

Эффективный гамильтониан и свойства нормальной и сверхпроводящей фаз купратов n -типа

М. М. Коршунов¹⁾, С. Г. Овчинников, А. В. Шерман[†]

Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения РАН, 660036 Красноярск, Россия

[†]Institute of Physics, University of Tartu, 51014 Tartu, Estonia

Поступила в редакцию 11 марта 2004 г.

После переработки 24 мая 2004 г.

Из микроскопической многозонной p - d -модели, параметры которой определены из сопоставления с ARPES данными для недопированного Nd_2CuO_4 , в режиме сильных электронных корреляций выведен низкоэнергетический эффективный гамильтониан t - J^* -модели, в котором перескоки и обмен медленно спадают с расстоянием и учитываются вплоть до пятой координационной сферы. С учетом ближнего магнитного порядка рассчитана зависящая от концентрации допирования зонная структура квазичастиц и построена теория сверхпроводимости со спин-флуктуационным механизмом спаривания. Предполагая, что параметры модели не зависят от допирования, и не вводя подгоночных параметров, мы получили количественное согласие с экспериментально наблюдаемыми свойствами нормальной и сверхпроводящей фаз.

PACS: 74.20.Mn, 74.25.-q, 74.72.Jt

1. Существует два типа высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) – p -тип, то есть дырочно допированные купраты ($\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ – LSCO и др.) и n -тип, то есть электронно допированные купраты ($\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ – NCCO, $\text{Pr}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ – PCCO, и др.). Несмотря на наличие базового для ВТСП элемента – CuO_2 -плоскости – свойства этих двух типов купратов существенно отличаются (см. например, [1, 2]). В настоящей работе построена количественная теория, описывающая зависимость свойств нормальной фазы и критической температуры $T_c(x)$ от концентрации электронов x в сверхпроводниках n -типа. Теория не содержит подгоночных параметров: эффективный гамильтониан в виде t - J^* -модели получен в режиме сильных электронных корреляций (СЭК) из микроскопической многозонной p - d -модели, параметры которой определены из экспериментальных данных для недопированного Nd_2CuO_4 . Спин-флуктуационный механизм сверхпроводимости в t - J -модели давно известен, однако для получения количественного согласия для $T_c(x)$ и свойств нормальной фазы оказались принципиально важны такие детали эффективного гамильтониана, как медленное спадание межатомных перескоков и обменного взаимодействия с расстоянием (учитывались пять координационных сфер) и наличие слабых коррелированных перескоков (трехцентровые взаимодействия, важность которых для определения T_c

ранее была отмечена в работе [3]). Принципиальным оказался также учет ближнего антиферромагнитного порядка для определения закона дисперсии квазичастиц, приведший к появлению дополнительных особенностей Ван-Хова. Только одновременный учет всех этих деталей позволил получить согласие с экспериментальными данными для электронной структуры нормальной фазы и $T_c(x)$.

Что касается симметрии параметра порядка, то последние экспериментальные данные (фазочувствительные эксперименты [4] и исследование сопротивления в магнитных полях [5] в NCCO, измерения глубины проникновения в PCCO [6, 7], фотоэмиссионная спектроскопия с угловым разрешением ARPES [8]) указывают на d -тип параметра порядка (вероятнее всего – $d_{x^2-y^2}$). Поэтому далее мы будем исследовать сверхпроводящее состояние только с $d_{x^2-y^2}$ -типом симметрии.

2. Адекватной моделью для описания ВТСП купратов является многозонная p - d -модель [9]. Исследование этой модели с учетом сильных электронных корреляций в рамках обобщенного метода сильной связи позволило добиться количественного согласия с ARPES данными для недопированного LSCO [10–12], описать пиннинг $\mu(x)$ в p -типе и его отсутствие в n -типе [13], а также получить непрямую оптическую щель в NCCO [14]. Для рассмотрения СП фазы в работе [15] с помощью операторной теории возмущений был получен эффективный низкоэнергетический гамильтониан для многозонной p - d -модели.

¹⁾e-mail: mkor@iph.krasn.ru

Эффективный гамильтониан асимметричен по отношению к электронному и дырочному допированию – для систем n -типа имеет место обычная t - J -модель, в то время как для систем p -типа со сложной зонной структурой на потолке валентной зоны адекватной моделью является эффективная синглет-триплетная модель. В [3] было показано, что учет трехцентровых слагаемых в эффективном гамильтониане играет очень существенную роль при рассмотрении СП фазы. Учитывая вышесказанное, выпишем эффективный гамильтониан для сверхпроводников n -типа с учетом трехцентровых слагаемых, используя операторы Хаббарда:

$$H_{t-J*} = H_{t-J} + H_3,$$

$$H_{t-J} = \sum_{f,\sigma} (\varepsilon_1 - \mu) X_f^{\sigma\sigma} + \sum_{\langle f,g \rangle, \sigma} t_{fg}^{00} X_f^{\sigma 0} X_g^{0\sigma} + \sum_{\langle f,g \rangle} J_{fg} \left(\mathbf{S}_f \mathbf{S}_g - \frac{1}{4} n_f n_g \right), \quad (1)$$

$$H_3 = \sum_{\langle f,g,m \rangle, \sigma} \frac{t_{fm}^{0S} t_{mg}^{0S}}{E_{ct}} (X_f^{\sigma 0} X_m^{\bar{\sigma}\sigma} X_g^{0\bar{\sigma}} - X_f^{\sigma 0} X_m^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} X_g^{0\sigma}).$$

Здесь $J_{fg} = 2 (t_{fg}^{0S})^2 / E_{ct}$ – обменный интеграл, $E_{ct} \approx 2 \text{ эВ}$ – щель с переносом заряда (аналог хаббардовского U), t_{fg}^{NM} – интегралы перескока, соответствующие уничтожению квазичастицы в состоянии M и рождению в состоянии N . Параметры гамильтониана (1) выражаются через микроскопические параметры p – d -модели (см. работу [16], где также приведен набор микроскопических параметров и соответствующие им модельные параметры для купратов n -типа). Зависимость от расстояния обменных интегралов и интегралов перескока известна, и дальнейшие расчеты в данной работе проводились с учетом всех интегралов вплоть до пятой координационной сферы. Параметры были получены из сравнения с ARPES данными для недопированного NCCO и далее они считаются фиксированными и не зависящими от допирования.

При исследовании модели (1) в немагнитной фазе использовался метод уравнений движения в рамках обобщенного приближения Хартри-Фока [17]. При этом возникают корреляторы вида $\langle X_f^{\sigma\sigma} X_g^{\sigma'\sigma'} \rangle$ и $\langle X_f^{\sigma\bar{\sigma}} X_g^{\bar{\sigma}\sigma} \rangle$. Расщепление типа Хаббард-I привело бы к следующим результатам:

$$\begin{aligned} \langle X_f^{\sigma\sigma} X_g^{\sigma'\sigma'} \rangle &\rightarrow \langle X_f^{\sigma\sigma} \rangle \langle X_g^{\sigma'\sigma'} \rangle = n_p^2, \\ \langle X_f^{\sigma\bar{\sigma}} X_g^{\bar{\sigma}\sigma} \rangle &\rightarrow \langle X_f^{\sigma\bar{\sigma}} \rangle \langle X_g^{\bar{\sigma}\sigma} \rangle = 0, \end{aligned}$$

где n_p – числа заполнения одночастичного состояния. Однако при таком расщеплении полностью пренебрегают спиновыми флуктуациями, учет которых ключевым образом влияет на свойства как сверхпроводящей, так и нормальной фаз (см., например, [18, 19]). В связи с этим мы будем пользоваться следующей схемой расщепления, учитывающей спиновые флуктуации за пределами Хаббард-I:

$$\begin{aligned} \langle X_f^{\sigma\sigma} X_g^{\sigma'\sigma'} \rangle &\rightarrow n_p^2 + \frac{\sigma}{\sigma'} \frac{1}{2} C_{fg}, \\ \langle X_f^{\sigma\bar{\sigma}} X_g^{\bar{\sigma}\sigma} \rangle &\rightarrow C_{fg}. \end{aligned}$$

Здесь $C_{fg} = \langle X_f^{\sigma\bar{\sigma}} X_g^{\bar{\sigma}\sigma} \rangle = 2 \langle S_f^z S_g^z \rangle$ – спиновые корреляционные функции.

Для расчета спиновых корреляторов C_{fg} использовалась двумерная t - J -модель CuO_2 -плоскости. Для получения собственно-энергетических уравнений с функциями Грина, построенными на операторах Хаббарда, использовался формализм Мори, позволяющий представить эти функции в виде цепных дробей. Элементы дробей для электронной и спиновой функций Грина содержат корреляторы для близких узлов, а остаточные члены дробей являются многочастичными функциями Грина. Последние аппроксимируются расщеплением, корректируемым введением вершинной поправки [20, 21]. Эта поправка определяется из условия нулевой узельной намагниченности в рассматриваемом парамагнитном состоянии. Данное условие, собственно-энергетические уравнения для электронной и спиновой функций Грина и условия самосогласования для корреляторов образуют замкнутую систему, которая решалась с помощью итераций для фиксированных химпотенциала и температуры. Для малых кластеров и в недопированном случае результаты расчета [22, 23] хорошо согласуются с данными точной диагонализации и метода Монте-Карло. Используемые в данной работе спиновые корреляторы были получены из спиновой функции Грина, вычисленной в таком самосогласованном подходе на решетке 20×20 узлов.

В работе [23] показано, что затухание квазичастиц $\Gamma_k = -\text{Im} \Sigma_k(\omega = 0)$, где $\Sigma_k(\omega)$ – собственно-энергетическая часть, велико в окрестности точек $(0, 0)$ и (π, π) . В дальнейших расчетах в окрестности этих точек нами производилось уширение спектральных пиков за счет искусственного введения Γ_k . Само значение Γ_k было взято из работы [24]. Необходимо отметить, что, как показали расчеты, введенное таким образом затухание квазичастиц слабо влияет на такие интегральные характеристики, как химпотен-

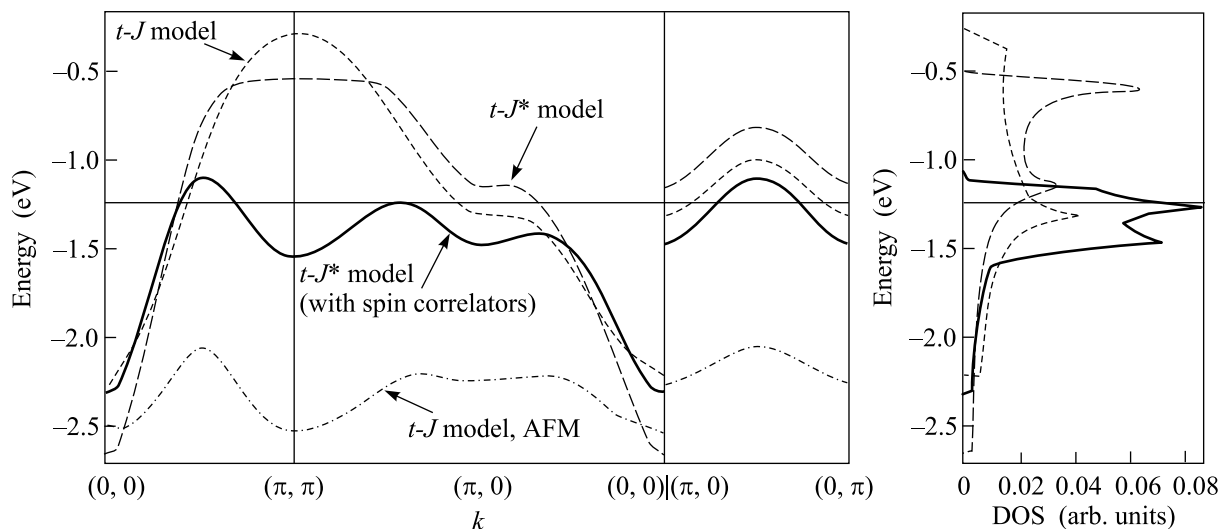


Рис.1. Дисперсия по основным направлениям зоны Бриллюэна и плотность состояний в парамагнитной фазе в t - J (пунктирная линия) и t - J^* (штриховая линия)-моделях в Хаббард-I, t - J^* -модели с учетом спиновых корреляторов (жирная сплошная линия). Сплошная горизонтальная линия – химпотенциал, самосогласованно вычисленный для последней модели. Также приведен спектр t - J -модели в АФМ фазе (штрихпунктирная линия)

циал $\mu(x)$ и температура сверхпроводящего перехода $T_c(x)$.

3. На рис.1 показаны рассчитанные законы дисперсии и соответствующие плотности состояний в парамагнитной несверхпроводящей фазе для t - J - и t - J^* -моделей с учетом и без учета спиновых корреляторов. Как видно, учет трехцентровых слагаемых приводит к сильному изменению на потолке зоны проводимости, то есть будет сказываться при малых уровнях допирования x . В АФМ фазе в спектре t - J -модели существует симметрия в окрестности точек $(\pi/2, \pi/2)$ и $(\pi, 0)$ (см. рис.1). В парамагнитной фазе такой симметрии нет. Однако учет спиновых корреляторов C_{fg} дает тенденцию к восстановлению симметрии в упомянутых точках.

На рис.2 показана зависимость $\mu(x)$. Как видно, теоретический расчет очень хорошо согласуется с приведенными на том же рисунке экспериментальными данными [13], в частности, отсутствует пиннинг химпотенциала. На том же рисунке на вставке показаны экспериментальная [25] и рассчитанная (черная жирная штриховка и светлая сплошная линия) ферми-поверхности для оптимально допированного ($x_{opt} = 0.15$) NCCO. В эксперименте наблюдается только одно сечение ферми-поверхности, при этом вследствие наличия псевдощели наблюдается разная интенсивность спектральных пиков вдоль этого сечения. В рассматриваемой нами теории существует два сечения ферми-поверхности. Однако вследствие сильной зависимости затухания квазичастиц

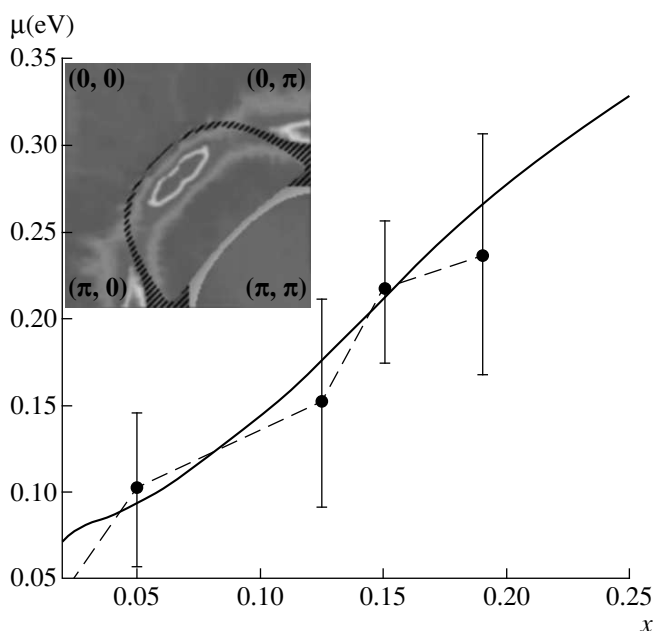


Рис.2. Сплошная линия – зависимость химпотенциала μ от допирования x в t - J^* -модели с учетом спиновых корреляторов, штриховая линия соединяет экспериментальные точки [13]. На вставке – экспериментальная [25] и рассчитанная ферми-поверхности для $\text{Nd}_{1.85}\text{Ce}_{0.15}\text{CuO}_4$

от импульса второе сечение попадает в область большого Γ_k (эта область показана на рисунке светлой сплошной линией). Именно поэтому второе сечение практически не должно наблюдаться в эксперимен-

те. В свете вышесказанного можно утверждать, что наблюдается хорошее согласие рассчитанной и экспериментальной ферми-поверхностей.

4. Теперь, когда мы видим, что t - J^* -модель в рассматриваемых приближениях дает хорошее согласие с экспериментальными данными в несверхпроводящей фазе, перейдем к рассмотрению СП фазы. Полученные нами уравнения на сверхпроводящий параметр порядка Δ_k абсолютно аналогичны приведенным в работах [3, 26], поэтому мы не будем их здесь выписывать. Отметим только, что, во-первых, вследствие учета трехцентровых слагаемых константа связи СП фазы существенно перенормируется [3], а во-вторых, поскольку мы учитываем перескоки и обменные интегралы вплоть до пятой координационной сферы, то, согласно [26], параметр порядка в случае $d_{x^2-y^2}$ -типа симметрии имеет вид

$$\Delta_k = \sum_{m=1}^2 \Delta_m (\cos(mk_x a) - \cos(mk_y a)). \quad (2)$$

Сравнение экспериментальных [1, 2] данных для NCCO и PCO и полученных нами теоретических зависимостей температуры сверхпроводящего перехода $T_c(x)$ приведено на рис.3. Отметим, что приведенные экспериментальные ошибки связаны с различиями в

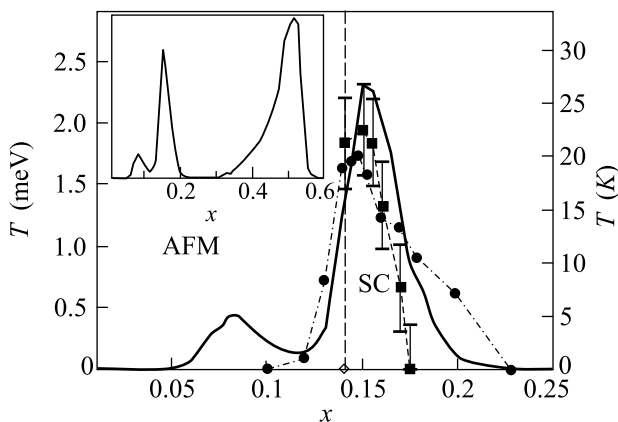


Рис.3. Фазовая диаграмма купратов n -типа: теоретически рассчитанная зависимость $T_c(x)$ (сплошная жирная линия), экспериментальные зависимости $T_N(x)$ для NCCO (штриховая линия, слева от нее – АФМ фаза, справа – парамагнитная фаза), $T_c(x)$ для NCCO (пунктирная линия с черными квадратами) и для PCO (штрихпунктирная линия с черными кружками). На вставке – теоретически рассчитанная зависимость $T_c(x)$ для более широкого диапазона концентраций

качестве образцов, а не с точностью определения температуры фазового перехода. На вставке показана та же теоретическая зависимость $T_c(x)$, но для более

широкого диапазона концентраций. Хорошо видны два ярко выраженных максимума T_c при $x = 0.15$ и $x = 0.53$, а также слабый максимум в окрестности $x = 0.08$. Впервые в t - J^* -модели с самосогласованно рассчитанными спиновыми корреляторами дополнительный максимум $T_c(x)$ при малых x был получен в [27].

Полученную картину легко понять из простых физических соображений. В теории сверхпроводимости типа БКШ существует соотношение: $T_c \propto \exp(-1/N(\varepsilon_F)V)$, где $N(\varepsilon_F)$ – плотность состояний на уровне Ферми ε_F , а V – эффективное притяжение. Очевидно, максимальное $T_c(x)$ будет достигаться при попадании химпотенциала на особенность Ван-Хова. В случае пренебрежения спиновыми корреляторами в t - J -модели за максимум $T_c(x)$ ответственна только одна особенность Ван-Хова, связанная с плоским участком в дисперсии в точке $(\pi, 0)$. Как известно, при этом в приближении ближайших соседей получается $x_{\text{opt}} = 0.33$, а при учете более трех координационных сфер $x_{\text{opt}} = 0.53$ – на вставке на рис.3 при этой концентрации также виден максимум $T_c(x)$. При учете трехцентровых слагаемых (t - J^* -модель) появляется дополнительная особенность, обусловленная плоской дисперсией в районе точки (π, π) . Но эта точка – дно зоны проводимости, поэтому химпотенциал попадает на эту особенность только при очень малых $x \leq 0.07$, то есть там, где мала подвижность носителей и еще силен ближний АФМ порядок, что приводит к невыгодности сверхпроводящего состояния. Однако в t - J^* -модели с учетом спиновых корреляторов дополнительная особенность на -1.25 эВ возникает вследствие седловой точки в окрестности $(\pi, 0.4\pi)$ (см. рис.1). Эта особенность как раз и ответственна за максимум в $T_c(x)$ при $x \approx 0.15$. Именно на этой особенности лежит химпотенциал при оптимальном допировании. Именно вследствие этого получается, что расстояние между положением μ и особенностью Ван-Хова, соответствующей плато в дисперсии в точке $(\pi, 0)$, равно $\Delta E_{VH} = 0.27$ эВ, что очень хорошо согласуется с экспериментально наблюдаемым $\approx 0.25 \div 0.35$ эВ [14, 28]. В отличие от n -типа, во всех купратах p -типа ΔE_{VH} мало – менее 0.03 эВ. Отметим, что слабый максимум в $T_c(x)$ в окрестности $x = 0.08$ связан с плечом (изломом) в плотности состояний на -1.2 эВ (см. рис.1). Более того, поскольку энергия АФМ фазы ниже энергии нормальной и сверхпроводящих фаз, то этот слабый максимум и вся часть $T_c(x)$, лежащая при $x < 0.14$ и находящаяся ниже экспериментально наблюдаемой температуры Нееля $T_N(x)$, не будут проявляться в эксперименте.

5. Таким образом, нами в рамках эффективной модели для ВТСП n -типа и простых физических приближений, заключающихся в учете спиновых флуктуаций за пределами Хаббард-I, получено количественное согласие с такими экспериментальными данными, как эволюция химпотенциала с допированием, ферми-поверхность для оптимально допированного NCCO и зависимость $T_c(x)$. Хотя аналогичные результаты по зависимости $T_c(x)$ ранее были получены в рамках FLEX приближения [29], подход данной работы отличается физической прозрачностью и тем, что в явном виде учитывает эффекты сильных электронных корреляций, играющих очень важную роль в ВТСП. Показано, что за концентрационную зависимость $T_c(x)$ в купратах n -типа ответственна другая физика, нежели в купратах p -типа. А именно, вследствие спиновых флуктуаций система стремится восстановить АФМ порядок. При этом закон дисперсии трансформируется таким образом, что образует плоские участки в окрестности точки $(\pi, 0.4\pi)$ (и симметричных ей точек), что приводит к образованию дополнительной особенности Ван-Хова. Благодаря такой трансформации плотности состояний при x порядка 0.15 возникает дополнительный сверхпроводящий “колокол”, хорошо согласующийся с экспериментальными результатами. Еще раз отметим, что в данном исследовании не было подгоночных параметров – все параметры эффективной модели однозначно связаны с микроскопическими параметрами многозонной p - d -модели. Эти микроскопические параметры были определены в наших прежних работах из сравнения с ARPES данными для недопированных АФМ купратов.

Что касается не учитываемого в данной работе электрон-фононного взаимодействия, то существуют указания на слабость этого взаимодействия в ВТСП n -типа. Первое указание – это практически полное отсутствие изотоп-эффекта [30]. Вторым свидетельством является отсутствие кинка в направлении $(0, 0) - (\pi, \pi)$ [31], что сильно контрастирует с ВТСП p -типа, где появление кинка рассматривается как проявление сильного электрон-фононного взаимодействия.

Авторы признательны В. В. Валькову, В. Ф. Гантмахеру, Д. М. Дзедзисавили, Е. Г. Максимова и Г. М. Элиашбергу за обсуждение результатов работы. Работа выполнена при поддержке INTAS, грант # 01-0654, ЕТФ, грант # 5548, Российского фонда фундаментальных исследований грант # 03-02-16124, ФЦП “Интеграция”, грант # Б0017, программы РАН “Квантовая макрофизика” Сибирского отделения

РАН (Лаврентьевский конкурс молодежных проектов), Фонда “Династия” и МЦФФМ.

1. G. M. Luke et al., Phys. Rev. **B42**, 7981 (1990).
2. J. L. Peng et al., Phys. Rev. **B55**, R6145 (1997).
3. В. В. Вальков и др., Письма в ЖЭТФ **75**, 450 (2002).
4. C. C. Tsuei and J. R. Kirtley, Phys. Rev. Lett. **85**, 182 (2000).
5. Г. Х. Панова и др., Письма в ЖЭТФ **75**, 699 (2002).
6. J. D. Kokales et al., Phys. Rev. Lett. **85**, 3696 (2000).
7. R. Prozorov et al., Phys. Rev. Lett. **85**, 3700 (2000).
8. N. P. Armitage et al., Phys. Rev. Lett. **86**, 1126 (2001).
9. Yu. B. Gaididei and V. M. Loktev, Phys. Status Solidi **B147**, 307 (1988).
10. В. А. Гавричков и др., ЖЭТФ **118**, 422 (2000).
11. А. А. Борисов и др., ЖЭТФ **124**, 862 (2003).
12. В. А. Гавричков, С. Г. Овчинников, ЖЭТФ **125**, 630 (2004).
13. N. Harima et al., Phys. Rev. **B64**, 220507(R) (2001).
14. N. P. Armitage et al., Phys. Rev. Lett. **88**, 257001 (2002).
15. М. М. Коршунов, С. Г. Овчинников, ФТТ **43**, 399 (2001).
16. М. М. Korshunov et al., Physica **C402**, 365 (2004).
17. С. В. Тябликов, *Методы квантовой теории магнетизма*, 2-ое изд., М.: “Наука”, 1975.
18. N. M. Plakida and V. S. Oudovenko, Phys. Rev. **B59**, 11949 (1999).
19. A. Sherman, Phys. Rev. **B55**, 582 (1997).
20. А. Ф. Барабанов, В. М. Березовский, ЖЭТФ **106**, 1156 (1994).
21. J. Kondo and K. Jamaçi, Prog. Theor. Phys. **47**, 807 (1972).
22. A. Sherman and M. Schreiber, Phys. Rev. **B65**, 134520 (2002).
23. A. Sherman and M. Schreiber, European Phys. J. **B32**, 203 (2003).
24. J. Schmalian et al., Phys. Rev. **B54**, 4336 (1996).
25. N. P. Armitage et al., Phys. Rev. Lett. **87**, 147003 (2001).
26. В. В. Вальков, Д. М. Дзедзисавили, Письма в ЖЭТФ **77**, 450 (2002).
27. В. В. Вальков, Д. М. Дзедзисавили, *Тезисы XXX международной зимней школы физиков-теоретиков “Коуровка-2004”*, Екатеринбург–Челябинск, 22–28 февраля 2004 г., с. 24; направлено в ЖЭТФ.
28. D. M. King et al., Phys. Rev. Lett. **70**, 3159 (1993).
29. D. Manske, I. Eremin, and K.-H. Bennemann, Phys. Rev. **B62**, 13922 (2000).
30. M. L. Kulić, Phys. Rep. **338**, 1 (2000).
31. N. P. Armitage et al., Phys. Rev. **B68**, 064517 (2003).