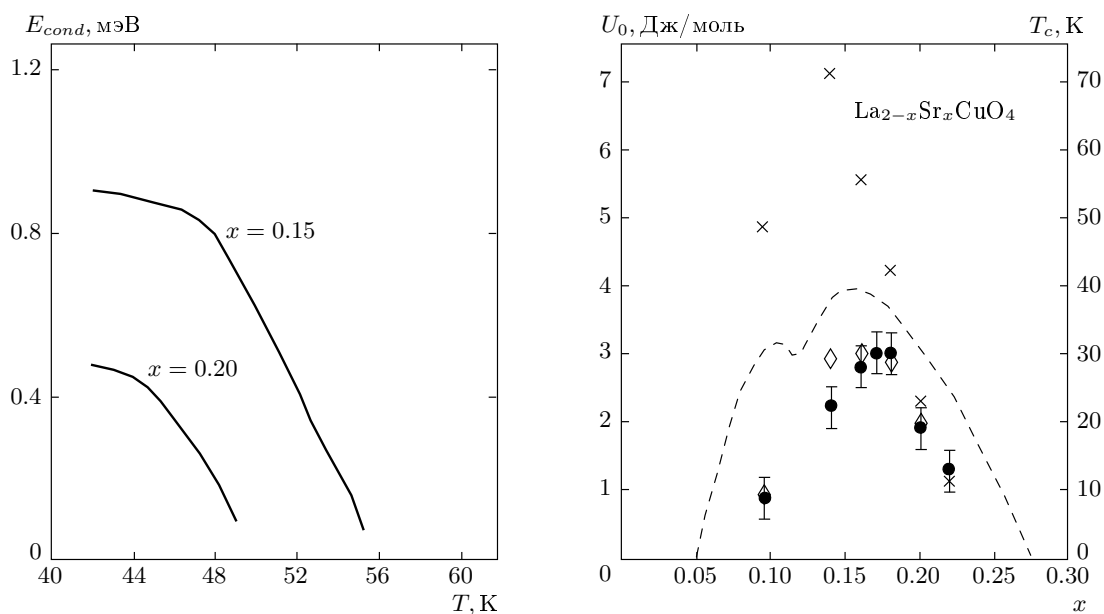


Рис. 7. а) Зависимости энергии конденсации от температуры для двух уровней легирования  $x = 0.15$  и  $x = 0.20$ . б) Энергия конденсации при переходе в сверхпроводящее состояние для  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  [34]. Экспериментальные точки — темные кружки

на рис. 8а. Оценка скачка теплоемкости дает величину  $\Delta C \approx 0.17$  Дж/К·моль. Пересчет концентрации на атом стронция дает величину  $\Delta C_{el} \approx k_B$  на примесный атом. В этом соединении один атом Sr дает один носитель заряда. Поэтому эту величину можно также использовать в единицах скачка

теплоемкости на один вводимый носитель заряда.

Отметим, что для различных представителей из семейства легированных сверхпроводящих купратов скачок электронной теплоемкости  $\Delta C \approx k_B$  на один вводимый носитель заряда является типичным [33].

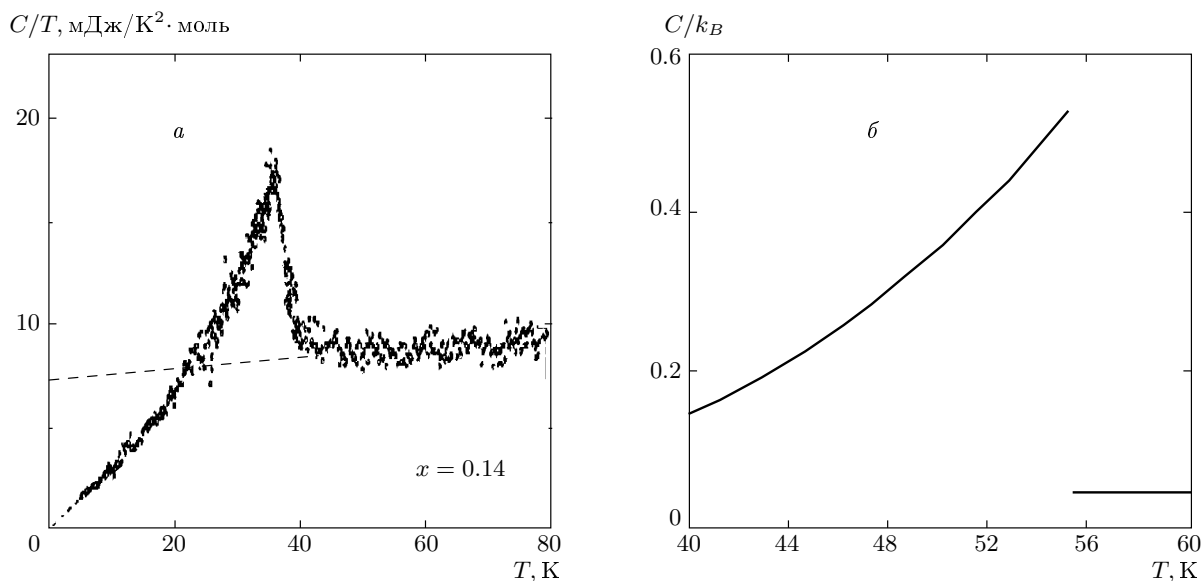


Рис. 8. Экспериментально полученная зависимость  $\gamma = C_{el}/T$  от температуры для  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  при  $x = 0.14$  [34].  
 б) Вычисленный скачок теплоемкости при переходе сверхпроводник – металл для уровня легирования  $x = 0.15$

Температурные зависимости электронной энтропии в нормальном и сверхпроводящем состояниях, показанные на рис. 8б, позволяют вычислить скачок электронной теплоемкости при переходе сверхпроводник – металл. На рис. 8б показана температурная зависимость теплоемкости при уровне легирования  $x = 0.15$ . Виден скачок теплоемкости легированного полупроводника вблизи температуры сверхпроводящего перехода. Этот скачок составляет  $\Delta C_{el} \approx 0.5k_B$  на примесный атом, что находится в согласии с экспериментально наблюдаемым [34].

## 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведено исследование сверхпроводящего состояния в примесном полупроводнике, у которого сверхпроводящая щель открывается в глубоких примесных зонах локальных и распространенных состояний, появляющихся в исходной запрещенной зоне. Для возникновения сверхпроводимости в модели (1) ключевая роль отводится образованию локальных бозон-фермионных смешанных состояний на примесных узлах (2). В случае образования узельных бозон-фермионных состояний с ненулевой амплитудой узельного синглетного бозонного состояния гибридизация в (1) приведет к двухчастичным переходам по примесному ансамблю: локальный бозон на  $j$ -узле  $\rightarrow (-\mathbf{k}, \mathbf{k})$ -пара квазичастиц в связанном состоянии с покоящимся центром инерции  $\rightarrow$

локальный бозон на  $j_1$ -узле и так далее. Такие переходы локальных узельных синглетных бозонов вызовут появление распространенных заряженных бозонов.

При температуре ниже  $T_c(x)$  распространенные заряженные бозоны конденсируются на основной уровень, характеризующийся тем, что все связанные пары входят в волновую функцию основного состояния в одном и том же внутреннем состоянии с покоящимся центром инерции. Волновая функция относительного движения пары  $f^{(+)}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$  одна и та же для всех пар конденсата. Температура, при которой впервые возникает такая неустойчивость, связана с температурой, при которой возникают узельные бозон-фермионные смешанные состояния в легированном полупроводнике.

При переходе металл  $\rightarrow$  сверхпроводник в спектре одночастичных состояний открывается энергетическая щель. Однако в области щели плотность может быть конечной. С ростом температуры и/или уровня легирования амплитуда синглетного бозонного состояния и сверхпроводящая щель уменьшаются, а плотность одночастичных состояний в щели увеличивается. Это приводит к фазовому переходу сверхпроводник  $\rightarrow$  металл.

Проведено исследование волновой функции относительного движения пары частиц в связанном состоянии. Получено количественное согласие между теоретической и экспериментальными зависимостями

ми размера волновой функции связанной пары от уровня легирования для  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  в передопированной области фазовой диаграммы. Установлено, что изменение температуры  $T < T_c$  сказывается только на естественной нормировке волновой функции бозонов, которая нормирована на их концентрацию. В отличие от теории БКШ, предсказывается, что размер волновой функции пары в связанном состоянии не зависит от температуры.

В результате изучения термодинамики сверхпроводящего состояния установлено, что теория сверхпроводимости в легированных невырожденных полупроводниках количественно описывает энергию конденсации и скачок теплоемкости при переходе сверхпроводник – металл в легированных сверхпроводящих купратах. Характерная величина скачка электронной теплоемкости вблизи оптимального допирования составляет  $\Delta C \approx k_B$  на примесный атом, что находится в согласии с экспериментально наблюдаемым для  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ .

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (грант № 04-02-17474а).

## ЛИТЕРАТУРА

1. J. Fink, N. Nucker, E. Pellegrin et al., J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. **66**, 395 (1994).
2. A. Damascelli, Z. Hussain, and Z.-X. Shen, Rev. Mod. Phys. **75**, 473 (2003).
3. Г. М. Элиашберг, *Электронная структура и физические свойства ВТСП. Физические свойства высокотемпературных сверхпроводников*, под ред. Д. М. Гринберг, Мир, Москва (1990), с. 505.
4. E. Dagotto, Rev. Mod. Phys. **66**, 763 (1994).
5. J. M. Tranquada, Physica C **408–410**, 426 (2004).
6. J. Lorenzana and G. Seibold, Phys. Rev. Lett. **82**, 136401 (2002).
7. J. Zaanen, Science **286**, 251 (1999).
8. J. Orenstein and A. J. Millis, Science **288**, 468 (2000).
9. A. A. Abrikosov, Phys. Rev. B **57**, 8656 (1998); Phys. Rev. B **62**, 15156 (2000).
10. R. B. Laughlin, E-print archives, cond-mat/0209269.
11. B. A. Bernevig, R. B. Laughlin, and D. I. Santiago, Phys. Rev. Lett. **91**, 147003 (2003).
12. N. P. Armitage, F. Ronning, D. H. Lu et al., Phys. Rev. Lett. **88**, 257001 (2002).
13. Ю. В. Кораев, УФН **172**, 712 (2002).
14. M. Imada, A. Fujimori, and Y. Tokura, Rev. Mod. Phys. **70**, 1039 (1998).
15. N. M. Plakida, R. Hayn, and J.-L. Richard, Phys. Rev. B **51**, 16599 (1995).
16. А. И. Агафонов, Э. А. Манькин, ЖЭТФ **124**, 394 (2003).
17. F. D. M. Haldane and P. W. Anderson, Phys. Rev. B **13**, 2553 (1976).
18. M. R. Schafroth, J. M. Blatt, and S. T. Butler, Helv. Phys. Acta **30**, 93 (1952) (пер.: Теория сверхпроводимости, ИЛ, Москва (1960), с. 62).
19. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, ГИФМЛ, Москва (1962).
20. Г. М. Элиашберг, ЖЭТФ **34**, 966 (1960).
21. А. И. Агафонов, Э. А. Манькин, ЖЭТФ **129**, 183 (2006).
22. F. Yonezawa and T. Matsubara, Progr. Theor. Phys. **35**, 357 (1966).
23. F. Pistolesi and G. S. Strinati, Phys. Rev. B **49**, 6356 (1994).
24. I. Benfatto, A. Toschi, S. Caprara, and C. Castellani, Phys. Rev. B **66**, 054515 (2002).
25. X. H. Zeng, H. H. Wen, P. H. Yang et al., Europhys. Lett. **64**, 790 (2003).
26. J. E. Hirsch and F. Marsiglio, Phys. Rev. B **62**, 15131 (2000).
27. M. R. Norman, M. Randeria, B. Janko, and J. C. Campuzano, Phys. Rev. B **62**, 14742 (2000).
28. J. L. Tallon, G. V. M. Williams, and J. W. Loram, Physica C **338**, 9 (2000).
29. J. E. Hirsch and F. Marsiglio, Physica C **331**, 150 (2000).
30. M. V. Nevitt, G. W. Grabtree, and T. E. Klippert, Phys. Rev. B **36**, 2398 (1987).
31. A. Junod, A. Bezinse, and J. Muller, Physica C **152**, 50 (1988).
32. M. B. Salamon, S. E. Inderhees, J. P. Rice et al., Phys. Rev. B **38**, 2401 (1988).
33. А. С. Александров, А. Кребс, УФН **152**, 1 (1991).
34. T. Matsuzaki, M. Ido, N. Mamono, and M. Oda, Physica C **388**, 217 (2003).