Письма в ЖЭТФ, том 96, вып. 2, с. 110 – 113 © 2012 г. 25 июля

Перенормировка параметров зоны из-за взаимодействия с фононами в $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8-x}$ и определение параметров сверхпроводящей щели по температурной зависимости плотности сверхпроводящего тока в $YBa_2Cu_3O_7$

М. В. Еремин[1], *М. А. Малахов, Д. А. Сюняев*

Институт физики, Казанский (Приволжский) федеральный университет, 420008 Казань, Россия

Поступила в редакцию 15 мая 2012 г.

После переработки 14 июня 2012 г.

Предложено простое описание перенормировки параметров зоны проводимости в купратах из-за взаимодействия носителей тока с фононами. Анализируются изломы (кинки) в законе дисперсии квазичастиц в области оптической фононной моды (70 мэВ, соединение $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8-x}$) и данные по температурной зависимости плотности сверхпроводящего тока в $YBa_2Cu_3O_7$. Обсуждаются идеи новых экспериментов.

Проблема описания перенормировки параметров зоны проводимости из-за взаимодействия носителей тока с полем фононов в купратах привлекает пристальное внимание исследователей. Принципиальное наличие такого взаимодействия не вызывает сомнения. Вопрос состоит в том, как его описать. В экспериментальных работах [1, 2] предполагается, что это можно сделать путем модификации эффективных интегралов перескока следующим образом: $t_{\text{eff}} = te^{-\gamma E_p/\hbar\omega}$. Здесь E_p – энергия полярона, ω – эффективная частота дыхательной кислородной моды. Эта формула качественно объясняет факт наблюдения изотопического эффекта у лондоновской глубины проникновения в купратах при замене ^{16}O на ^{18}O. Однако при этом возникают трудности при описании изотопического сдвига критической температуры перехода в сверхпроводящее состояние (T_c). В самом деле, при уменьшении ширины зоны проводимости из-за поляронного эффекта плотность состояний возрастает. Следовательно, при замене ^{16}O на ^{18}O критическая температура должна возрастать, а не уменьшаться. Иными словами, знак изотопического сдвига T_c должен быть противоположен тому, который наблюдается в экспериментах. Для разрешения этого противоречия в работе [3] была выдвинута идея о том, что в купратах интегралы перескока между различными соседями ионов меди в плоскости CuO_2 имеют различные поляронные факторы. Так, если допустить, что интеграл перескока t_2 между вторыми соседями подавляется в несколько раз сильнее, чем t_1, то указанное выше противоречие может сняться. Однако до сих пор неясно, как реализовать эту идею (см. недавний обзор [4]). В серии работ по наблюдению эффектов электрон-фононного взаимодействия методом ARPES обсуждаются варианты многозонных моделей (см. [5] и ссылки в ней).

В настоящем сообщении мы хотим обратить внимание на другой возможный вариант описания перенормировки параметров зоны проводимости, позволяющий описать изломы в законе дисперсии квазичастиц, с учетом того, что параметры электрон-фононной связи различны в разных точках контура Ферми. Последнее вполне естественно для модели синглетно-коррелированной зоны проводимости [6–8].

После преобразования Фрелиха поправку к закону дисперсии носителей тока из-за взаимодействия с фононами удобно записать в виде

$$\sum_{k,\sigma,q,\mu} |g^{\mu}_{k,q}|^2 \frac{\hbar\omega_q}{(\varepsilon_k - \varepsilon_{k+q})^2 - (\hbar\omega_q)^2} \langle 1 - n_{k+q,\sigma}\rangle a^{+}_{k,\sigma} a_{k,\sigma}. \tag{1}$$

Здесь $a^{+}_{k,\sigma}$ ($a_{k,\sigma}$) – операторы рождения (уничтожения) квазичастиц в зоне проводимости, $n_{k+q,\sigma}$ – функции распределения Ферми, μ – индекс поляризации фононов. В случае пустой или полностью заполненной зоны среднее значение оператора (1) обращается в нуль, что следует из общих физических соображений. Известно, что наиболее сильными в купратах являются связи с продольными оптическими модами $\omega^{\mu}_q \approx 70$ мэВ, а носители тока главным образом распределены по позициям кислорода. Оператор электрон-фононной связи

$$H_1 = \sum_k g^{\mu}_{k,q}(b_{q,\mu} + b^{+}_{-q,\mu}) a^{+}_{k+q,\sigma} a_{k,\sigma} \tag{2}$$

с продольными колебаниями удобно записать в виде [8, 9]

[1] e-mail: meremin@ksu.ru

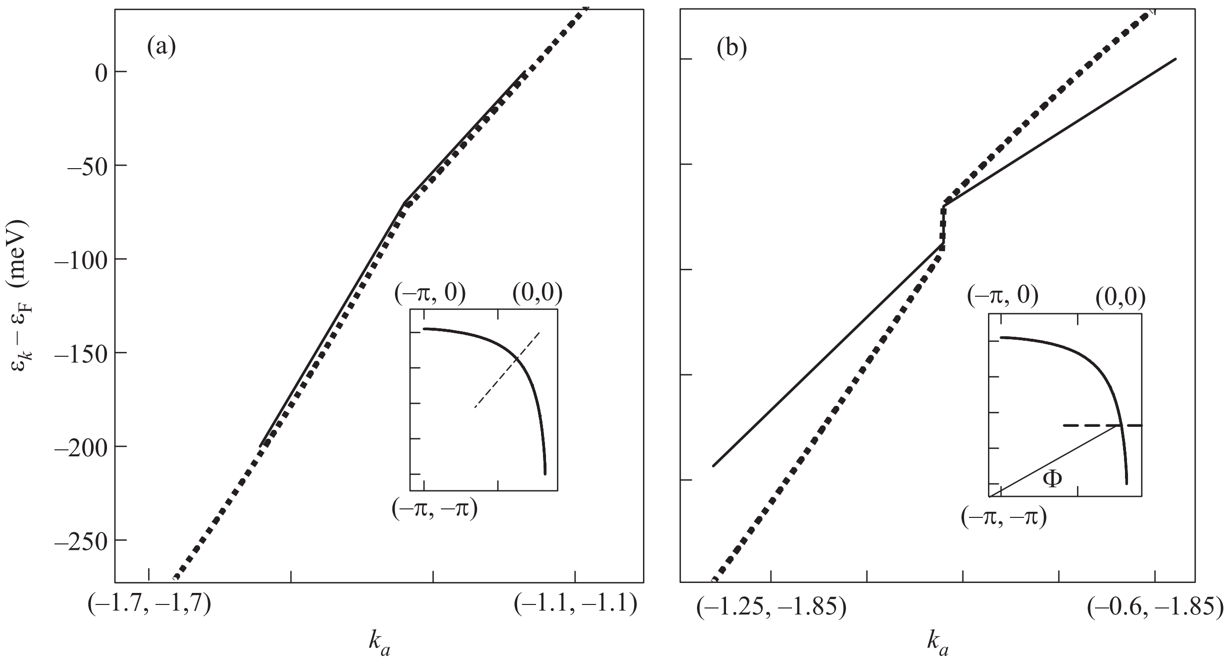

Рис. 1. Зависимости энергии квазичастиц от волнового вектора вдоль двух направлений зоны Бриллюэна: (a) – вдоль диагонали (нодальное направление); (b) – для направления, определяемого углом $\Phi = 27.5^\circ$ относительно направления k_x. Штриховые линии – расчет с параметрами зоны проводимости из [11] и $V_1 = 27$ мэВ, $V_2 = 40$ мэВ. Сплошные линии соответствуют экспериментальным данным [12, 13]

$$g^{\mu}_{k,q} = 2i\sqrt{\frac{\hbar}{2mN\omega_q}}\,\{g_1 + 2g_2[\cos k_x + \cos k_y + \\ + \cos(k_x+q_x) + \cos(k_y+q_y)]\}\sin\frac{q_\mu}{2}, \quad (3)$$

где g_1 и g_2 – параметры связи. Явный вид поправки к закону дисперсии квазичастиц после усреднения по волновым векторам оптических фононов приближенно определяется выражением

$$\Delta\varepsilon \approx -\frac{2}{m\omega^2}[3g_1g_2(\cos k_x + \cos k_y) + \\ + 4g_2^2\cos k_x\cos k_y + g_2^2(\cos 2k_x + \cos 2k_y)]. \quad (4)$$

Дисперсией оптической моды здесь пренебрегается. Из (4) видно, что к затравочному закону дисперсии $\varepsilon_k = 2t_1(\cos k_x+\cos k_y)+4t_2\cos k_x\cos k_y+2t_3(\cos 2k_x+ +\cos 2k_y)$... при $|\varepsilon_k-\varepsilon_F| \le 70$ мэВ из-за взаимодействия с фононами добавляется поправка, которая может быть представлена как перенормировка интегралов перескока типа

$$t_1^{\text{eff}} = t_1 - \frac{6V_1V_2}{\hbar\omega}\theta(\hbar\omega - |\varepsilon_k-\varepsilon_F|), \\ t_2^{\text{eff}} = t_2 - \frac{4V_2^2}{\hbar\omega}\theta(\hbar\omega - |\varepsilon_k-\varepsilon_F|), \quad (5) \\ t_3^{\text{eff}} = t_3 - \frac{2V_2^2}{\hbar\omega}\theta(\hbar\omega - |\varepsilon_k-\varepsilon_F|),$$

где $\theta(\hbar\omega - |\varepsilon_k-\varepsilon_F|)$ – тета-функция. Следует подчеркнуть, что механизм спаривания при выводе формул (5) нами не конкретизировался. Взаимодействие носителей тока с фононами имеет место при любом механизме спаривания. Для удобства здесь введены величины $V_1 = g_1/\sqrt{2m\omega}$ и т. п. Из (5) видно, что относительные изменения интегралов перескока t_2 и t_3 довольно велики по сравнению с t_1, так как для купратов $|t_1| \gg |t_2|$, $|t_1| \gg |t_3|$.

Кроме того, видно, что поправка к закону дисперсии квазичастиц из-за взаимодействия с фононами изменяет значения групповых скоростей, что приводит к "излому" графической зависимости энергии от волнового вектора (кинкам) [10]. Это обстоятельство позволяет нам оценить параметры V_1 и V_2 по имеющимся экспериментальным данным для $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8-x}$ (см. рис. 1).

Положение интересующего нас кинка имеет изотопический сдвиг по шкале энергии при замене ^{16}O на ^{18}O [12]. Все свидетельствует в пользу того, что он обусловлен именно связью с оптическими фононами ($\hbar\omega \approx 70$ мэВ). Параметры зоны и поверхности Ферми задавались в соответствии с данными фотоэлектронной спектроскопии [11] (в мэВ): $t_1 = 148.2$, $t_2 = -39.4$, $t_3 = 7.9$, $t_4 = 29.5$, $t_5 = -9.1$, $\varepsilon_F = 117$. Как видно из рис. 1a, эти параметры хорошо подходят для описания дисперсии вдоль диагонали зоны Бриллюэна. Вообще говоря, отличие от нее рассчитанной дисперсии вдоль другого направления (рис. 1b) указывает на необходимость корректировки набора параметров зоны [11]. Однако для наших целей (оценка параметров электрон-фононной связи) важно описать изменение наклонов (кинки), которые в обоих случаях достаточно хорошо воспроизводятся расчетом при $V_1 = 27$ мэВ и $V_2 = 40$ мэВ. Отметим, что определенное нами значение параметра электрон-фононной связи $V_1 = 27$ мэВ существенно уточняет имеющиеся теоретические оценки (см. таблицу), которые

Теоретические оценки параметра V_1 для дыхательной моды

V_1, мэВ	30	65	125	110
Ссылка	[14]	[15]	[16]	[17]

отличаются заметным разбросом значений. Члены с параметром V_2 в работах [14–17] не учитывались. Из (5) видно, что наличие параметра V_2 играет решающую роль в нашем рассмотрении.

Имевшая место неопределенность в выборе значений параметров электрон-фононной связи, естественно, приводила к различным выводам о роли фононного механизма спаривания в купратах [8, 15–17]. Наши оценки параметров V_1, V_2 следует рассматривать как “оценки сверху”, так как нами не учитывались возможные вклады в перенормировку параметров закона дисперсии из-за взаимодействия носителей тока с иными бозонными модами (парамагнонными, плазмонными и т.п.). Это обстоятельство, однако, не умаляет принципиальной значимости нашего результата. В самом деле, как видно из приведенной таблицы, имеющиеся в литературе оценки параметра V_1, как правило, в несколько раз больше нашей оценки. Это означает, что оценка эффективности фононного механизма теперь уменьшается на порядок величины. В связи с этим интересно найти решения уравнения типа БКШ для параметра порядка при найденных нами значениях параметров электрон-фононной связи. Проведенные нами численные решения уравнения

$$\Delta_k = -\frac{1}{N}\sum_{k',\mu}|g^{\mu}_{k,k-k'}|^2 \times \\ \times \frac{\hbar\omega^{\mu}_{k-k'}\theta(\hbar\omega^{D}_{k-k'} - |\varepsilon_k - \varepsilon_{\rm F}|)}{(\varepsilon_k - \varepsilon_{k'})^2 - (\hbar\omega_{k-k'})^2}\frac{\Delta_{k'}}{E_{k'}}\tanh\frac{E_{k'}}{2k_{\rm B}T} \quad (6)$$

показали, что критическая температура является довольно высокой. Более того, из-за зависимости $g^{\mu}_{k,k-k'}$ от k параметр порядка имеет зависимость от волнового вектора. Однако последний обладает симметрией s-типа, что не соответствует имеющимся экспериментальным данным. Это означает, что фононный механизм не является доминирующим в купратах. Наряду со взаимодействием через поле фононов существуют и иные механизмы спаривания квазичастиц. Согласно [18] и др. наиболее вероятными считаются суперобменное взаимодействие и взаимодействие носителей тока через спиновые флуктуации. Не выяснена пока роль экранированного кулоновского взаимодействия. Ниже мы приведем соображения о зависимости сверхпроводящей щели от волнового вектора в купратах, основанные на экспериментальных данных.

Для анализа относительной роли s-и d-компонент в параметре порядка полезно проанализировать данные для сверхпроводящих купратов с ромбической симметрией. В тетрагональном кристалле одновременное существование s- и d-компонент запрещено правилами отбора. Решение интегрального уравнения БКШ должно преобразовываться по одному из неприводимых представлений точечной группы симметрии первой зоны Бриллюэна. В случае ромбической симметрии кристалла s- и d-компоненты преобразуются по одному и тому же представлению. Поэтому оказывается возможным по экспериментальным данным узнать их относительную роль в параметре порядка и тем самым судить об относительной роли различных потенциалов спаривания. Наиболее подробная информация получена для $YBa_2Cu_3O_7$. На рис. 2 приведены результаты нашего расчета температурной зависимости плотности сверхпроводящего тока вдоль осей a и b в сопоставлении с экспериментальными данными [19]. Расчет проведен по формуле

$$\frac{1}{\lambda^2} = 4\pi\left(\frac{e}{c\hbar}\right)^2 \times \\ \times \sum_k \frac{d\varepsilon_k}{dk_x}\left[\frac{|\Delta_k|^2}{E_k^2}\frac{d\varepsilon_k}{dk_x} - \frac{(\varepsilon_k - \mu)}{2E_k^2}\frac{d|\Delta_k|^2}{dk_x}\right] \times \\ \times \left(\frac{1}{E_k} - \frac{d}{dE_k}\right)\tanh\frac{E_k}{2k_{\rm B}T}. \quad (7)$$

Ее детальный вывод изложен в работе [20]. Зависимость сверхпроводящей щели от волнового вектора феноменологически задавалась в виде

$$\Delta_k = \Delta_d(\cos k_x - \cos k_y)/2 + \Delta_s, \quad (8)$$

где $\Delta_d(T = 0) \approx 29$ мэВ, $\Delta_s(T = 0) \approx 5$ мэВ. Температурные зависимости обеих компонент считались одинаковыми $\left(\Delta_1(T) = \Delta_1 \tanh\left(1.75\sqrt{T_c/T - 1}\right)\right)$. Значения эффективных интегралов, определяющих поверхность Ферми, задавались так же, как в работе [21]. Интересно отметить, что полученная нами посредством анализа температурного хода плотности сверхпроводящего тока оценка $\Delta_s(T = 0) \approx 5$ мэВ хорошо согласуется с оценками по рассеянию нейтронов [21], по данным фотоэлектронной эмиссии ARPES [22], фазово-чувствительным методом [23] и с помощью рамановской спектроскопии [24].

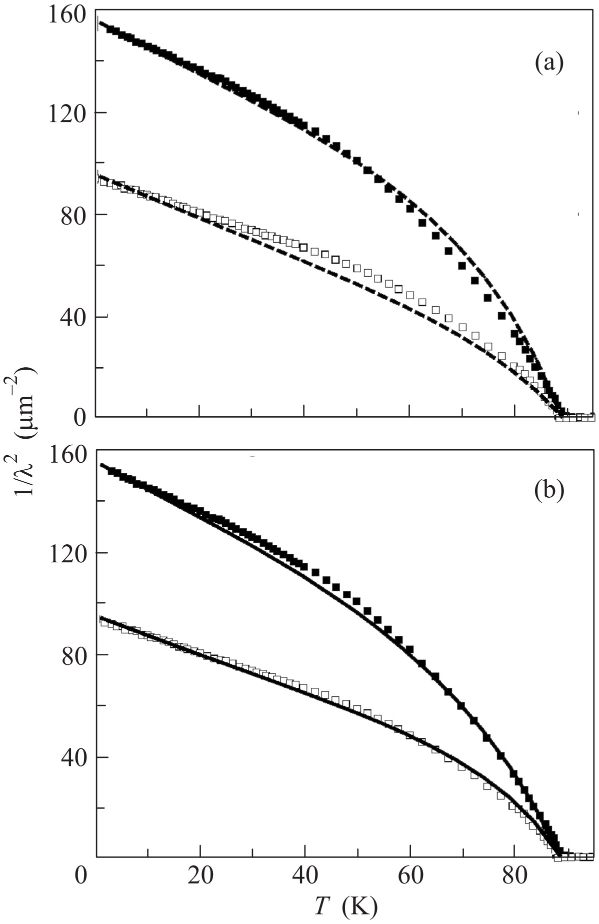

Рис. 2. Температурные зависимости плотности сверхпроводящего тока вдоль осей a и b кристалла $YBa_2Cu_3O_7$ из [19] (квадраты). Черные и белые квадраты отвечают направлениям вдоль осей b и a соответственно. (a) – Расчет по формуле (7) при $\Delta_d = 29$ мэВ, $\Delta_s = 0$ (штриховые линии). (b) – Расчет при $\Delta_d = 29$ мэВ, $\Delta_s = 5$ мэВ (сплошные линии)

Существенно, что из-за неоднородного подавления параметров зоны эффективные интегралы перескока осей t_1, t_2 и t_3 вдоль различных осей ромбической решетки кристалла перенормируются по-разному. Это обстоятельство можно использовать в экспериментальных исследованиях для получения важной информации о деталях перенормировки интегралов перескока.

В заключение укажем еще один возможный эксперимент, который мог бы дать дополнительную информацию по затронутой проблеме. Логично предположить, что параметры Δ_s и Δ_d обусловлены взаимодействиями различного типа. Поэтому при замене ^{16}O на ^{18}O изотопический сдвиг у компонент Δ_s и Δ_d должен быть разным. В связи с этим сравнительные экспериментальные исследования изотопических сдвигов в ромбических и тетрагональных кристаллах представляют значительный интерес.

Работа выполнена при частичной поддержке Swiss National Science Foundation, Grant # IZ7320 128242. М.В.Е. благодарен H. Keller и Б. И.Кочелаеву за полезные дискуссии.

1. G. M. Zhao, M. B. Hunt, H. Keller, and K. A. Muller, Nature **385**, 236 (1997).
2. G. M. Zhao, H. Keller, and K. Conder, J. Phys.: Condens. Matter **13**, R569 (2001).
3. A. Bussmann-Holder and H. Keller, Eur. Phys. J. B **44**, 487 (2005).
4. H. Keller and A. Bussmann-Holder, Advances in Condensed Matter Physics **2010**, 393526 (2010).
5. S. Johnston, F. Vernay, B. Moritz et al., Phys. Rev. B **82**, 064513 (2010).
6. F. C. Zhang and T. M. Rice, Phys. Rev. B **37**, 3759 (1988).
7. М. В. Еремин, С. Г. Соловьянов, С. В. Варламов, ЖЭТФ **112**, 1763 (1997).
8. S. Ishihara and N. Nagaosa, Phys. Rev. B **69**, 144520 (2004).
9. Е. И. Шнейдер, С. Г. Овчинников, Письма в ЖЭТФ **83**, 462 (2006).
10. A. Lanzara, P. V. Bogdanov, X. J. Zhou et al., Nature **412**, 510 (2001).
11. M. Eschrig and M. R. Norman, Phys. Rev. B **67**, 144503 (2003).
12. H. Iwasawa, J. F. Douglas, K. Sato et al., Phys. Rev. Lett. **101**, 157005 (2008).
13. T. Cuk, F. Baumberger, D. H. Lu et al., Phys. Rev. Lett. **93**, 117003 (2004).
14. M. V. Eremin, Z. Naturforsh **49**, 385 (1994).
15. J. Song and J. F. Annett, Phys. Rev. B **51**, 3840 (1995).
16. W. Sandvik, D. J. Scalapino, and N. E. Bickers, Phys. Rev. B **69**, 094523 (2004).
17. O. Rosch and O. Gunnarsson, Phys. Rev. Lett. **92**, 146403 (2004).
18. N. M. Plakida, *High-Temperature Cuprate Superconductors Experiment, Theory and Applications*, Springer, 2011.
19. D. A. Bonn and W. N. Hardy, in *Handbook of High-Temperature Superconductivity, Theory and Experiment* (ed. by J. R. Schrieffer and J. S. Brooks), Springer Science + Business Media, LLC, 2007, p. 145.
20. M. V. Eremin, I. A. Larionov, and I. E. Lyubin, J. Phys.: Condens. Matter **22**, 185704 (2010).
21. A. P. Schnyder, D. Manske, Ch. Mudry, and M. Sigrist, Phys. Rev. B **73**, 224523 (2006).
22. D. H. Lu, D. L. Feng, N. P. Armitage et al., Phys. Rev. Lett. **86**, 4370 (2001).
23. J. R. Kirtley, C. C. Tsuei, A. Ariando et al., Nature Physics **2**, 190 (2006).
24. M. Bakr, A. P. Schnyder, L. Klam et al., Phys. Rev. B **80**, 064505 (2009).