Письма в ЖЭТФ, том 66, вып.8, стр.533 - 538 © 1997г. 25 октября

# К ТЕОРИИ ПСЕВДОЩЕЛИ В СПЕКТРЕ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ НОРМАЛЬНОЙ ФАЗЫ БИСЛОЙНЫХ КУПРАТОВ

*С.В.Варламов, М.В.Еремин, И.М.Еремин*

*Казанский государственный университет*

*420008 Казань, Россия*

Поступила в редакцию 18 июля 1997 г.

После переработки 11 сентября 1997 г.

Найдены решения интегральных уравнений для псевдощели в спектре элементарных возбуждений носителей тока в бислойных купратах. В общем случае псевдощель имеет симметрию типа $s+id$, где $s$-компонента определяется взаимодействием дырок через поле фононов, а $d$ обусловлена суперобменным взаимодействием спинов меди и экранированным кулоновским отталкиванием дырок; $s$- и $d$-компоненты имеют различные температурные зависимости. Это обстоятельство позволило объяснить особенности температурного хода спиновой восприимчивости нормальной фазы слабодопированных купратов, в частности, соединения $YBa_2Cu_4O_8$ во всем интервале температур $T > T_c$. Зависимость псевдощели от волнового вектора согласуется с фотоэмиссионными данными для $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+y}$.

PACS: 74.25.Kc, 74.72.-h

Проблема электронного строения сверхпроводников на основе плоскостей $CuO_2$ находится в центре внимания современных исследований. Недавние эксперименты по фотоэмиссии [1,2] особенно четко выявили наличие псевдощели в спектре элементарных возбуждений нормальной фазы $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+y}$ с малыми индексами допирования. Наличие псевдощели в нормальной фазе недодопированных купратов качественно объясняет аномалии многих физических свойств ВТСП [3,4], однако происхождение ее остается невыясненным. В ряде работ было высказано предположение, что псевдощель появляется вследствие нестабильности квазифермижидкостной подсистемы к волнам зарядовой либо спиновой плотности [5]. В работе [6] происхождение псевдощели связывается со спариванием спинонов, а в [7] – с сильными флуктуациями фазы обычного параметра порядка (куперовских пар), возникающих, по мнению авторов, задолго до температуры перехода в сверхпроводящее состояние.

Причины нестабильности – взаимодействие через поле фононов, суперобменное взаимодействие спинов меди и кулоновское отталкивание дырок из-за сложности проблемы обычно анализируются порознь. Между тем интегральные уравнения на псевдощель нелинейны и, следовательно, результат одновременного рассмотрения указанных взаимодействий не очевиден.

В данной работе сообщается о первых результатах решения системы нелинейных интегральных уравнений на псевдощель при одновременном учете всех трех взаимодействий. Оказалось, что в отличие от $s$-типа решений для параметра порядка волн зарядовой плотности по фононному механизму [8] и $d$- типа решений, связанных с суперобменом [9], в общем случае решения комплексны и имеют симметрию $s + id$-типа. Более того, как будет показано ниже, реальная ($s$) и мнимая ($d$) компоненты имеют разные температурные зависимости. Критическая температура $T^*_{ex}$ для $d$-компоненты может быть в несколько раз больше $T^*_{ph}$ для $s$-компоненты, что позволяет нам в итоге описать температурную зависимость спиновой восприимчивости бислойных купратов, в частности, для $YBa_2Cu_2O_8$ от $T_c = 82\,К$ до $T \approx 700\,К$. Последняя, как известно, наиболее точно измеряется методом ЯМР через сдвиг Найта на ядрах меди Cu(2).

В работе [10] было найдено, что фотоэмиссионные данные о спектре элементарных возбуждений бислойных купратов $YBa_2Cu_4O_8$ и $YBa_2Cu_3O_7$ [11] вполне могут быть описаны в рамках модели синглетно-коррелированного движения дырок кислорода. Зависимость энергии квазичастиц от волнового вектора достаточно точно может быть также представлена в эквивалентной [10] двухзонной модели [12,13] в следующем виде:

$$\epsilon_k = 1/2(E_k^{dd} + E_k^{pp}) + 1/2[(E_k^{dd} - E_k^{pp})^2 + 4E_k^{pd}E_k^{dp}]^{1/2}, \tag{1}$$

где

$$E_k^{pp} = \epsilon_p - t_{ab} +$$
$$+ \sum_m \left\{ \left[ P_p + \frac{1}{P_p} < S_i S_m > \right] t_{im}^{(p)} - \frac{K_{im} + J_{im}/2}{P_p} < \Psi_i^{pd,\uparrow} \Psi_m^{\uparrow,pd} > \right\} \exp(ikR_{im}), \tag{2}$$

$$E_k^{pd} = \sum_m \left[ P_d - \frac{1}{P_p} < S_i S_m > \right] t_{im}^{(pd)} \exp(ikR_{im}), \tag{3}$$

а выражения для $E_k^{dd}$ и $E_k^{dp}$ получаются из приведенных $E_k^{pp}$ и $E_k^{pd}$ путем замены индексов $p$ на $d$ и корреляционной функции $< \Psi_i^{pd,\uparrow} \Psi_m^{\uparrow,pd} >$ на $< \Psi_i^{\downarrow,0} \Psi_m^{0,\downarrow} >$. Как и в [12,13], хаббардовского типа операторы $\Psi_i^{pd,\uparrow}$ ($\Psi_i^{\uparrow,pd}$) и $\Psi_i^{\downarrow,0}$ ($\Psi_i^{0,\downarrow}$) соответствуют рождению (уничтожению) квазичастиц в синглетной и медной зонах, соответственно. Средние значения антикоммутаторов равны $P_p = (2+\delta)/4$ и $P_d = (2-\delta)/4$, где $\delta$ – число дырок проводимости в расчете на одну элементарную ячейку в бислое $Cu_2O_4$. $K_{im}$ и $J_{im}$ – параметры кулоновского и суперобменного взаимодействий, определяемых выражениями вида

$$H_{Co} = \sum_{i>j} K_{ij}(1 - \Psi_i^{pd,pd} - \Psi_i^{0,0})(1 - \Psi_i^{pd,pd} - \Psi_j^{0,0}), \tag{4}$$

$$H_{Ex} = \sum_{i>j} J_{ij} \left[ (S_i S_j) - \frac{n_i n_j}{4} \right], \tag{5}$$

где $n_i = \Psi_i^{\uparrow,\uparrow} + \Psi_i^{\downarrow,\downarrow}$ – число спинов на один узел подрешетки меди.

Выражения (1) – (3) описывают дисперсию синглетной связывающей (нечетной) зоны. В случае антисвязывающей (четной) зоны в (2) параметр туннелирования $-t_{ab}$ заменяется на $+t_{ab}$.

Оцененные в [12] относительные значения интегралов переноса (в мэВ) между первыми, вторыми и третьими соседями равны: $t_1^{(p)} = 82$, $t_2^{(p)} = 3$, $t_3^{(p)} = 12$, $t_1^{(d)} = 79$, $t_2^{(d)} = 7$, $t_3^{(d)} = 10$, $t_1^{(pd)} = 83$, $t_2^{(pd)} = 6$, $t_3^{(pd)} = 12$. Диэлектрическая щель и спиновые корреляторы приняты равными $\epsilon_p - \epsilon_d = 1.4\,эВ$, $< S_i S_j >_1 = -0.14$, $< S_i S_j >_2 = 0.07$, $< S_i S_j >_3 = 0.09$. Указанные величины хорошо описывают форму ферми-поверхности (рис.1), измеренную недавно методами фотоэмиссии [14,15]. Это обстоятельство дает нам твердую основу для анализа температурной зависимости функции отклика и псевдощели, которые, как известно [16], сильно зависят от формы ферми-поверхности. Рассчитанная нами при $\delta = 0.33$ (рис.1), она хорошо согласуется

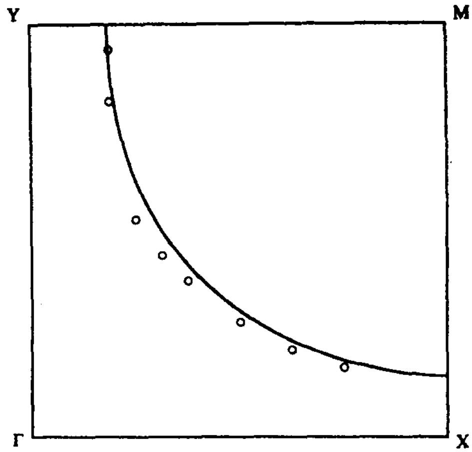


Рис.1. Форма ферми-поверхности в отсутствие псевдощели для $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+y}$. Кружки – экспериментальные точки из [16], кривая – рассчитанная форма

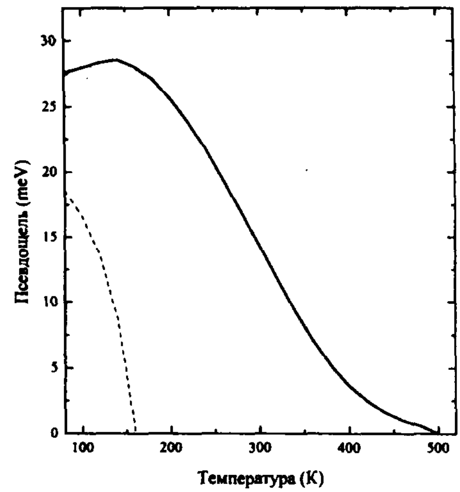


Рис.2. Зависимость псевдощели от температуры. Сплошная линия – $D(T)$, пунктирная линия – $A(T)$

с экспериментальными данными для $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+y}$ [15]. Параметр туннелирования $-t_{ab} = 50$ мэВ был выбран с учетом фотоэмиссионных данных [14,17,18].

Важная особенность связывающей синглетной зоны заключается в том, что ее спектральный вес зависит от допирования $\delta$ как $4\delta/(2+\delta)$ и, следовательно, условие половинного заполнения имеет место при $\delta = 2/7$, что качественно объясняет необычное поведение фазовой диаграммы $T_c$ и $T^*$ как функции допирования [3].

Численный расчет функции отклика дал результат, аналогичный [16]. Он показал, что при описанной выше анизотропии поверхности Ферми она имеет максимум при $Q_x = \pm\pi/a$, $Q_y = \pm\pi/a$, то есть система носителей тока имеет нестабильность пайерлсовского типа. Спектр элементарных возбуждений в таких условиях модифицируется к виду

$$E_{1k,2k} = \frac{\epsilon_k + \epsilon_{k+Q}}{2} \pm \frac{1}{2}[(\epsilon_k - \epsilon_{k+Q})^2 + 4|G_{ph}(k,T) + G_{ex}(k,T)|^2]^{1/2}. \qquad (6)$$

Уравнение на фононную компоненту щели, $G_{ph}(k,T)$, имеет вид, характерный для волн зарядовой плотности [8, 19]:

$$G_{ph}(k,T) = -\frac{P_p}{N}\sum_{k_1} V_{k_1,Q} < \Psi^{pd,\uparrow}_{k_1+Q}\Psi^{\uparrow,pd}_{k_1} > -V_{k,Q}\frac{P_p}{N}\sum_{k_1} < \Psi^{pd,\uparrow}_{k_1+Q}\Psi^{\uparrow,pd}_{k_1} > . \qquad (7)$$

Появление множителя $P_p$ в (7) связано с отличием антикоммутаторов квазифермиевских операторов от единицы; $V_{k,Q}$ – потенциал взаимодействия через фононную моду $\omega_Q$ [8]:

$$V_{k,Q} = \frac{2|V(Q)|^2\hbar\omega_Q}{(\hbar\omega_Q)^2 - (\epsilon_k - \epsilon_{k+Q})^2}\Theta(\hbar\omega_D - |\epsilon_k - \epsilon_{k+Q}|), \qquad (8)$$

где $\omega_D$ – частота Дебая, $\Theta(x)$ – тета-функция, $V(Q)$ – константа взаимодействия с фононной модой. В [5, 19] отмечалось, что в пайерлсовском переходе наиболее активно участвует дыхательная мода $\omega_D = 45$ мэВ атомов кислорода в плоскостях $CuO_2$.

Суперобменная компонента щели $G_{ex}(k,T)$ определяется выражением

$$G_{ex}(k,T) = -\frac{1}{P_p N}\sum_{k_1}[J(k_1-k)+2K(k_1-k)] < \Psi^{pd,\uparrow}_{k_1+Q}\Psi^{\uparrow,pd}_{k_1} > . \quad (9)$$

Здесь $J(q)$ и $K(q)$ – фурье-образы суперобменного и кулоновского взаимодействия, соответственно. В частности, $J(q) = J_1(\cos q_x a + \cos q_y a)$, где $J_1$ – константа суперобменной связи между ближайшими соседями ионов меди в плоскости $CuO_2$.

Температурная зависимость $G_{ph}(k,T)$ и $G_{ex}(k,T)$ рассчитывается самосогласованно из (7) и (9). Корреляционная функция $< \Psi^{pd,\uparrow}_{k+Q}\Psi^{\uparrow,pd}_{k} >$ определяется формулой

$$< \Psi^{pd,\uparrow}_{k_1+Q}\Psi^{\uparrow,pd}_{k_1} >= P_p\frac{G_{ph}(k,T)+G_{ex}(k,T)}{\epsilon_{1k}-\epsilon_{2k}}[f(\epsilon_{1k})-f(\epsilon_{2k})]. \quad (10)$$

Численные решения системы уравнений (7), (9) показывают, что при интересующих нас $\delta = 0.1 - 0.3$ зависимость функции псевдощели от волнового вектора представляется в виде

$$G(k,T) = A(T) + B(T)\frac{(\hbar\omega_Q)^2\Theta(\hbar\omega_D - |\epsilon_k - \epsilon_{k+Q}|)}{(\hbar\omega_Q)^2 - (\epsilon_k - \epsilon_{k+Q})^2} + iD(T)[\cos k_x a - \cos k_y a]. \quad (11)$$

Температурная зависимость величин $A(T)$ и $D(T)$ при $|V(Q)| = 80$ мэВ, $\hbar\omega_Q = 40$ мэВ, $J_1 + 2K_1 = 210$ мэВ представлена на рис.2. Отношение $A(T)/B(T) = 0.73$. Отметим, что рассчитанная нами критическая температура $T^*_{ph} \approx 170$ К совпадает с температурой появления аномалий, связанных с решеткой (смягчение фононных мод в рамановском спектре [20], изменения в частотах ЯКР [21,22] и др.), которые в [19] интерпретируются как проявление волн зарядовой плотности в кристалле $YBa_2Cu_4O_8$.

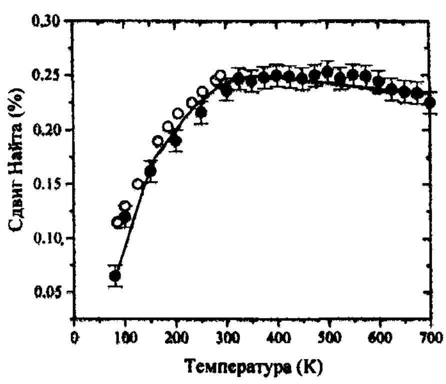


Рис.3. Температурная зависимость сдвига Найта для Cu(2) (магнитное поле $\perp$ оси $z$) в $YBa_2Cu_4O_8$. Линия – рассчитанная кривая, кружки – экспериментальные данные (заполненные из [24], незаполненные – согласно [23])

На рис.3 приведен рассчитанный нами сдвиг Найта на ядрах меди Cu(2) в $YBa_2Cu_4O_8$ при $\delta = 0.29$. Экспериментальные данные взяты из работ [23, 24]. Слабое проявление $T^*_{ph}$ видно и на этом графике. По сравнению с ферми-жидкостными картинами точка фазового перехода сильно замаскирована температурной зависимостью $G_{ex}(k,T)$. Разброс критической температуры из-за флуктуаций не является определяющим в данном случае. В случае $G_{ex}(k,T) = 0$ излом $K_s(T)$ при $T^*_{ph}$ становился бы более резким и при $T > T^*_{ph}$ сдвиг Найта не зависел бы от температуры.

Как видно из рис.3, наличие псевдощели $G_{ex}(k,T)$ хорошо объясняет нетривиальную температурную зависимость $K_s(T)$ во всем интервале температур $T > T^*_{ph}$.

Зависимость псевдощели (11) от волнового вектора $T > T^*_{ph}$ согласуется с фотоэмиссионными данными для $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+y}$ [1, 2, 25], согласно которым псевдощель в спектре элементарных возбуждений нормальной фазы приближенно описывается формулой вида $c(\cos k_x a - \cos k_y a)$, то есть имеет симметрию $d$-типа. Как видно из рис.2, это заключение должно быть абсолютно точным для образцов с $T > T^*_{ph}$, в то время как для $T_c < T < T^*_{ph}$ компонента псевдощели $s$ – типа также должна быть вполне заметной. Это предсказание теории интересно было бы проверить экспериментально.

В заключение отметим, что хотя в данной работе обсуждались лишь бислойные купраты, наше заключение о $s + id$-симметрии псевдощели носит общий характер и остается, в частности, справедливым для моно- и трехслойных ВТСП при соответствующих уровнях допирования. В недавней работе [26] по исследованию фотоэмиссии монослойных купратов $Bi_2Sr_2Ca_{1-x}Dy_xCu_2O_{8+y}$ подчеркивается, что общие функциональные зависимости псевдощели и сверхпроводящей щели, пропорциональные $(\cos k_x a - \cos k_y a)$, указывают на общность их происхождения. Результаты настоящей работы не противоречат этому выводу. В работе [27] путем численного решения уравнения БКШ показано, что любые короткодействующие потенциалы с фурье-образами, пропорциональными $(\cos k_x a + \cos k_y a)$ (в первую очередь это суперобмен ближайших спинов меди), при не очень малых степенях допирования всегда ведут к спариванию $d$-типа; $d$-компонента в нашем решении для псевдощели (и $T^*_{ex}$) также результат короткодействия. Из уравнения (9) видно, что в случае псевдощели суперобменное и экранированное кулоновское взаимодействия усиливают друг друга. В случае же сверхпроводящей щели ситуация обратная. Это обстоятельство качественно объясняет, почему $T^*_{ex}$ в недодопированных купратах выше, чем $T_c$, хотя потенциал их происхождения общий – короткодействующий. Более подробно этот вопрос будет обсуждаться в отдельной работе.

С.В.В. и И.М.Е. благодарны международной Соросовской программе "Соросовские аспиранты" (гранты а97-2930 и а97-1981) за финансовую поддержку.

---

1. H.Ding, T.Yokoya, J.C.Campuzano et al., Nature **382**, 51 (1996).
2. A.G.Loeser, Z.-X.Shen, D.S.Dessau et al., Science **273**, 325 (1996).
3. G.V.M.Williams, J.L.Tallon, E.M.Haines et al., Phys. Rev. Lett. **78**, 721 (1997).
4. D.Pines, in Proc. High-Temp. Supercond. (MS-HTSC V), Beijing, Feb. 28-Mar. **4**, 1997, Physica (North-Holland) C, (to be published).
5. R.S.Markiewicz, Physica (North-Holland) C **193**, 323 (1992); J. Phys. Chem. Solid, in press.
6. X.-G.Wen and P.A.Lee, Phys. Rev. Lett. **76**, 503 (1996).
7. V.J.Emery and S.A.Kivelson, Nature **374**, 434 (1995).
8. C.A.Balseiro and L.M.Falicov, Phys. Rev. **B 20**, 4457 (1979).
9. I.Eremin and M.Eremin, J. Superconductivity **10**, 459 (1997).
10. М.В.Еремин, С.Г.Соловьянов, С.В.Варламов и др., Письма в ЖЭТФ **60**, 118 (1994).
11. K.Gofron, J.C.Campuzano, H.Ding et al., J. Phys. Chem. Solids **54**, 1193 (1993).
12. M.V.Eremin, S.G.Solovjanov, and S.V.Varlamov, J. Phys. Che. Solids **56**, 1713 (1995); М.В.Еремин, С.Г.Соловьянов, С.В.Варламов, ЖЭТФ (1997), в печати.
13. N.M.Plakida, R.Hayn, and J.L.Richard, Phys. Rev. **B 51**, 16599 (1995).
14. M.S.Shabel, C.-H.Park, A.Matsuura et al., Phys. Rev. **B 55**, 2796 (1997).
15. H.Ding, N.R.Norman, T.Yokoya et al., Phys. Rev. **B** (to be published).
16. G.Gruner, *Density Waves in Solids*, Addison-Wesley Publ. Corp., 1994.

17. Z.-X.Shen and J.R.Schrieffer, Phys. Rev. Lett. **78**, 1771 (1997).
18. M.R.Norman, H.Ding, J.C.Campuzano et al., Phys.Rev. **B** (to be published).
19. I.Eremin, M.Eremin, S.Varlamov et al., Phys. Rev. B **56**, N17 (1997).
20. A.P.Litvinchuk, C.Thomsen, and M.Cardona, Solid State Commun. **83**, 343 (1992).
21. A.Suter, D.Brinkmann, M.Mali, and J.Ross, Phys. Rev. **B 8** (1997). (to be published).
22. М.А.Теплов, Е.В.Крюков, А.В.Дуглав и др., Письма в ЖЭТФ **63**, 214 (1996).
23. M.Bankay, M.Mali, J.Roos, and D.Brinkmann, Phys. Rev. **B 50**, 6416 (1994).
24. N.J.Curro, T.Imai, C.P.Slichter, and B.Dabrowski, Phys. Rev. **B 56**, 877 (1997).
25. J.M.Harris, Z.X.Shen, P.J.White et al., Phys. Rev. **B 54**, 15665 (1996).
26. J.M.Harris, P.J.White, Z.-X.Shen et al., Phys. Rev. Lett. **79**, 499 (1997).
27. М.Еремин, И.Ларионов, Письма в ЖЭТФ **62**, 192 (1995).