

Влияние межслойных одночастичных перескоков на температуру перехода в сверхпроводящее состояние

И. А. Макаров⁺¹⁾, С. Г. Овчинников^{+*2)}

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

* Сибирский государственный аэрокосмический университет им. М.Ф. Решетнева, 660014 Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 11 февраля 2011 г.

Известно, что для ВТСП купратов существует зависимость температуры перехода в сверхпроводящее состояние от количества CuO_2 -слоев в элементарной ячейке. Очевидным следствием многослойности является возможность межслойных перескоков. Полагая, что межслойные перескоки задаются параметром $t_{\perp}(\mathbf{k}) = t_{\perp}(\cos(k_x) - \cos(k_y))^2$, на примере двухслойного купрата мы получаем спектр квазичастичных возбуждений в сверхпроводящем состоянии в рамках $t - t' - t'' - t_{\perp} - J^*$ -модели в рамках обобщенной теории среднего поля. Оказалось, что межслойные перескоки не создают дополнительного механизма куперовского спаривания и не повышают T_c . На концентрационной зависимости температуры перехода в сверхпроводящее состояние межслойное расщепление верхней хаббардовской зоны квазичастиц проявляется в виде двух пиков с температурами, меньшими максимальной T_c в однослойном купрате. Выявлено, что межслойные магнитные корреляции антиферромагнитного характера подавляют межслойное расщепление, что вероятно и приводит к единой концентрационной зависимости T_c для однослойных и двухслойных купратов.

1. Вопрос о механизме сверхпроводимости в ВТСП купратах остается до сих пор одним из наиболее острых в физике конденсированного состояния. На сегодняшний день самым вероятным кандидатом на роль механизма сверхпроводимости представляется спаривание за счет антиферромагнитного обмена в CuO_2 -плоскости. Однако в рамках этого механизма пока не удается объяснить некоторые важные эффекты. В частности, непонятно большое различие в температуре перехода в сверхпроводящее состояние (T_c) у соединений с одинаковым числом слоев ($\text{La}_2\text{Sr}_{2-x}\text{CuO}_4 - 40\text{ K}$, $\text{HgBa}_2\text{CuO}_4 - 90\text{ K}$), а также рост T_c при увеличении числа слоев до $n = 3$ во всех семействах купратов [1]. Различие T_c для однослойных купратов связывается с наличием или отсутствием дефектов в структуре, со степенью искривленности CuO_2 -плоскости [2]. Зависимость T_c от количества CuO_2 -слоев может быть связана как с изменением дефектности структуры при добавлении еще одного слоя, так и непосредственно с процессами, характерными только для многослойных систем. В данной работе рассматривается наиболее очевидный и важный из таких процессов – перескоки дырок из одного слоя в другой. Для того чтобы выяснить, как влияют межслойные перескоки на T_c без подмешивания других эффектов, мы исследовали сверхпроводящую фазу двухслойного купрата типа

YBCO. Стехиометрическому составу двухслойного купрата соответствует одна дырка в каждой CuO_2 -плоскости. За исключением отсутствия одного атома апического кислорода каждый слой повторяет элементарную ячейку соединения $\text{La}_2\text{Sr}_{2-x}\text{CuO}_2$, электронная структура которого подробно изучена в работах [3, 4]. Данный факт определяет наш подход к изучению рассматриваемой двухслойной системы: мы предполагаем, что добавление второго медно-кислородного слоя не меняет электронную структуру CuO_2 -слоя, но появляется возможность перескоков квазичастиц между слоями, что приводит к расщеплению зон одного слоя на связывающую и антисвязывающую зоны (“bilayer splitting”) [5–11].

2. В своем исследовании мы отталкиваемся от $t - t' - t'' - t_{\perp} - J^*$ -модели ($t - J$ -модель [12] с учетом соседей до третьей координационной сферы и с трехцентровыми перескоками в плоскости, а также межслойными перескоками), которая в режиме сильных электронных корреляций является эффективной низкоэнергетической моделью купратов. Гамильтониан $t - t' - t'' - t_{\perp} - J^*$ -модели в случае двухслойного купрата в представлении операторов Хаббарда $X_f^{\sigma S}$, имеет вид

$$\begin{aligned}
 H_{t-t'-t''-t_{\perp}-J^*} = & \sum_{f\alpha\sigma} (\varepsilon_1 - \mu) X_{f\alpha}^{\sigma\sigma} + \sum_{f\alpha} (\varepsilon_2 - 2\mu) X_{f\alpha}^{SS} + \\
 & + \sum_{fg\alpha\sigma} t_{fg} X_{f\alpha}^{S\sigma} X_{g\alpha}^{\sigma S} + \sum_{fg\alpha\sigma} J_{fg} (X_{f\alpha}^{\sigma\bar{\sigma}} X_{g\alpha}^{\bar{\sigma}\sigma} - X_{f\alpha}^{\sigma\sigma} X_{g\alpha}^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}) -
 \end{aligned}$$

¹⁾ e-mail: macplay@mail.ru

²⁾ e-mail: sgo@iph.krasn.ru

$$- \sum_{mln\alpha\sigma} \frac{\tilde{t}_{ml}\tilde{t}_{ln}}{E_{ct}} (X_{m\alpha}^{S\sigma} X_{l\alpha}^{\sigma\bar{\sigma}} X_{n\alpha}^{\bar{\sigma}S} - X_{m\alpha}^{S\sigma} X_{l\alpha}^{\bar{\sigma}\sigma} X_{n\alpha}^{\sigma S}) + H_{bil}. \quad (1)$$

Здесь индекс α указывает на верхнюю (u) или нижнюю (d) CuO_2 -плоскость, $J_{fg} = 2\tilde{t}_{fg}^2/E_{ct}$ – параметр эффективного обменного взаимодействия за счет перескоков в нижнюю хаббардовскую зону и обратно, t_{fg} – межъячеечные внутризонные перескоки между ячейками, \tilde{t}_{fg} – межъячеечные межзонные перескоки между ячейками, E_{ct} – диэлектрическая щель с переносом заряда, ϵ_1 и ϵ_2 – энергии состояний ячейки с одной и двумя дырками. Межслойные перескоки учитываются путем включения в гамильтониан соответствующего слагаемого

$$H_{bil} = \sum_{f_u f_d \sigma} t_{\perp}(f_u, f_d) (X_{f_u}^{S\sigma} X_{f_d}^{\sigma S} + \text{h.c.}), \quad (2)$$

где коэффициент $t_{\perp}(f_u, f_d)$ представляет собой фурье-образ величины $t_{\perp}(\mathbf{k}) = t_{\perp}(\cos(k_x) - \cos(k_y))^2$ и определяет зависимость величины интеграла перескока между слоями от расстояния до ячейки в соседней плоскости, в которую осуществляется перескок. Характерная зависимость $t_{\perp}(\mathbf{k})$ от двумерного волнового вектора получена из зонных расчетов [13] в соответствии с эффективным перекрытием d_x -орбиталей меди через реальное перекрытие s -орбиталей и подтверждена экспериментами ARPES [6, 7]. Для каждого CuO_2 -слоя мы используем параметры $t - t' - t'' - J^*$ -модели, вычисленные в рамках LDA+GTB метода (первопринципные LDA расчеты + обобщенный метод сильной связи) в работе [4]. Спектр носителей тока (дырок) и поверхность Ферми в нормальной фазе с бислойным расщеплением в такой модели исследованы в работе [5]. Здесь мы в рамках зонной структуры [5] рассматриваем сверхпроводящую фазу в теории обобщенного среднего поля.

3. Для вычисления энергетических характеристик, таких как дисперсия и сверхпроводящая щель, мы используем уравнение движения для двухвременной запаздывающей внутрислойной функции Грина $G_{k\sigma}^u = \langle X_k^{\sigma S} | X_k^{S\sigma} \rangle$. Полученное с помощью метода неприводимых операторов Мори [4, 14–18] уравнение движения содержит высшие функции Грина, которые проектируются на базис нормальных, $G_{k\sigma} = \langle X_k^{\sigma S} | X_k^{S\sigma} \rangle$, и аномальных, $F_{k\sigma} = \langle X_{-k}^{S\bar{\sigma}} | X_k^{S\sigma} \rangle$, функций Грина. В результате получаем аномальные средние $B_q = \langle X_q^{\sigma S} X_{-q}^{\bar{\sigma}S} \rangle$, аномальные межслойные средние $B_{\perp q} = \langle X_{(u)q}^{\sigma S} X_{(d)-q}^{\bar{\sigma}S} \rangle$ и энергетическую щель, которая включает в себя все возможные взаимодействия, приводящие к потенциальному спариванию двух частиц:

$$\Delta_k = -\frac{1}{N} \frac{1}{p_{\sigma} + x} \sum_q \left[\left(2t_q - p_{\sigma}(J_{k+q} + J_{k-q}) + 2p_{\sigma} \frac{\tilde{t}_q^2}{E_{ct}} - 4(p_{\sigma} + x) \frac{\tilde{t}_k \tilde{t}_q}{E_{ct}} \right) B_q + 2\tilde{t}_{\perp q} B_{\perp q} \right], \quad (3)$$

где p_{σ} является числом заполнения одночастичного состояния, x – количество допированных дырок на одну элементарную ячейку, а выражение

$$\tilde{t}_{\perp q} = (p_{\sigma} + x) t_{\perp} (\cos(q_x) - \cos(q_y))^2 \left(1 + \frac{3}{2} \frac{C_{\perp}}{(p_{\sigma} + x)^2} \right) \quad (4)$$

определяет бислойное расщепление квазичастичной зоны одного CuO_2 -слоя, в котором $C_{\perp} = \langle X_{f_u}^{\sigma\bar{\sigma}} X_{f_d}^{\bar{\sigma}\sigma} \rangle$ – межслойный спиновый коррелятор. Первая часть выражения (3) связана с куперовским спариванием внутри CuO_2 -плоскости и была получена в работах [15, 16, 19]. Появление второй части является следствием включения перескоков между CuO_2 -слоями. Оба слагаемых пока сохраняют возможность для спариваний с любым типом симметрии. Выражение (3) справедливо для обеих CuO_2 -плоскостей, поскольку сверхпроводящие щели для верхнего и нижнего слоев полностью идентичны и по модулю, и по фазе (метод определения общего вида щели в многослойных соединениях подробно описан в работе [20]). Дисперсия зон в сверхпроводящем состоянии задается следующими законами:

$$E_k^{1,2} = \pm \sqrt{(\xi_k + \tilde{t}_{\perp k})^2 + \Delta_k^2}, \quad (5)$$

$$E_k^{3,4} = \pm \sqrt{(\xi_k - \tilde{t}_{\perp k})^2 + \Delta_k^2},$$

где ξ_k – дисперсия нормальной фазы с учетом кинематических и спиновых корреляторов. Принимая во внимание $d_{x^2-y^2}$ -симметрию щели $\Delta_k = (\Delta_0/2)(\cos(k_x) - \cos(k_y))$ в приближении обмена J_{01} между ближайшими соседями, мы преобразуем уравнение на T_c к виду

$$1 = \frac{1}{N} p_{\sigma} J_{01} \sum_q \frac{(\cos(k_x) - \cos(k_y))^2}{2} \times \left(\frac{1}{\xi_q + \tilde{t}_{\perp q}} \tanh \frac{\xi_q + \tilde{t}_{\perp q}}{2kT} + \frac{1}{\xi_q - \tilde{t}_{\perp q}} \tanh \frac{\xi_q - \tilde{t}_{\perp q}}{2kT} \right). \quad (6)$$

4. Решение уравнения (6) для зависимости T_c от x имеет неожиданный вид для сверхпроводящей фазы ВТСП купратов. Известно, что для всех купратов сверхпроводящая область фазовой диаграммы характеризуется одним максимумом T_c , который и соответствует оптимальному уровню допирования. В

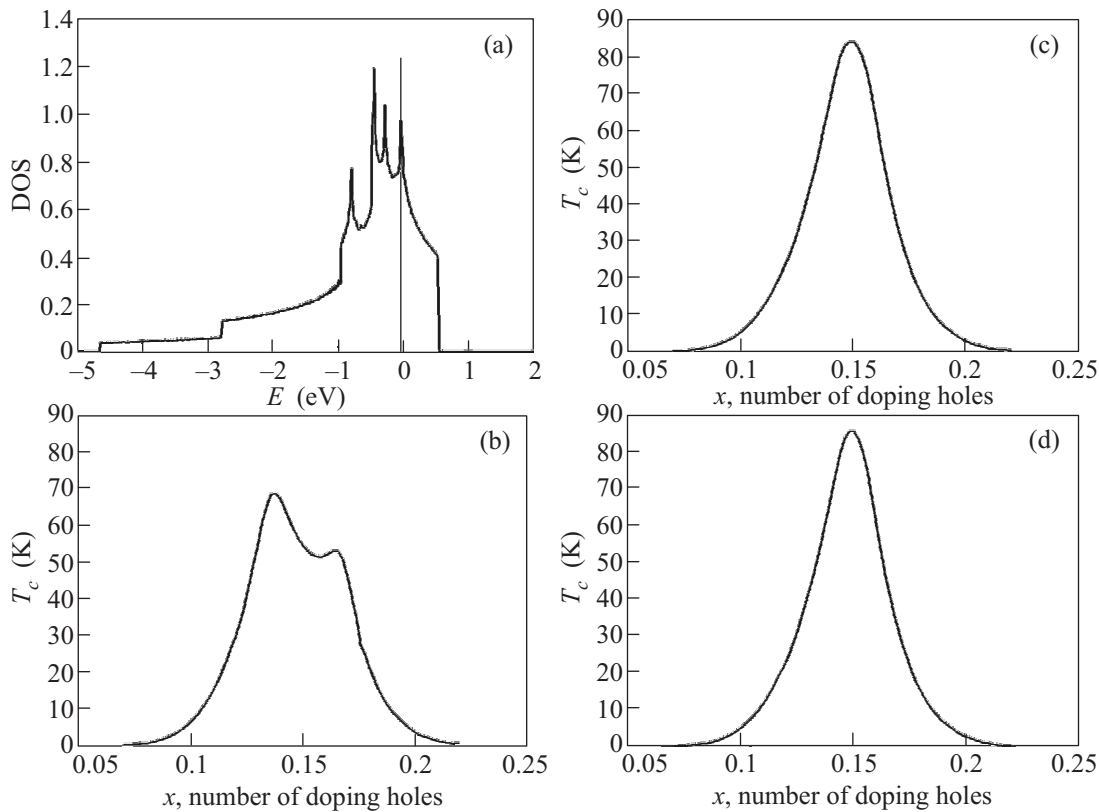


Рис.1. (a) Плотность состояний при $x = 0.125$ и $t_{\perp} = 0.1$ эВ для двухслойного купрата (вертикальная линия обозначает уровень химпотенциала). Зависимость T_c от x для двухслойного купрата при b) $t_{\perp} = 0.1$ эВ; (c) $t_{\perp} = 0.02$ эВ; (d) Зависимость T_c от x для однослойного купрата

двухслойных купратах для $t_{\perp} = 0.1$ эВ хорошо видны два максимума для T_c (рис.1b). Происхождение этих максимумов вполне понятно. Вследствие бислойного расщепления вместо одной зоны для одной CuO_2 -плоскости появляются две зоны, связывающая и антисвязывающая, из-за чего в плотности состояний наблюдается две особенности ван Хова (рис.1a) [5, 21]. С изменением допирования пики в плотности состояний смещаются и меняется их интенсивность, однако сама двухпиковая структура остается. Совпадение уровня химического потенциала с каждой из особенностей ван Хова дает свой максимум в T_c . Достаточно большой внутриячеечный межплоскостной интеграл перескока $t_{\perp} = 0.1$ эВ приводит к большому расщеплению зон и, как следствие, большой разнесенности максимумов по уровню допирования, им соответствующему. Так, первый максимум приходится на $x = 0.125$, а второй – на $x = 0.178$. При уменьшении бислойного расщепления максимумы сближаются, но остаются различимыми вплоть до $t_{\perp} = 0.05$ эВ. Далее мы видим только один широкий максимум, который с уменьшением t_{\perp} сужается (рис.1c) и при $t_{\perp} = 0.01$ эВ его уже невозможно

отличить от концентрационной зависимости T_c для однослойных купратов (рис.1d). Максимальная величина T_c для двухслойных купратов меньше, чем для однослойных. T_c однослойных соединений является пределом роста максимальной T_c двухслойных при уменьшении связи между CuO_2 -слоями. Главным фактором, препятствующим возрастанию T_c с увеличением числа слоев, служит коэффициент $1/2$ перед суммой аномальных средних связывающей и антисвязывающей зон в выражении (6), в то время как дополнительных механизмов спаривания по сравнению с однослойным соединением не появилось.

Абсолютная величина максимумов в T_c также меняется, что сперва кажется странным. Однако на самом деле есть даже два фактора, влияющих на абсолютную величину T_c . Во-первых, бислойное расщепление сказывается не только на разнесении энергии зон, но и на различии в наборе волновых векторов, формирующих контур Ферми для определенной зоны. Другими словами, расщепление зоны по энергии происходит со смещением по волновым векторам. Следовательно, слагаемые (в сумме по \mathbf{q}) в уравнении на T_c (6), дающие наибольший вклад в формирование

одного максимума, отличаются от слагаемых, формирующих второй максимум, прежде всего по набору \mathbf{q} . И поскольку в сумме присутствует множитель с разницей косинусов, различные наборы волновых векторов вносят разный вклад. Во-вторых, в зависимости от расположения хипотенциала меняется и количество вкладов в сумму по \mathbf{q} от различных областей \mathbf{k} -пространства. Так, например, в точке квантового фазового перехода при $x = 0.125$ наибольшие вклады в сумму дает нодальное направление, которое пересекается хипотенциалом, и непосредственно седловая точка (точка касания антисвязывающей зоны с хипотенциалом), лежащая на направлении $(\pi, \pi) - (\pi, 0)$. В точке второго квантового фазового перехода ($x = 0.178$) хипотенциал опять же пересекает зону в нодальном направлении, касается связывающей зоны, но теперь он дополнительно пересекает еще антисвязывающую зону, поэтому значительных вкладов в сумму по \mathbf{q} будет больше, а значит, и температура должна уменьшиться.

5. В многослойных соединениях помимо межплоскостных перескоков присутствуют также магнитные корреляции вдоль c -оси. Пренебрегая межъячеечными спиновыми корреляциями из-за большого расстояния между соседними бислоями по оси c (0.8 нм) по сравнению с расстоянием внутри бислоя (0.3 нм), мы оставляем только межслоевой внутриячеечный спиновый коррелятор. Величина такого коррелятора выяснялась в результате точной диагностики двухслойного кластера. Рассматривалась ячейка двухслойного купрата, состоящая из двух CuO_5 -пирамид, в которой точно учитывались все взаимодействия. В полученном базисе двухчастичных состояний, когда в каждом слое находится одна дырка, основное состояние имеет тип синглета вида $(1/\sqrt{2}) (a_{fu\downarrow}^+ a_{fd\uparrow}^+ + a_{fd\downarrow}^+ a_{fu\uparrow}^+)$. Данное состояние соответствует антиферромагнитному упорядочению спинов в соседних слоях. Экспериментально данное антиферромагнитное упорядочение между слоями подтверждено нейтронной дифракцией в работе [22]. Наш расчет для недопированного случая при $T = 0$ показал, что характерный межслоевой спиновый коррелятор $\langle X_{(u)}^{\sigma\bar{\sigma}} X_{(d)}^{\bar{\sigma}\sigma} \rangle$ равен -0.1 (напомним, что спиновая корреляционная функция для ближайших соседей внутри CuO_2 -слоя равна $C_{01} \approx -0.2$ [4, 23, 24]). Спиновые корреляции входят в энергию связи между CuO_2 -слоями через формулу (4), и с первого взгляда кажется, что их присутствие будет увеличивать эту энергию. Однако из-за отрицательного знака коррелятора этот вклад будет уменьшать энергию связи, то есть фактически антиферромаг-

нитные корреляции подавляют бислоеное расщепление. Действительно, если мы предположим антиферромагнитное упорядочение спинов в соседних CuO_2 -слоях ячейки, то это будет значить, что в одном слое занято одночастичное состояние со спином вверх, а в другом – со спином вниз. Это в свою очередь накладывает ограничение на вид возможных квазичастиц, а значит, на возможность перескоков между слоями: квазичастица со спином вверх, например, не может перейти в соседнюю плоскость, поскольку в последней занято одночастичное состояние с таким спином и, следовательно, возможны лишь внутрислоевые квазичастичные переходы с противоположным спином.

На рис.2 видно, насколько сильно антиферромагнитные корреляции могут уменьшать бислоеное расщепление. Рис.2а изображает зонную структуру для системы, в которой связь между слоями обусловлена только квазичастичными перескоками. В другом предельном случае, $C_{\perp} = -0.22$ (рис.2с), когда для недопированного состава модуль величины спинового коррелятора уже близок к максимально возможному, то есть к 0.25, расщепление зон может исчезнуть вообще. Влияние магнитных корреляций на величину бислоевого расщепления естественно сказывается и на концентрационной зависимости T_c . Увеличение магнитных корреляций до величины $C_{\perp} = -0.22$ приведет к полному исчезновению двухпиковой структуры $T_c(x)$. Таким образом, механизмом, сохраняющим форму зависимости $T_c(x)$ с одним максимумом, является именно антиферромагнитный обмен между слоями CuO_2 .

Допирование увеличивает количество носителей и, как следствие, кинетическую энергию системы, за счет чего происходит размытие магнитных корреляций. Этот факт подтвержден расчетом зависимости спиновых корреляторов для однослойного купрата от допирования x [4]. Очевидно, что межслоевой спиновый коррелятор тоже будет уменьшаться при увеличении концентрации допированных носителей. Кроме того, будет уменьшаться его вклад в бислоеное расщепление за счет знаменателя $p_{\sigma} + x$, что повлечет за собой увеличение связи между слоями и увеличение бислоевого расщепления. Это хорошо видно в ARPES снимках поверхности Ферми. Наблюдать “bilayer splitting” удалось именно для передопированных образцов [25].

Таким образом, привычная параболическая форма фазовой диаграммы сверхпроводящего состояния для двухслойных купратов может быть не только следствием ограничения характерной величины интегралов перескоков, но и следствием сильных антиферромаг-

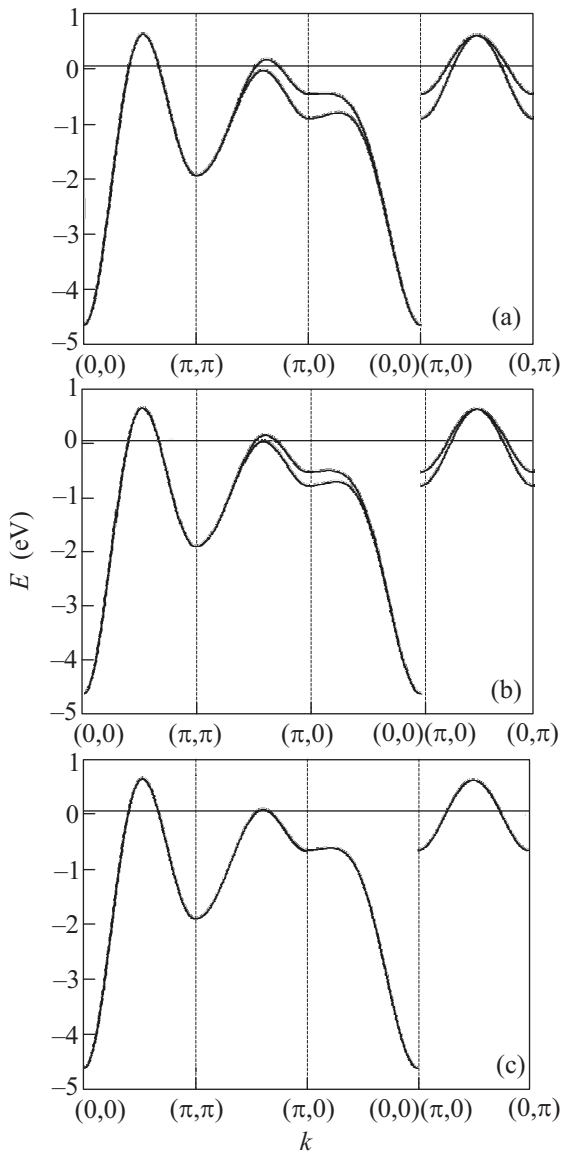


Рис.2. Зонная структура при разной величине межслойных антиферромагнитных корреляций (а): $C_{\perp} = -0.01$; (б) $C_{\perp} = -0.1$; (в) $C_{\perp} = -0.22$

нитных корреляций, подавляющих межслойные перескоки.

6. Схожесть формы концентрационной зависимости T_c для двухслойных купратов с формой $T_c(x)$ для однослойных может быть объяснена значительным подавлением бислойного расщепления, обусловленного перескоками квазичастиц между CuO_2 -слоями, внутриячеечными межслойными магнитными корреляциями антиферромагнитного типа. Отсутствие эффекта увеличения максимальной T_c с включением межслойного перескока говорит о том, что ключевую роль в формировании высокотемпературной сверхпроводимости перескоки квазичастиц меж-

ду слоями CuO_2 играть не могут. К такому же выводу приходят и экспериментаторы, основываясь на зависимостях T_c от давления в направлениях трех осей кристалла. Оказалось, что T_c очень слабо зависит от давления в направлении, перпендикулярном CuO_2 -плоскости, а значит слабо зависит и от расстояния между плоскостями [26–28]. Анализ данных $\text{La}_2\text{Sr}_{2-x}\text{CuO}_4$ по давлению в работе [2] приводит к выводу о том, что слабая зависимость T_c от числа слоев CuO_2 в ячейке связана с влиянием неоднородностей и дефектов, поскольку известно, что соединения с высокой T_c имеют наиболее “правильную структуру” в отличие от систем с относительно маленькой T_c , в которых присутствуют различного рода искажения.

Работа выполнена при финансовой поддержке программы “Квантовая физика конденсированных сред” Президиума РАН №18.7, интеграционного проекта СОРАН-УРОРАН №40, гранта Российского фонда фундаментальных исследований # 09-02-00127, гранта Президента РФ МК-1683.2010.2 и проекта ФЦП ГК П891.

1. X. J. Chen and H. Q. Lin, Phys. Rev. B **69**, 104518 (2004).
2. J. S. Schilling, in *Treatise on High- T_c Superconductivity*, Ed. J. R. Schrieffer, Springer, Berlin, 2006, Chap. High pressure effects.
3. M. Korshunov, V. Gavrichkov, S. Ovchinnikov et al, Phys. Rev. B **72**, 165104 (2005).
4. M. Korshunov and S. Ovchinnikov, Eur. Phys. J. B **57**, 271 (2007).
5. С. Г. Овчинников, И. А. Макаров, Е. А. Шнейдер, ЖЭТФ **139**, 334 (2011).
6. D. L. Feng, N. P. Armitage, D. H. Lu et al., Phys. Rev. Lett. **86**, 5550 (2001).
7. Y.-D. Chuang, A. D. Gromko, and A. Fedorov, Phys. Rev. Lett. **87**, 117002 (2001).
8. A. A. Kordyuk, S. V. Borisenko, M. S. Golden et al., Phys. Rev. B **66**, 014502 (2002).
9. S. Sahrakorpi et al., Phys. Rev. Lett **95**, 157601 (2005).
10. T. Kondo, R. Khasanov, Y. Sassa et al., Phys. Rev. B **80**, 100505 (2009).
11. A. Kaminski, S. Rosenkranz, H. M. Fretwell et al., Phys. Rev. B **73**, 174511 (2006).
12. Л. П. Булаевский, Э. Л. Нагаев, Д. Л. Хомский, ЖЭТФ **54**, 1562 (1968).
13. O. K. Andersen et al., J. Phys. Chem. Solids **56**, 1573 (1995).
14. H. Mori, Prog. Theor. Phys. **33**, 423 (1965).
15. В. В. Вальков et al., Письма в ЖЭТФ **75**, 450 (2002).

16. В. В. Вальков, Д. М. Дзедзисашвили, *ЖЭТФ* **127**, 686 (2005).
17. N. M. Plakida and V. S. Oudovenko, *Phys. Rev. B* **59**, 11949 (1999).
18. R. Haun, A. F. Barabanov, and J. Schulenburg, *Z. Phys. B* **102**, 359 (1997).
19. Е. И. Шнейдер, С. Г. Овчинников, *Письма в ЖЭТФ* **83**, 462 (2006).
20. K. Byczuk and J. Spalek, *Phys. Rev. B* **53**, R518 (1996).
21. A. F. Barabanov, L. A. Maksimov, and L. E. Zhukov, *Physica C* **212**, 375 (1993).
22. J. M. Tranquada, D. E. Cox, W. Kunmann et al., *Phys. Rev. Lett.* **60**, 156 (1988).
23. A. Barabanov and O. Starykh, *J. Phys. Soc. Jpn* **61**, 704 (1992).
24. А. Ф. Барабанов, В. М. Березовский, *ЖЭТФ* **106**, 1156 (1994).
25. D. L. Feng, N. P. Armitage, D. H. Lu et al., *Phys. Rev. Lett.* **86**, 5550 (2001).
26. U. Welp, M. Grimsditch, S. Fleshler et al., *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2130 (1992).
27. C. Meingast, O. Kraut, T. Wolf et al., *Phys. Rev. Lett.* **67**, 1634 (1991).
28. M. Kund and K. Andres, *Physica C* **205**, 32 (1993).