

# О зависимости параметра псевдощели от волнового вектора в ВТСП

М. В. Еремин<sup>1)</sup>, В. В. Игламов

Казанский государственный университет, 420008 Казань, Россия

Поступила в редакцию 13 декабря 2007 г.

После переработки 9 января 2008 г.

Обсуждаются возможности получения информации о зависимости параметра псевдощели от волнового вектора в ВТСП на основе слоистых купратов путем исследований температурной зависимости сдвига линии ядерного квадрупольного резонанса (ЯКР) на ядрах меди или кислорода. В качестве примера анализируются имеющиеся данные по ЯКР на ядрах меди в  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_8$ .

PACS: 74.20.Mn, 74.72.-h, 76.60.Gv

К настоящему времени установлено, что в большинстве слоистых купратов, при индексах допирования меньше оптимального, в плотности состояний около ферми-уровня имеется “провал” – псевдощель. Обсуждению физических эффектов, связанных с псевдощелью, посвящен ряд обзоров (см., например, [1, 2]). Выяснение причин возникновения псевдощели – одна из актуальных задач ВТСП. В одном из возможных сценариев происхождения псевдощелевого поведения оно интерпретируется как состояние предшествующее спариванию. В интервале температур  $T^* > T > T_c$  предполагается существование сверхпроводящих корреляций из-за квазидвумерности медь-кислородной подсистемы без фазовой когерентности в движении куперовских пар. В других же сценариях псевдощелевая фаза конкурирует со сверхпроводящей. Наиболее популярные из них – это фазы волн зарядовых или спиновых плотностей, а также фазы с циркулирующими токами в пределах одной элементарной ячейки.

В настоящем сообщении мы хотим обратить внимание на то, что прецизионные измерения температурного хода сдвига частоты ядерного квадрупольного резонанса (ЯКР) могут дать важную информацию о зависимости псевдощели от волнового вектора и тем самым способствовать выяснению природы псевдощелевого состояния ВТСП. В частности, мы подчеркиваем, что корреляции типа волн спиновых плотностей не сказываются на сдвиге линии ЯКР, так что наблюдаемый на эксперименте сдвиг при  $T^* > T > T_c$  может быть интерпретирован только через зарядовые корреляции. Для того чтобы сделать наше обсуждение более конкретным, мы обсудим зависимости типа  $(\cos k_x a - \cos k_y a)^n$  с  $n = 1$  и  $n = 2$ , которые оказались в центре внимания недав-

них работ по анализу фотоэмиссионных данных [3–5], хотя наш анализ может быть применен для селекции и иного рода зависимостей параметра псевдощели от волнового вектора.

Запишем оператор взаимодействия квадрупольного момента ядра с носителями тока.

$$H_Q = \frac{e^2 Q}{I(2I-1)} \times \sum_m (-1)^m F_{-m}^{(2)} \langle k, \sigma \left| \frac{C_m^{(2)}(\vartheta, \varphi)}{r^3} \right| k', \sigma \rangle c_{k, \sigma}^+ c_{k', \sigma} = \frac{e}{N} \sum_{m, k, q, \sigma} (-1)^m F_{-m}^{(2)} V_m^{(2)}(q) c_{k, \sigma}^+ c_{k+q, \sigma}. \quad (1)$$

Здесь

$$F_0^{(2)} = \frac{1}{2} [3I_z^2 - I(I+1)], \\ F_{\pm 1}^{(2)} = \mp \sqrt{\frac{3}{8}} (I_z I_{\pm} + I_{\pm} I_z), \quad (2) \\ F_{\pm 2}^{(2)} = \sqrt{\frac{3}{8}} (I_{\pm})^2.$$

При записи (1) мы использовали приближение сильной связи;  $I_z, I_{\pm}$  – операторы ядерного спина,  $N$  – число элементарных ячеек,  $V_m^{(2)}(q) = \sum_l V_m^{(2)}(R_l) e^{iqR_l}$  – фурье-компонента градиента электрического поля на ядре от носителей тока,

$$V_m^{(2)}(R_l) \cong \frac{eQ}{I(2I-1)} \times \langle \Psi(R_l - r) \left| \frac{C_m^{(2)}(\vartheta, \varphi)}{r^3} \right| \Psi(R_l - r) \rangle \delta_{l, \nu}, \quad (3)$$

$|\Psi(R_l - r)\rangle$  – функция Ванье. Из (1) видно, что в первом приближении теории возмущений градиент

<sup>1)</sup>e-mail: Mikhail.Eremyn@ksu.ru

электрического поля пропорционален корреляционной функции  $\langle c_{k,\sigma}^+ c_{k+q,\sigma} \rangle$ , которая описывает возникновение неустойчивости пайерлсовского типа. Эта же корреляционная функция входит в определение параметра порядка в сценарии конкурирующих фаз со сверхпроводимостью. При описании данных фотоэмиссии и туннельной спектроскопии обычно имеют дело либо с модулем параметра псевдощели, либо с ее квадратом. Недавний анализ этих данных для псевдощелевого состояния купратов приведен в [3–5]. В указанных экспериментах фаза параметра псевдощели остается неопределенной. Сейчас же, как мы видим, метод ЯКР может дать важную информацию о знаке корреляционной функции  $\langle c_{k,\sigma}^+ c_{k+q,\sigma} \rangle$  и, следовательно, о фазе параметра волн зарядовой плотности (ВЗП). Таким образом, появляется уникальная возможность в селекции природы компонент параметра порядка. Так, из (1) видно, что корреляционная функция типа  $\langle c_{k+q,\uparrow}^+ c_{k,\uparrow} - c_{k+q,\downarrow}^+ c_{k,\downarrow} \rangle$  не сказывается на сдвиге линии ЯКР, даже если волны спиновых плотностей (ВСП) и существуют в псевдощелевой фазе. Можно сделать и обратное заключение: если характерный для псевдощелевого состояния температурный сдвиг линии ЯКР наблюдается, то он не связан с ВСП. Итак, ниже мы сосредоточим внимание на возможной нестабильности типа ВЗП.

Модельный гамильтониан электронной подсистемы имеет вид

$$H = \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k c_{k,\sigma}^+ c_{k,\sigma} + \sum_{k,\sigma} D_{k,q} c_{k+q,\sigma}^+ c_{k,\sigma}. \quad (4)$$

Здесь величины  $D_{k,q}$  введены для описания псевдощелевого состояния. Из условия эрмитовости гамильтониана (4) вытекает  $D_{k,q}^* = D_{k+q,-q}$ . Сверхпроводящую фазу мы исключаем из рассмотрения для простоты изложения. Температурная область существования псевдощелевой фазы и сверхпроводимости будет рассмотрена в более подробной работе. Для пояснения связи между  $D_{k,q}$  и корреляционными функциями типа  $\langle c_{k,\sigma}^+ c_{k+q,\sigma} \rangle$  составляются уравнения движения для функций Грина  $\langle\langle c_{k,\sigma} | c_{k,\sigma}^+ \rangle\rangle$  и  $\langle\langle c_{k+q,\sigma} | c_{k,\sigma}^+ \rangle\rangle$ :

$$\begin{aligned} & (\omega - \varepsilon_k) \langle\langle c_{k,\downarrow} | c_{k,\downarrow}^+ \rangle\rangle = \\ & = \frac{i}{2\pi} + \sum_q D(k, q) \langle\langle c_{k+q,\downarrow} | c_{k,\downarrow}^+ \rangle\rangle, \\ & (\omega - \varepsilon_{k+q}) \langle\langle c_{k+q,\downarrow} | c_{k,\downarrow}^+ \rangle\rangle = \\ & = \sum_{q'} D(k+q, q') \langle\langle c_{k+q+q',\downarrow} | c_{k,\downarrow}^+ \rangle\rangle. \end{aligned} \quad (5)$$

Подставляя  $\langle\langle c_{k+q,\sigma} | c_{k,\sigma}^+ \rangle\rangle$  из второго уравнения в первое, находим

$$\begin{aligned} & \left\{ \omega + i\Gamma - \varepsilon_k - \sum_q \frac{|D_{k,q}|^2}{\omega + i\Gamma - \varepsilon_{k+q}} \right\} \times \\ & \times \langle\langle c_{k,\downarrow} | c_{k,\downarrow}^+ \rangle\rangle = i/2\pi. \end{aligned} \quad (6)$$

Фигурирующую в (6) сумму оцениваем как в работах [6, 7], вводя лоренцевское распределение флуктуаций  $|D_{k,q}|^2$  около некоторого волнового вектора  $Q$ , значение которого соответствует максимуму мнимой части зарядовой восприимчивости. По расчетам работы [8] динамическая зарядовая восприимчивость пикуется в области волнового вектора  $Q = (\pi, \pi)$ . Выбирая это значение для вектора  $Q$ , находим спектр элементарных возбуждений

$$\begin{aligned} E_k & = \frac{\varepsilon_k + \varepsilon_{k+Q}}{2} \pm \\ & \pm \frac{1}{2} [(\varepsilon_k - \varepsilon_{k+Q})^2 + 4 \langle |D(k)|^2 \rangle + 4\Gamma\Gamma_\xi], \end{aligned} \quad (7)$$

где

$$\Gamma_\xi = \left[ \xi_x^{-1}(T) \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_x} + \xi_y^{-1}(T) \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k_y} \right]$$

– параметр, учитывающий флуктуации  $D_{k,q}$ , а  $\Gamma$  – обычный параметр затухания квазичастичных возбуждений. Следуя [3–5], естественно предположить, что  $\Gamma\Gamma_\xi$  пропорционально квадрату температуры. Отметим, что выражение (7) имеет логическое обоснование лишь вблизи уровня Ферми. Вдалеке от уровня Ферми использованный метод оценки суммы в (6) теряет силу, и естественно считать, что  $E_k \cong \varepsilon_k$ . Исходя из этого, как и в [3–5], будем считать, что при  $\varepsilon_k > \mu$  в (7) берется знак плюс, а при  $\varepsilon_k < \mu$  – минус. Спектральная плотность определяется мнимой частью функции Грина и равна

$$\text{Im} \langle\langle c_{k,\downarrow} | c_{k,\downarrow}^+ \rangle\rangle = \frac{\Gamma_\xi a - (\omega - \varepsilon_{k+Q})b}{a^2 + b^2}, \quad (8)$$

где  $a = (\omega - \varepsilon_k)(\omega - \varepsilon_{k+Q}) - \langle D^2(k) \rangle$ ,  $b = \Gamma(\omega - \varepsilon_{k+Q}) + \Gamma_\xi(\omega - \varepsilon_k)$ . Графики спектральной плотности около ферми-уровня, рассчитанные по формуле (8), имеют примерно такой же вид, как и в [3–5], и поэтому здесь не приводятся. Половина интервала между пиками соответствует параметру эффективной щели, измеряемому в экспериментах по фотоэлектронной эмиссии [8]. Сопоставляя их, как и в [3, 4] с имеющимися экспериментальными данными, оцениваем температурную зависимость  $\Gamma\Gamma_\xi = \alpha T^2$  и находим  $\alpha = 1.05$ .

Мнимая часть формфактора  $V_m^{(2)}(q)$  в купратах относительно мала, поэтому доминирующий вклад в сдвиг линии ЯКР связан с реальной частью, которая определяется выражением при  $T^* > T > T_c$

$$\begin{aligned} & \text{Re}\langle c_{k,\downarrow}^+ c_{k+Q,\downarrow} \rangle = \\ & = \frac{\text{Re}(D_{k,Q})}{E_{k+Q} - E_k} [f(E_{k+Q}) - f(E_k)], \end{aligned} \quad (9)$$

где  $f(E_k)$  – функция Ферми. Для того чтобы иметь предварительное представление о величине параметра псевдощели и о его зависимости от волнового вектора и температуры, проанализируем данные фотоэмиссии [9] для соединения  $(\text{Bi, Pb})_2(\text{Sr, La})_2\text{CuO}_{6+y}$ . Это соединение было специально приготовлено для измерения величины псевдощели в различных точках контура Ферми. На рис.1 приводятся данные (точки) из работы [9] и возможные варианты их ап-

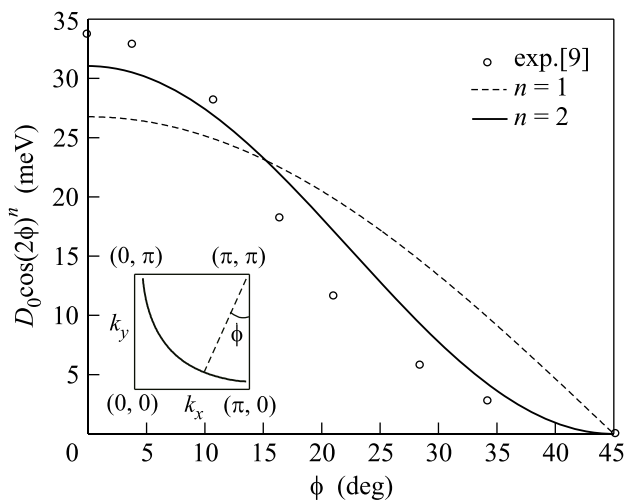


Рис.1. Изменение эффективного параметра псевдощели  $\sqrt{\langle D(k)^2 \rangle} = D_0 \cos(2\phi)^n$ ,  $n = 1, 2$ , вдоль контура Ферми в  $(\text{Bi, Pb})_2(\text{Sr, La})_2\text{CuO}_{6+y}$ . Экспериментальные точки взяты из работы [9]. Параметр псевдощели  $D_0(T = 7\text{ K}) = 31\text{ мэВ}$ , при  $n = 2$

проксимации формулой типа  $D(T)(\cos k_x a - \cos k_y a)^n$  с  $n = 1, 2$ . Видно, что вариант  $n = 2$  предпочтительнее. Попутно отметим, что результаты расчета длины ферми-дуги как функции температуры, проведенные в [3–5], мало чувствительны к виду зависимости псевдощели от степени  $(\cos k_x a - \cos k_y a)^n$ . Так, в работе [5] берут  $n = 2$ , в то время как в [4, 5] отдают предпочтение  $n = 1$ . На рис.2а приведена температурная зависимость величины псевдощели в сильно недодопированном соединении  $\text{Bi2212}$ , измеренная методами фотоэмиссии [10] для трех точек на контуре Ферми. Все три кривые удовлетворительно аппроксимируются феноменологическим выражением  $D(T) = D_0 \tanh^2(\Delta_s/2k_B T)$ . Подчеркнем, что в данных фотоэмиссии фигурирует модуль суммарного параметра псевдощели. Вообще говоря, он может содержать различные компоненты, так как параметр

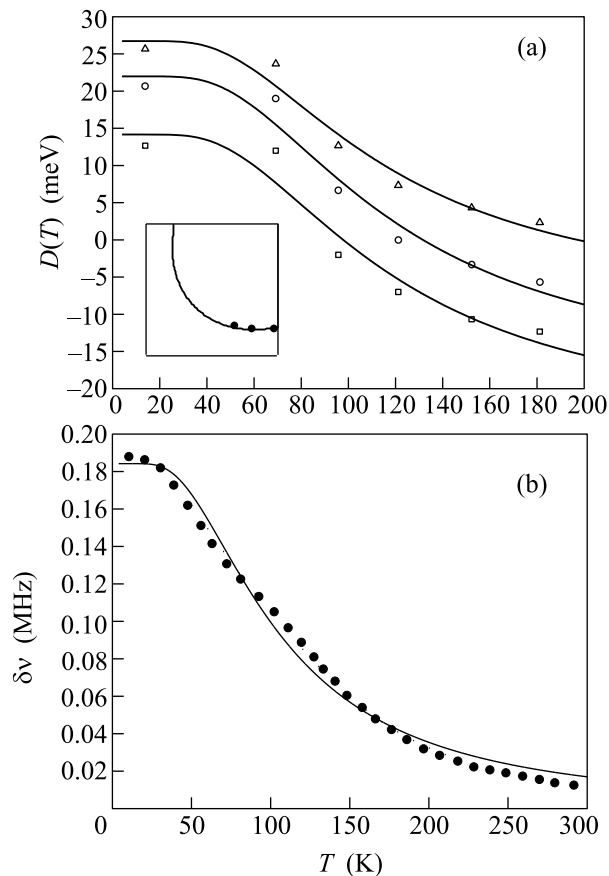


Рис.2. (а) Температурная зависимость эффективного параметра псевдощели для недодопированного соединения [10]  $\text{Bi2212}$ . Параметры аппроксимационной формулы  $D(T) = D_0 \tanh^2(\Delta_s/2k_B T) + \text{const}$  таковы:  $D_0 = 37\text{ мэВ}$ ,  $\Delta_s = 18.4\text{ мэВ}$ ; (б) Температурный ход сдвига линии ЯМР на ядрах плоскостной меди в  $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$  по данным работы [11] (точки). Закон дисперсии квазичастиц взят согласно фотоэмиссионным данным [14]. Параметры псевдощели  $\nu_0 = 4.9 \cdot 10^{-2}\text{ МГц}$ ,  $D_0 = 40.3\text{ мэВ}$ ,  $\Delta_s = 10.4\text{ мэВ}$ . Относительная роль сверхпроводящих корреляций при  $T < T_c = 82\text{ К}$  мала

порядка может быть комплексным [12, 13]. В этой связи для аппроксимации данных по сдвигу линии ЯКР “априори” нет оснований ожидать ту же самую величину псевдощели. Напротив, так как в сдвигу линии ЯКР дает вклад лишь реальная часть параметра порядка, то для аппроксимации данных логично ожидать меньшую величину параметра псевдощели. Значение параметра псевдощели, определенное из данных по фотоэмиссии, следует рассматривать как оценку сверху.

Перейдем теперь к анализу данных ЯМР. К настоящему времени они не многочисленны. Наиболее ярко выделяются данные для соединения  $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ , которое является стехиометрическим и линии ЯКР

меди в нем являются рекордно узкими [11]. Общая температурная зависимость сдвига линии ЯКР на ядрах плоскостной меди Cu(2) определяется двумя вкладками; из-за колебаний решетки и от носителей тока. Поскольку первый вклад хорошо изучен, то, как это уже показано в [11], он может быть вычтен из суммарного сдвига, и в итоге остается “рафинированный” сдвиг, обусловленный носителями тока. Его температурный ход приведен на рис.2б. Отметим, что температурная зависимость сдвига линии, связанная с колебаниями решетки, была выделена и исключена уже в экспериментальной работе [11]. Сплошная линия соответствует зависимости  $\nu(T) = B \tanh^2(\Delta/2k_B T)$ , предложенной в [11]. Факт схожести зависимостей на рис.2а, рис.2б свидетельствует в пользу того, что в сдвиге линии ЯКР меди проявляется именно псевдощель. А раз это так, то появляется возможность селекции зависимости параметра псевдощели от волнового вектора. В самом деле, из выражения для энергии взаимодействия квадрупольного момента ядер с носителями тока (1) мы находим, что сдвиг линии ЯМР, в первом порядке теории возмущений по состояниям электронной подсистемы, определяется выражением

$$\delta\nu_{NQR} = \frac{\nu_0}{N} \sum_k \langle c_{k,\sigma}^+ c_{k+Q,\sigma} \rangle. \quad (10)$$

После подстановки (9) в (10) видно, что вклад в сдвиг линии ЯКР при тетрагональной симметрии кристаллической решетки дадут лишь такие компоненты  $D_k$ , которые инвариантны относительно замены  $k_x$  на  $k_y$  и обратно. В частности, сдвига линии ЯКР ожидать не следует, если зависимость от волнового вектора будет иметь вид  $D_{k,Q} = D(T)(\cos k_x a - \cos k_y a)$ , как это предполагается в ряде возможных сценариев псевдощелевого состояния [3].

Существенно при этом, что параметры  $D$ , определенные из фотоэмиссионных данных и из сдвига линии ЯКР, оказались одного порядка величины.

Далее следует, что параметр сдвига  $\nu_0$  в формуле (10) оказался мал (см. подпись к рис.2) относительно валентного вклада от  $|x^2 - y^2\rangle$  состояния  $3d$ -электронов. С одной стороны, это можно попытаться объяснить тем, что доля состояний меди в функции Ванье мала, так как в  $YBa_2Cu_4O_8$  носители главным образом распределены по позициям кислорода. С другой стороны, трудно поверить, что относительная доля состояний меди не достигает и одного процента. Это противоречит сложившимся представлениям о происхождении сдвига Найта и ядерной релаксации в ВТСП (см., например, обзоры [15, 16]). Для объяснений величины сдвига Найта и ядерной релаксации,

как известно, необходимы константы сверхтонкой структуры. Их значения примерно такие же, как и в родительских соединениях (например, в  $YBa_2Cu_3O_6$  или  $La_2CuO_4$ ) и, следовательно, доля  $3d$ -состояний меди типа  $|x^2 - y^2\rangle$  в функциях Ванье достаточно велика. Это обстоятельство наводит на мысль о том, что сдвиг линии ЯКР меди в  $YBa_2Cu_4O_8$  является не статическим, а динамическим. То есть сдвиг линии ЯМР связан не с первым порядком теории возмущений по состояниям электронной подсистемы, а со вторым, который, очевидно, будет содержать четные функции параметра псевдощели, а также и другие корреляционные функции, включая сверхпроводящие. Таким образом, отсутствие сдвига первого порядка, определяемого формулой (10), следует рассматривать в пользу зависимости типа  $D_k = D_0(\cos k_x a - \cos k_y a) + D_2(\cos 2k_x a - \cos 2k_y a) + \dots$ , а зависимость псевдощели от волнового вектора типа  $D_k = D_0(\cos k_x a - \cos k_y a)^2$ , предложенную в [4], отбросить, как противоречащую данным ЯКР/ЯМР. При этом отклонение фотоэмиссионных данных на рис.1а от зависимости  $(\cos k_x a - \cos k_y a)$  можно рассматривать как следствие вкладов от высших гармоник ( $D_2$  и т. д.).

В заключение подчеркнем, что проведенное рассмотрение не исключает вклада волн спиновых плотностей в псевдощелевое состояние дырочных ВТСП. Положение линии ЯКР “не реагирует” на них. Не реагирует положение линии ЯКР в первом приближении теории возмущений и на компоненты параметра порядка зарядово-токовых волн, не инвариантных относительно вращений кристалла. Если бы зависимость псевдощели от волнового вектора была бы  $D_k = D_0(\cos k_x a - \cos k_y a)^2$ , как предложено в работе [4], то сдвиг линии ЯКР был бы порядка десяти процентов от значения частоты ЯКР. Согласно эксперименту [11], он на два порядка меньше. Можно надеяться, что данное сообщение будет стимулировать дальнейшие экспериментальные исследования псевдощелевого состояния ВТСП.

Авторы благодарны М.Mali, J.Roos и А.В. Дуглаву за обсуждение экспериментальных данных по ЯКР меди в ВТСП. Работа М.В. поддержана грантами Swiss National Science Foundation, Grant # IB7420-110784 и Российского фонда фундаментальных исследований, грант # 06-0217197-а.

1. М. В. Садовский, УФН **171**, 539 (2001).
2. M. R. Norman, D. Pines, and C. Kallin, Adv. Phys. **54**, 715 (2005).

3. M. R. Norman, A. Kanigel, M. Randeria et al., Phys. Rev. B **76**, 174501 (2007).
4. C. M. Varma and Lijun Zhu, Phys. Rev. Lett. **98**, 177004 (2007).
5. A. V. Chubukov, M. R. Norman, A. J. Millis, and E. Abrahams, Phys. Rev. B **76**, 180501(R) (2007).
6. P. A. Lee, T. M. Rice, and P. W. Anderson, Phys. Rev. Lett. **31**, 462 (1973).
7. Е. З. Кучинский, М. В. Садовский, ЖЭТФ **103**, 415 (2006); JETP **103**, 415 (2006).
8. M. Eremin, I. Eremin, and S. Varlamov, Phys. Rev. B **64**, 214512 (2001).
9. T. Kondo, T. Takeuchi, A. Kaminski et al. Phys. Rev. Lett. **98**, 267004 (2007).
10. M. R. Norman, H. Ding, M. Randeria et al., Nature **392**, 157 (1998).
11. M. Mali, J. Roos, H. Keller et al., Phys. Rev. B **65**, 184518 (2002).
12. Ю. В. Копаев, УФН **159**, 567 (1989).
13. I. Eremin, M. Eremin, S. Varlamov et al., Phys. Rev B **56**, 11305 (1997); С. В. Варламов, М. В. Еремин, И. М. Еремин, Письма в ЖЭТФ **66**, 533 (1997).
14. M. R. Norman, Phys. Rev. B **63**, 092509 (2000).
15. H. Monien, D. Pines, and C. P. Slichter, Phys. Rev. B **41**, 11120 (1990).
16. H. Monien, D. Pines, and M. Takigawa, Phys. Rev. B **43**, 258 (1991).