ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 36 за 2026 г.

ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

В.Д. Лахно

Трансляционно-инвариантная биполяронная теория теплоёмкости слоистых высокотемпературных сверхпроводников

Статья доступна по лицензии
Creative Commons Attribution 4.0 International

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Лахно В.Д. Трансляционно-инвариантная биполяронная теория теплоёмкости слоистых высокотемпературных сверхпроводников // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2026. № 36. 14 с. EDN: **ETHFUL**
https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2026-36

О р д е н а Л е н и н а
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В. Келдыша
Р о с с и й с к о й а к а д е м и и н а у к

В.Д. Лахно

Трансляционно-инвариантная биполяронная теория теплоёмкости слоистых высокотемпературных сверхпроводников

Москва — 2026

Лахно В.Д.

Трансляционно-инвариантная биполяронная теория теплоёмкости слоистых высокотемпературных сверхпроводников

В работе рассмотрена термодинамика двумерного заряженного бозе-газа с щелевым спектром возбуждения трансляционно-инвариантных биполяронов. Получены аналитические выражения для температуры бозе-конденсации T_c, химического потенциала $\mu(T)$, внутренней энергии $U(T)$, теплоёмкости $C_V(T)$ и величины скачка теплоёмкости ΔC_V в критической точке. Проведено количественное согласование модели с классическими калориметрическими данными группы Лорама (Loram et al.1994) для оптимально допированного высокотемпературного сверхпроводника $YBa_2Cu_3O_{6.92}$ ($T_c \approx 91.5$). Показано, что режим сильной энергетической щели ($\omega_0 \gg T_c$, $\omega_0 -$ частота оптического фонона) позволяет с хорошей точностью описать макроскопический λ-пик электронной теплоёмкости при участии лишь малой концентрации ТИ-биполяронов от полной концентрации плотности носителей в плоскостях CuO_2.

Ключевые слова: преформированные пары, бозе-конденсат, псевдощель, ротонный спектр, эксперименты Лорама

Victor Dmitrievich Lakhno

Translation-invariant bipolaron theory of heat capacity of layered high-temperature superconductors

In this paper, the thermodynamics of a two-dimensional charged Bose gas with a gap excitation spectrum of translation-invariant bipolarons is considered. Analytical expressions are obtained for the Bose condensation temperature Tc, the chemical potential $\mu(T)$, the internal energy $U(T)$, the heat capacity $C_V(T)$, and the magnitude of the heat capacity jump ΔC_V at the critical point. A quantitative agreement between the model and the classical calorimetric data of Loram et al. (1994) is carried out for the optimally doped high-temperature superconductor $YBa_2Cu_3O_{6.92}$ ($T_c \approx 91.5$). It is shown that the regime of a strong energy gap ($\omega_0 \gg T_c$, $\omega_0 -$optical phonon frequency) allows one to describe with good accuracy the macroscopic λ-peak of the electron heat capacity with the participation of only a small concentration of TI bipolarons from the total concentration of the carrier density in the CuO_2 planes.

Key words: preformed pairs, bose-condensate, pseudogap, roton spectrum, Loram experiments

1. Введение

Высокотемпературная сверхпроводимость в купратах на протяжении десятилетий остаётся одной из центральных проблем физики конденсированного состояния. Традиционно бозонные модели локальных пар (preformed pairs) неизбежно сталкивались с проблемой: полное спаривание свободных носителей тока привело бы к полному исчезновению поверхности Ферми и подавлению энергии Ферми (E_F) в нормальном металлическом состоянии, что напрямую опровергается прецизионными данными фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES) [1].

Основная задача настоящей работы заключается в теоретическом разрешении концептуального противоречия, разделившего физику ВТСП на сторонников фермиевского и бозонного сценариев фазового перехода. С этой целью мы рассмотрим термодинамические свойства газа носителей тока слоистого сверхпроводника YBCO. Носителями тока в нём являются дырки, локализованные в CuO_2 слоях YBCO, которые с хорошей точностью могут быть рассмотрены как двумерный газ.

В данной работе развита концепция трансляционно-инвариантного (ТИ) биполяронного спаривания как модель анизотропного разреженного двумерного бозе-газа, сосуществующего с массивным фермиевским фоном. Ранее эта модель была эффективно использована автором в случае изотропного 3D газа для объяснения различных свойств ВТСП [2, 3].

Напомним основные положения этой концепции. В ней рассматривается трансляционно-инвариантный биполяронный газ как газ бозе-частиц, способный образовывать бозе-конденсат. Как показано в [2, 3], ТИ-биполярон представляет собой состояние двух электронов (дырок), связанных электрон-фононным взаимодействием (ЭФВ), которое остаётся делокализованным при любом значении константы ЭФВ. Согласно [2, 3], это состояние энергетически более выгодно, чем самозахваченное локализованное двухэлектронное состояние или биполярон Пекара, и радикально отличается от модели локальных пар [4]. Поскольку ТИ-биполяронный газ является газом заряженных бозонов, его бозе-конденсат соответствует сверхпроводящему состоянию. Как следствие, в настоящее время многочисленные экспериментальные и теоретические работы по ВТСП основываются на идее о биполяронах [2, 3]. Важно отметить, что теория ТИ-биполяронов опирается на тот же исходный гамильтониан Фрёлиха, что и теория БКШ [5, 6]. Единственное различие заключается в том, что в теории БКШ электроны взаимодействуют с акустическими фононами, тогда как в теории ТИ-биполяронов – с оптическими, поскольку большинство ВТСП являются ионными кристаллами. В случае допированного ВТСП почти все носители тока, как и в нормальном металле, не спарены, и только их небольшая часть (несколько процентов) находится в спаренном ТИ-биполяронном состоянии в узком энергетическом слое: $\left[E_F + E_{bp}/2 - \delta E,\ E_F + E_{bp}/2\ + \delta E,\right]$,

$\delta E \to 0$, E_{bp} – энергия ТИ-биполярона. Конденсация биполяронного газа приводит к бесконечной плотности состояний в этом слое. Таким образом, энергетическая поверхность ТИ-биполяронов повторяет в k-пространстве поверхность Ферми, в точности повторяя анизотропию фермиевского энергетического листа. Как будет показано ниже (§4), это приводит к наблюдаемой в эксперименте угловой зависимости СП щели и псевдощели в слоистых ВТСП.

2. Спектр трансляционно-инвариантного биполярона

Трансляционно-инвариантные ТИ-биполяроны в ВТСП материалах образуются ниже температуры псевдощелевой фазы. Их спектр, согласно [2, 3, 6], имеет вид:

$$E_k(\vec{\mathcal{P}}) = \begin{cases} E_{bp}(\vec{\mathcal{P}}),\ k = 0 \\ E_{bp}(\vec{\mathcal{P}}) + \omega_0(\vec{\mathcal{P}}, \vec{k}) + k^2/2M - \vec{k}\vec{\mathcal{P}}/M_{bp}\,, k \neq 0 \end{cases}, \tag{1}$$

где $\vec{\mathcal{P}}$ – полный импульс ТИ-биполярона с массой M_{bp} и энергией основного состояния E_{bp}, ω_0 – фононная частота, $M = 2m$, где m – эффективная масса зонного электрона (дырки), k соответствует волновым векторам возбуждённых состояний ТИ-биполярона. Использование спектра (1) лежит в основе биполяронной теории сверхпроводимости, результаты которой суммированы в книге [3].

Для описания термодинамических свойств ВТСП в (1) следует положить $\vec{\mathcal{P}}$ равным нулю. В результате для спектра получим

$$E_k(0) = E_k = \omega_0 + k^2/2M, \quad E_0(0) = 0. \tag{2}$$

В (2) энергия отсчитывается от энергии основного состояния ТИ-биполярона E_{bp}. Спектр (2) был впервые введён в работе Ландау [7] для описания ротонных возбуждений в теории сверхпроводимости. Ниже мы используем спектр (2) для описания термодинамики слоистых ВТСП, в которых СП реализуется в 2d CuO_2 плоскостях.

3. Термодинамика 2d-газа ТИ-биполяронов

а) <u>температура конденсации T_c</u>

Мы рассматриваем идеальный двумерный бозе-газ ТИ-биполяронов со спектром (2) для моделирования бозе-конденсата в 2d плоскости слоистого ВТСП. Для плоскости с анизотропным спектром масс (YBCO) под величиной M будем понимать:

$$M = \sqrt{M_a M_b} \tag{3}$$

– эффективную массу в главных осях (YBCO).

Найдём условия, при которых рассматриваемый бозе-газ испытывает конденсацию. При температуре ниже температуры бозе-конденсации химический потенциал μ становится равным энергии основного состояния, то есть $\mu = 0$ (отсчет энергии осуществляется от энергии биполярона E_{bp}). Положим $n = n_0 + n'$, где n_0 – концентрация частиц в бозе-конденсате на единицу поверхности слоя, n' – концентрация надконденсатных частиц, n – полная концентрация ТИ-биполяронов в слое. При $T = T_c$ величина $n_0 = 0$. Таким образом, уравнение для определения T_c имеет вид

$$N = \int_{\omega_0}^{\infty} \frac{g(E)dE}{e^{E/T_c - 1}}, \tag{4}$$

где: $g(E) = MS/2\pi\hbar^2$ – плотность состояний, которая в двумерном случае не зависит от E, S – площадь поверхности ВТСП слоя, $N = n \cdot S$ – полное число частиц. В результате из (3), (4) получим

$$n = -\frac{MT_c}{2\pi\hbar^2} ln\left(1 - e^{-\omega_0/T_c}\right). \tag{5}$$

Выразим это соотношение через характерную температуру $T_0 = 2\pi\hbar^2\, n/M$:

$$\frac{T_0}{T_c} = -ln\left(1 - e^{-\omega_0/T_c}\right). \tag{6}$$

Это уравнение может быть представлено в симметричном виде

$$e^{-T_o/T_c} + e^{-\omega_0/T_c} = 1. \tag{7}$$

При $\omega_0 = T_0$ уравнение (7) имеет точное решение $T_c = T_0/ln2$. Соответственно, при малой щели $\omega_0 \ll T_0$ из (7) получим $T_c \approx T_0/ln(T_0/\omega_0)$ и при большой щели $\omega_0 \gg T_0$, $T_c \approx \omega_0/ln(\omega_0/T_0)$.

б) <u>химический потенциал</u>

Полная поверхностная плотность частиц n при $T > T_c$ выражается через интеграл по возбуждённым состояниям с учётом химического потенциала μ:

$$n = -\frac{M}{2\pi\hbar^2} \int_{\omega_0}^{\infty} \frac{dE}{e^{(E-\mu)/T} - 1}, \tag{8}$$

используя характерную температуру $T_0 = 2\pi\hbar^2\, n/M$, перепишем это уравнение в виде

$$\frac{T_0}{T} = -ln\left(1 - e^{-(\omega_0 - \mu)/T}\right), \tag{9}$$

откуда следует

$$\mu(T) = \omega_0 + Tln\left(1 - e^{-T_0/T}\right), \quad T > T_c. \tag{10}$$

При $\mu(T_c) = 0$ из (10) получаем уравнение для T_c вида (7).

В области высоких температур ($T \gg T_0,\ \omega_0$) из (10) получим

$$\mu(T) \approx \omega_0 - T ln\left(\frac{T}{T_0}\right). \tag{11}$$

Это соответствует классическому пределу (газу Больцмана) с поправкой на энергетический сдвиг ω_0.

Ниже критической температуры ($T < T_c$), как и в классическом бозе-конденсате, химический потенциал строго фиксируется на уровне основного состояния энергии ТИ-биполярона:

$$\mu(T) = 0, \quad T \leq T_c. \tag{12}$$

в) <u>энергия и теплоёмкость</u>

Для вычисления энергии и теплоёмкости разобьём задачу на две области: ниже критической температуры ($T < T_c$ где $\mu = 0$) и выше ($T > T_c$, где $\mu(T)$ определяется (10)).

Энергия системы $U(T)$ определяется интегрированием распределения Бозе-Эйнштейна с весом E:

$$U(T) = \int_{\omega_0}^{\infty} E \frac{gdE}{e^{(E-\mu)/T}-1}. \tag{13}$$

В результате получим

$$U(T) = gT^2 \int_{x_{min}}^{\infty} \frac{xdx}{e^x-1} + gT\mu \int_{x_{min}}^{\infty} \frac{dx}{e^x-1}, \tag{14}$$

где

$$x_{min} = (\omega_0 - \mu)/T,$$

второй интеграл здесь равен числу частиц в возбуждённых состояниях n'.

В области $T < T_c$ предел интегрирования равен: $x_{min} = \omega_0/T$ и $\mu = 0$, поэтому второе слагаемое обнуляется:

$$U(T) = gT^2 \int_{x_{min}}^{\infty} \frac{xdx}{e^x-1}. \tag{15}$$

В области $T > T_c$ все частицы находятся в надконденсатном состоянии ($n = n'$). Из уравнения (9) следует выражение для нижнего предела в (14): $x_{min} = -ln(1 - \exp(-T_0/T))$. В результате для $U(T)$ из (14) получим:

$$U(T) = gT^2 \int_{-ln(1-\exp(-T_0/T)).}^{\infty} \frac{xdx}{e^x-1} + N\mu(T). \tag{16}$$

Теплоёмкость находится как производная от энергии по температуре: $C_V = (\partial U/T)_V$. Из (15), (16) при $T \leq T_c$ получим

$$C_V = \frac{2NT}{T_0} \int_{\omega_0/T_c}^{\infty} \frac{xdx}{e^x-1} + N \frac{\omega_0^2}{T_0 T} \frac{1}{e^{\omega_0/T}-1}, \quad T \leq T_c. \tag{17}$$

Соответственно, при $T > T_c$ получим

$$C_V = g\int_{\omega_0}^{\infty} E\,\frac{e^{(E-\mu)/T}\left(\frac{E-\mu}{T^2}-\frac{1}{T}\cdot\frac{\partial\mu}{\partial T}\right)}{\left(e^{(E-\mu)/T}-1\right)^2}dE. \tag{18}$$

Найдём $\partial\mu/\partial T$ из точного выражения (10) для $\mu(T)$:

$$\frac{\partial\mu}{\partial T} = \frac{\mu-\omega_0}{T} - \frac{T_0}{T}\cdot\frac{1}{e^{T_0/T}-1}. \tag{19}$$

В точке T_c^+ (со стороны высоких температур) $\mu \to 0$, а $e^{-T_0/T_c} = 1 - e^{-\omega_0/T_c}$. В результате значение производной на пороге равно:

$$\left.\frac{\partial\mu}{\partial T}\right|_{T_c^+} = -\frac{\omega_0}{T_c} - \frac{T_0}{T_c}\left(e^{\omega_0/T_c}-1\right). \tag{20}$$

После подстановки (20) в интеграл для $C_V(T_c^+)$ и взятия по частям значение теплоёмкости справа от точки перехода принимает вид

$$C_V(T_c^+) = C_V(T_c^-) - N\frac{\omega_0^2}{T_0T_c\left(e^{\omega_0/T_c}-1\right)}\cdot\left[1+\frac{T_0}{\omega_0}\left(e^{\omega_0/T_c}-1\right)\right]^2. \tag{21}$$

Скачок теплоёмкости определяется как разность значений при приближении к критической точке слева и справа $\Delta C_V = C_V(T_c^-) - C_V(T_c^+)$. Из (21) следует, что

$$\Delta C_V = N\frac{\omega_0^2}{T_0T_c\left(e^{\omega_0/T_c}-1\right)}\left[1+\frac{T_0}{\omega_0}\left(e^{\omega_0/T_c}-1\right)\right]^2. \tag{22}$$

Используя тождество для критической точки $e^{\omega_0/T_c} - 1 = 1/\left(e^{T_0/T_c}-1\right)$, формулу (22) можно упростить, сделав её симметричной:

$$\Delta C_V = N\frac{\omega_0^2}{T_0T_c}\left(e^{T_0/T_c}-1\right)\left(1+\frac{T_0/\omega_0}{e^{T_0/T_c}-1}\right)^2.$$

После возведения в квадрат окончательно получим:

$$\Delta C_V = N\frac{\left(\omega_0\left(e^{T_0/T_c}-1\right)+T_0\right)^2}{T_0T_c\left(e^{T_0/T_c}-1\right)}.$$

Рассмотрим предельные случаи. При $\omega_0 \to 0$ температура перехода $T_c \to 0$. Бозе-конденсация в чисто двумерном случае в отсутствие щели невозможна (теорема Мермина-Вагнера [8]). Скачок теплоёмкости в этом случае стремится к нулю.

Для точного решения $\omega_0 = T_c$: $T_c = T_0/ln2$, $e^{T_0/T_c} = 2$. Подставляя это значение для ΔC_V, получим $\Delta C_V \approx 2{,}77N$.

г) <u>число возбуждённых частиц</u>

Ниже критической температуры химический потенциал равен нулю и плотность возбуждённых частиц $n' = N'/S$ $N = N' + N_0$, где N_0 – число частиц в конденсате, N' – над конденсатом, определяется интегрированием по спектру с щелью ω_0:

$$n'(T) = \frac{M}{2\pi\hbar^2}\int_{\omega_0}^{\infty}\frac{dE}{e^{E/T}-1}, T \le T_c,$$

или

$$\frac{N'}{N} = -\frac{T}{T_0} ln(1 - \omega_0/T), \;\; T \leq T_c \,,$$

соответственно:

$$\frac{N'}{N} = \frac{T}{T_c} \cdot \frac{ln\left(1-e^{-\omega_0/T}\right)}{ln\left(1-e^{-\omega_0/T_c}\right)}, \;\; T \leq T_c,$$

отсюда следует, что при $\omega_0 \ll T_c$

$$\frac{N_0}{N} \approx 1 - \frac{T}{T_c} \frac{ln(T/\omega_0)}{ln(T_c/\omega_0)},$$

при стремлении щели к нулю ($\omega_0 \to 0$), критическая температура $T_c \to 0$, и в соответствии с теоремой Мермина-Вагнера конденсат в системе исчезает при любой конечной температуре.

4. Сравнение с экспериментом

Проведём сравнение полученных результатов с классическими экспериментами Лорама [9]–[11] по измерению скачка теплоёмкости в оптимально допированном кристалле $YBa_2Cu_3O_7$. Сильной стороной этих экспериментов является измерение вклада в теплоёмкость именно спаренных носителей тока. В них удалось очистить полную теплоёмкость от фононного вклада и вклада неспаренных электронов. Для сравнения теории с экспериментом нами были выбраны следующие значения параметров: $M = 4m_0$, где m_0 – масса свободного электрона, $\omega_0 \approx 392\,K$ (или 33,8 мэВ), $n_{3D} \approx 4{,}6 \cdot 10^{19}$ см$^{-3}$ (что соответствует 0,008 бозонов на ячейку). Это значение составляет около 5% от полной измеряемой концентрации дырок в YBCO ($\sim 10^{21}$см$^{-3}$) и соответствует концентрации ТИ-биполяронов в плоскости $\approx 2{,}7 \cdot 10^{12}$см$^{-2}$.

На рис. 1 приведено сравнение теоретической и экспериментальной температурных зависимостей для концентраций близких к оптимально допированному кристаллу $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ с $x \approx 0{,}9$. Отметим, что ранее в работе [12], в которой эффективная масса 3D случая бралась не масса (3), а эффективная масса $M = \sqrt[3]{M_a M_b M_c}$, было получено для концентрации ТИ-биполяронов близкое значение $n_{3D} \approx 1{,}4 \cdot 10^{19}$ см$^{-3}$

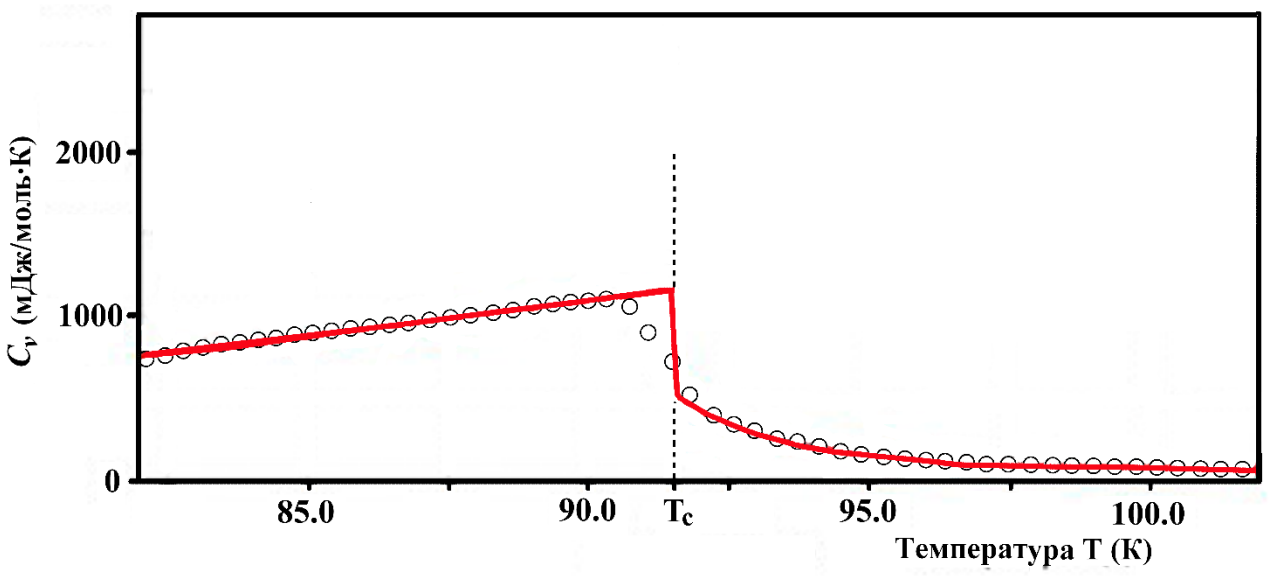

Рис. 1. Сравнение теории (красная линия) с экспериментом [9] (кружки)

Столь хорошее согласие с экспериментом, представленное на рисунке, может вызвать удивление в связи с изотропной величиной энергии возбуждённого состояния ТИ-биполярона ω_0. Казалось бы, это противоречит эксперименту по измерению угловой зависимости щели. В действительности угловая зависимость щели в YBCO следует непосредственно[AC1] из рассмотренной модели. Дело в том, что поскольку энергия возбуждений ТИ-биполярона $E_k = E_{bp} + \omega_0$ не зависит от k, то в плоскости k_x, k_y эта величина является окружностью (см. рис. 2). Если считать, что ТИ-биполяроны в YBCO зарождаются в нодальном направлении, то условием их образования является выполнение равенства $E_{k_F} = E_F$, где E_F – значение энергии Ферми в плоскости (k_x, k_y), которому соответствует $k = k_F$. Что касается других точек плоскости, то в них возникает щель Δ_k, равная: $\Delta_k = E_k - E_F$. Использование реальной арочной структуры E_F в этой плоскости для YBCO с очень высокой точностью (примерно 1,5%) даёт

$$\Delta_k = \Delta_0 \left| cosk_x a - cosk_y a \right|$$

с $\Delta_0 \approx 20 \div 25$мэВ, то есть экспериментально наблюдаемую зависимость щели от волнового вектора k.

Отметим, что определяемая таким образом СП щель полностью соответствует представлению о псевдощели, которая, согласно экспериментальным наблюдениям, сохраняет свой вид и при $T > T_c$, то есть в псевдощелевой фазе, когда сверхпроводимость уже отсутствует. Такое определение СП щели полностью соответствует определению щели по Боголюбову-де Жену, согласно которому спектр элементарных возбуждений $\varepsilon(k)$ в СП имеет вид [13]

$$E(\vec{k}) = \pm\sqrt{\xi^2(\vec{k}) + |\Delta(k)|^2},$$

где $\xi(\vec{k}) = \varepsilon(\vec{k}) - \mu$-энергия электрона в нормальном (несверхпроводящем) состоянии, отсчитанная от химического потенциала μ (энергия Ферми). Для окружности радиусом $k = k_F$ по определению $\xi_{k_F} = 0$ и $E(\vec{k}) = \Delta(\vec{k})$.

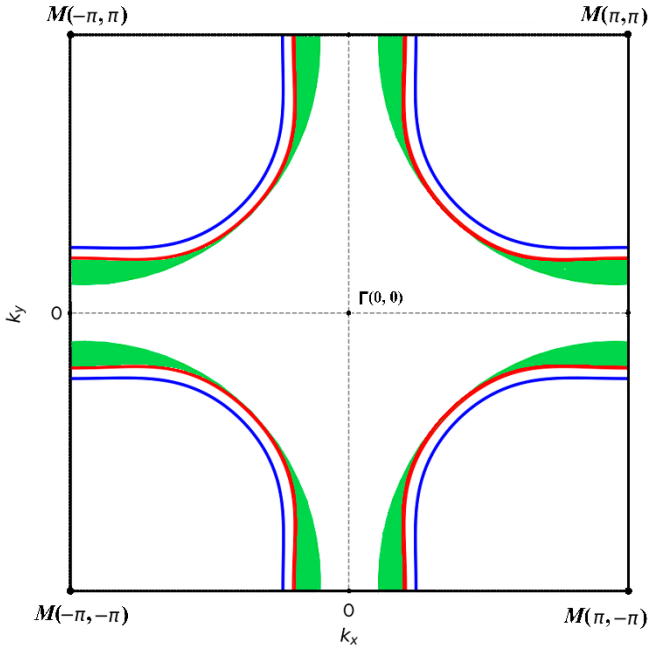

Рис. 2. На рисунке показано открытие щели YBCO (закрашена зелёным). Синим-связывающий лист, красным – антисвязывающий лист

В рассматриваемой нами области пика $T < T_c$ (82-91,5) К имеет место экспоненциальная тепловая активация. В этой фазе теплоёмкость нарастает с ростом температуры по закону, близкому к $\sim e^{-\omega_0/T}$. При фиксированном химическом потенциале $\mu = 0$ тепловая энергия тратится на переброс бозонов из макрозаселённого основного состояния (конденсата) в возбуждённые состояния через щель $\omega_0 = 392\ K$ (33,8 мэВ). Точное совпадение наклона красной линии на рис. 1 и экспериментальных кружков подтверждает корректность этого значения. В критической точке количество бозонов в конденсате N_0 обращается в ноль. Идеализированный расчёт даёт обрыв теплоёмкости при $T = T_c$, который в реальном эксперименте сглажен в интервале $\pm 1K$ за счёт пространственных флуктуаций фазы параметра порядка и незначительной неоднородности распределения кислорода по образцу YBCO.

В области $T > T_c$ (91,5K-102K) сразу над T_c теплоёмкость бозонной подсистемы падает до фонового уровня $NK_B \approx 66{,}5$ мДж/моль·К. Экспериментальный «хвост» затухает чуть медленнее теории, поскольку ТИ-биполяроны вследствие большой щели ω_0 продолжают существовать в виде ближнего порядка (флуктуационных пар) вплоть до температуры псевдощели T^*.

Это подтверждает гипотезу, что псевдощелевая фаза является областью зарождения преформированных связанных пар.

5. Обсуждение результатов

Эксперименты Лорама [9]–[11] в своё время однозначно интерпретировались в пользу отсутствия связанных пар при $T > T_c$. Это связано с тем, что температурная зависимость теплоёмкости при $T > T_c$ практически совпадает с зоммерфельдовской теплоёмкостью металла, в котором никаких связанных электронных пар нет. Полученные нами результаты опровергают это утверждение. Действительно, в рассматриваемой нами ТИ-биполяронной модели ТИ-биполяроны остаются стабильными при $T > T_c$ и, тем не менее, практически точно соответствующая им температурная зависимость теплоёмкости совпадает, согласно рис. 1, с фермионной теплоёмкостью. Это снимает возражение против существования спаренных состояний при $T > T_c$.

Отметим, что полученная частота $\omega_0 = 33{,}8$ мэВ в фазе оптимального допирования ($YBa_2Cu_3O_{6,92\text{-}6,95}$, $T_c = 92 - 93{,}5$ K) попадает в область пика внутриплоскостных колебаний атомов кислорода O(2), O(3) в проводящих слоях CuO_2. Они представляют собой синфазные или противофазные смещения атомов кислорода вдоль кристаллографических осей плоскости ab. Эта оптическая мода сильно связана с плоскостным дырочным газом электрон-фононным взаимодействием. При переходе в сверхпроводящее состояние она испытывает аномальное смягчение и асимметрию профиля (мода Фано) именно в районе 33-34 мэВ.

В YBCO пик поглощения на этой частоте попадает в область СП-щели, максимум которой $2\Delta_0 \approx 40 - 50$ мэВ лежит выше этой частоты, поэтому она отлично видна на эксперименте в СП-фазе.

Иногда под псевдощелью понимается величина энергии биполярона $\Delta_{pG} = |E_{bp}|$ или энергия температурного развала биполярона на отдельные поляронные состояния: $\delta|E_{bp}| = |E_{bp} - 2E_p|$, где E_p – энергия поляронного состояния. Такая щель, естественно, не обладает никакой угловой зависимостью, поскольку является величиной, определяющей диссоциацию биполярона. В оптических экспериментах образование биполяронов при открытии псевдощелевой фазы сопровождается появлением пика поглощения в инфракрасном диапазоне: $\Delta_{pG} \sim (0{,}06 \div 0{,}2)$ эВ и слабого пика в диапазоне $(0{,}01 \div 0{,}02)$ эВ, наличие которого можно приписать величине $\delta|E_{bp}|$ [14].

Сравнение с экспериментом доказывает, что в бозе-конденсации участвует лишь 5% от общего числа дырок в плоскостях CuO_2 ($x_B \approx 0.008$ пар на ячейку при полном допировании $D \sim 0.16$). Таким образом малое число ТИ-биполяронов полностью обеспечивает необходимую амплитуду макроскопической аномалии.

В работе мы рассмотрели термодинамику ВТСП вблизи оптимального допирования. В недодопированных ВТСП происходят кардинальные изменения описанной картины. Роль Ферми-поверхности при уменьшении допирования

убывает, СП-щель уходит вглубь под Ферми-поверхность, которая при сильном недодопировании исчезает, оставляя величину псевдощели неизменной, однако экспериментально её можно наблюдать только в диэлектрической фазе вблизи $k = 0$ (см. Рис. 3). Наличие псевдощели в диэлектрической фазе обусловлено существованием в ней ТИ-биполяронов, концентрация которых при этом столь мала, что недостаточна для образования бозе-конденсата.

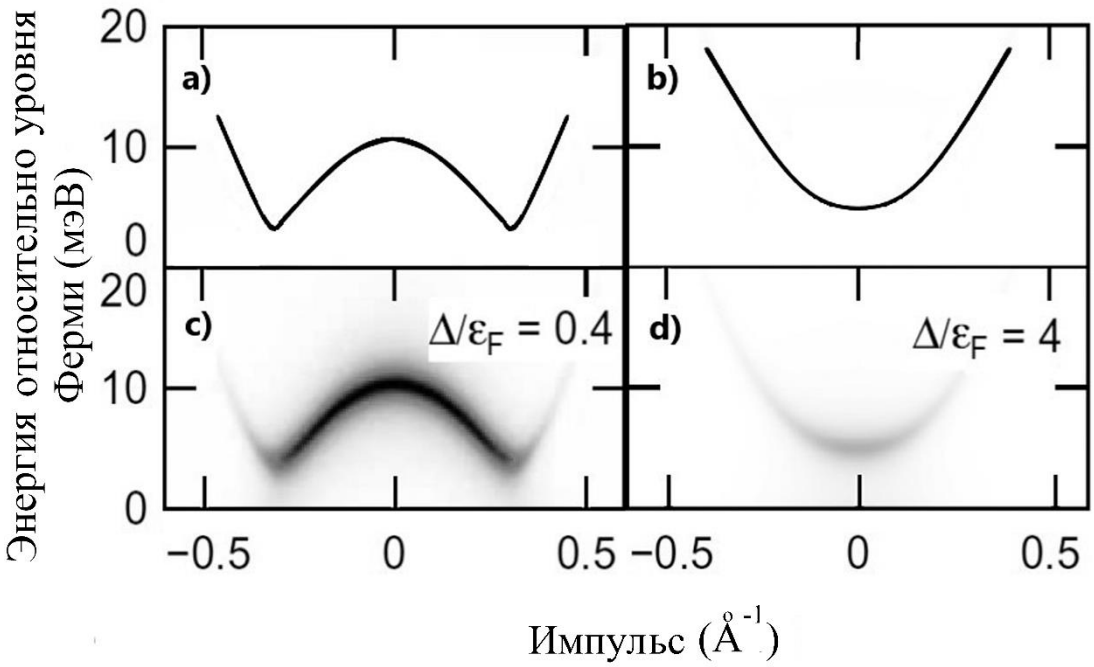

Рис. 3. Кроссовер из БКШ в БЭК: a) теория [16], b) теория [3], c) и d) ARPES эксперимент [15] для железосодержащего сверхпроводника $FeSe_{1-x}S_x$. Дано сравнение теоретического спектра ТИ-биполярона (правый верхний угол), изображенного на рис. 3 (формула (2)) с экспериментальным (правый нижний угол) [15] железосодержащего СП $FeSe_{1-x}S_x$. Показано, что при низкой концентрации носителей тока щель образуется при k=0 (режим бозе-конденсата). При высокой концентрации носителей тока (левый верхний угол, теория [16]) реализуется БКШ режим (левый нижний угол эксперимент [15]) и щель образуется при фермиевском импульсе.

Это подтверждает двухщелевую модель купратов, в которой псевдощель – это высокоэнегетический масштаб, отражающий энергию связи ТИ-биполяронов, а низкоэнергетическая СП-щель открывается только при образовании их бозе-конденсата на фермиевских дугах в узловых направлениях.

В заключение отметим, что наше рассмотрение было основано на использовании однозонной модели. В YBCO и других слоистых ВТСП ситуация несколько сложнее в силу того, что в элементарной ячейке YBCO имеется не одна, а две CuO_2 СП-плоскости, параметры которых несколько различаются (рис. 2). Это приводит к тому, что рассматриваемый подход можно обобщить на

двухзонный случай, суммируя вклады от каждой плоскости независимо. Это приводит лишь к небольшим изменениям в полученных результатах.

Библиографический список

[1] Damascelli A., Hussain Z., Shen Z.-X. Angle-resolved photoemission studies of the cuprate, superconductors // Rev. Mod. Phys. 2003. 75. 473. DOI: https://doi.org/10.1103/RevModPhys.75.473

[2] Lakhno V.D. Translational-invariant bipolarons and superconductivity // Condensed Matter. 2020. 5. 30. DOI: https://doi.org/10.3390/condmat5020030

[3] Lakhno V.D. High Temperature Superconductivity. Bipolaron Mechanism // De Gruyter. Berlin. 2022. DOI: https://doi.org/10.1515/9783110786668

[4] Solovjov A.G., Rogacki K. Local pairs in high-temperature superconductors: The concept of pseudogap // Low Temp. Phys. 2023. 49. 345–363. DOI: https://doi.org/10.1063/10.0017238

[5] Bardeen J., Cooper L.N. Schrieffer J.R. Theory of superconductivity // Phys. Rev. 1957. 108. 1175. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRev.108.1175

[6] Lakhno V.D. Translation-invariant bipolarons and charge density waves in hightemperature superconductors // Frontiers in Physics. 2021. 9. Art. 662926. DOI: https://doi.org/10.3389/fphy.2021.662926

[7] Landau L.D. The theory of superfluidity of helium II // J. Phys. USSR. 1941. 5. 71. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRev.60.356

[8] Mermin N.D., Wagner H. Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models // Physical Review Letters. 1966. 17. (22). 1133–1136.
DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.17.1133

[9] Loram J.W., Mirza K.A., Cooper J.R., Liang W.Y., Wade J.M. Electronic specific heat of $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ from 1.8 to 300 K. // J Supercond. 1994. 7. 243–249. https://doi.org/10.1007/BF00730405

[10] Loram J.W., Mirza K.A., Cooper J.R., Liang W.Y. Electronic specific heat of $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ from 1.8 to 300 K // Physical Review Letters. 1993. 71. (11). 1740–1743. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.71.1740

[11] Loram J. W., Luo J., Cooper J.R., Liang W.Y., Tallon J.L. Evidence for the pseudogap from electronic specific heat // Journal of Physics and Chemistry of Solids. 2001. 62. Issues 1–2. 59-64. DOI: https://doi.org/10.1016/S0022-3697(00)00101-3

[12] Lakhno V.D. Superconducting Properties of 3D Low-density translation-invariant bipolaron, gas // Adv. Cond. Matt. Phys. 2018. 2018. ID1380986. DOI: https://doi.org/10.1155/2018/1380986

[13] Jian-Xin Zhu, Lecture Notes in Physics, Springer International Publishing Switzerland. 2016. ISBN 978-3-319-31312-2. DOI: 10.1007/978-3-319-31314-6

[14] Moob S.J., Lee Y.S., Schafgans A.A. et al. Infrared pseudogap in cuprate and pnictide high-temperature superconductors // Phys. Rev. B. 2014. 90. 014503. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevB.90.014503

[15] Hashimoto T. et al. Bose-Einstein condensation superconductivity induced by disappearance of the nematic state // Sci. Adv. 2020. 6: eabb 9052. DOI: 10.1126/sciadv.abb9052

[16] Bussmann-Holder A., Keller H. Evidence for polaron Formation in High-Temperature Superconducting Cuprates: Experiment and Theory // J. Supercond Nov Magn. 2009. 22. 123-129.
DOI: https://doi.org/10.1007/s10948-008-0382-4

Оглавление

1. Введение 3
2. Спектр трансляционно-инвариантного биполярона 4
3. Термодинамика 2d-газа ТИ-биполяронов..... 4
4. Сравнение с экспериментом 8
5. Обсуждение результатов..... 11
Библиографический список..... 13