

АНГАРМОНИЗМ КОЛЕБАНИЙ КИСЛОРОДА И ФОРМИРОВАНИЕ СИЛЬНО КОРРЕЛИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ ВТСП

В.Ю.Ирхин, М.И.Кацнельсон, А.В.Трефилов ¹⁾

*Институт физики металлов УрО АН СССР
620219, Свердловск*

¹⁾ *Институт атомной энергии им. И.В.Курчатова
123182, Москва*

Поступила в редакцию 21 января 1991 г.

Рассмотрено формирование состояния псевдокондовской решетки в нормальной фазе ВТСП, обусловленное взаимодействием электронов проводимости с сильно ангармоническими атомными смещениями. Обсуждаются магнитные корреляции в этом состоянии и влияние на него дефектов.

Вопрос о роли корреляционных эффектов является одним из центральных в проблеме высокотемпературной сверхпроводимости металлооксидных соединений ¹. Высказываются точки зрения от утверждений о применимости зонной теории ² до постулирования полной неадекватности стандартного квазичастичного описания (теории Латтинджерской жидкости ³, маргинальной ферми-жидкости ⁴ и т. д.). Близость ВТСП к переходу металл - полупроводник, высокая чувствительность к легированию и ряд других аномалий резко отличают их от обычных металлических соединений и, по-видимому, свидетельствует о сильных корреляциях. Последние связываются как с хаббардовскими корреляциями и магнетизмом ¹, так и с зарядовыми флуктуациями ⁴ и электрон-решеточным взаимодействием в условиях сильного ангармонизма ^{5,6}. Недавние исследования $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ методом EXAFS дали прямые доказательства важной роли смещений кислорода в позициях O4 для сверхпроводимости ⁷ и сильной ангармоничности его колебаний ⁸. Ранее аномалии колебаний в слоях CuO_2 в T_c были обнаружены в экспериментах по каналированию ионов ⁹. В настоящей работе предлагается картина "псевдокондовской решетки", позволяющая связать эти данные с рядом известных особенностей ВТСП.

Аналогично ^{6,10} мы предполагаем вырождение электронного спектра $\epsilon_{\vec{k}}$, которое снимается взаимодействием со смещениями ионов q_i (зонный эффект Яна - Теллера). Гамильтониан модели запишем в виде

$$H = \sum_{\vec{k}\tau} \epsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}\tau}^{\dagger} c_{\vec{k}\tau} + H_I - \sum_{i\tau\tau'} U_{\tau\tau'}(q_i) c_{i\tau}^{\dagger} c_{i\tau'} \quad (1)$$

где $c_{\vec{k}\tau}^{\dagger}$ - оператор рождения электрона с зонным индексом (проекцией псевдоспина) $\tau = \pm$ (спиновые индексы для краткости опускаем), H_I - гамильтониан системы взаимодействующих ионов, находящихся в ангармоническом потенциале $V(q_i)$, $\hat{U}(q_i)$ - матрица электрон-решеточного взаимодействия на узле i . При вычислении электронной функции Грина $G_{\vec{k}\tau}(E)$ в рамках теории возмущений по \hat{U} возникают "псевдокондовские" члены порядка $U^2 \ln |D/(E - \omega_{\mu\nu})|$, где D - ширина электронной зоны, E отсчитана от E_F , $\omega_{\mu\nu}$ - частоты переходов между уровнями потенциала $V(q)$. Мы предполагаем, что частота

перехода из основного состояния $|0\rangle$ в первое возбужденное состояние много меньше остальных $\omega_{\mu\nu}$, что возможно для двухъямных потенциалов (для ионов 04 согласно ⁸, $\omega_{10} \sim 10^2 \text{K}$, $\omega_{21} \gtrsim 10^3 \text{K}$). Тогда на энергетическом масштабе $\omega_{10} \ll |E| \ll \omega_{21}$ можно перейти к псевдоспиновой модели, вводя операторы $S_i^+ = |i0\rangle\langle i1|$, $S_i^z = 1/2(|i0\rangle\langle i0| - |i1\rangle\langle i1|)$ и сводя последний член (1) к виду

$$H_{int} = -I_{\alpha\beta} \sum_{i\tau\tau'} c_{i\tau}^+ \sigma_{\tau\tau'}^\alpha c_{i\tau'} S_i^\beta, \quad (2)$$

где \hat{I} - матрица "обменных" параметров, выражающаяся через \hat{U} , $\hat{\sigma}$ - матрицы Паули. Рассматривая модель (1), (2) в паркетном приближении, можно показать, что теория возмущений становится неприменимой при характерной энергии $|E| = T_K$ ("температуре Кондо"), определяемой условием для полюса матрицы рассеяния

$$\det \| \delta_{\tau\tau'} \delta_{\alpha\beta} + i \epsilon_{\lambda\alpha\beta} I_{\gamma\lambda} \sigma_{\tau\tau'}^\gamma \rho \ln(D/T_K) \| = 0, \quad (3)$$

где $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$ - единичный антисимметричный тензор, R - плотность состояний на E_F . Для изотропной $s-d$ модели ($I_{\alpha\beta} = I \delta_{\alpha\beta}$) (3) дает обычный результат $T_K = D \exp(1/2I\rho)$. Пренебрежение динамикой псевдоспинов оправдано, если $T_K > \omega$, где ω - характерная частота возбуждений ионов (ω_{10} , перенормированная межйонным взаимодействием).

По аналогии с $s-d$ -моделью, ниже T_K можно ожидать формирования сильно коррелированного состояния типа псевдоспиновой жидкости. Его свойства, в том числе сверхпроводимость, можно описать, например, в рамках метода функционального интегрирования ¹¹. Основной результат состоит в гибридизации электронов проводимости с абрикосовскими псевдофермионами, возникающими при "разборке" псевдоспинов, и появлении в энергетическом спектре пиков плотности состояний вблизи E_F с характерным масштабом T_K . Вычет функции Грина фермиевских возбуждений в полюсе $Z \sim (T_K/D) \ll 1$, а большая часть спектральной плотности определяется разрезами и в этом смысле является неквазичастичной. Аналогично теории RVB, псевдофермионы могут иметь отношение к проблеме аномального линейного члена в теплоемкости ВТСП.

Значение T_K для $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ можно оценить ⁶ из поведения термоэдса $\alpha(T)$, что дает $T_K \gtrsim 10^2 \text{K}$ при $\delta \approx 0,5$. Считая существенным взаимодействие носителей тока в плоскости CuO_2 с ионами 04 и учитывая уменьшение расстояния ион-плоскость с уменьшением δ ⁷, необходимо сделать вывод, что для составов с $T_c \approx 90 \text{K}$ ($\delta \approx 0$) T_K еще выше. Таким образом, при температурах ниже комнатной мы имеем дело с сильно коррелированным "псевдокондовским" состоянием. За счет взаимодействия с электронами исходная двухъямность $V(q)$ в яме уменьшена (аналогично кондовской компенсации магнитных моментов), причем расстояние между центрами ям должно падать с понижением T вплоть до T_c и затем снова возрастать из-за подавления эффекта Кондо сверхпроводящей щелью на E_F . Именно такое поведение наблюдалось в ⁸.

Яркой особенностью рассматриваемого состояния является высокая лабильность. Малые изменения $V(q_i)$ делают ион "некондовским", так как рост частоты ω_{10} , резко зависящей от барьера между ямами, обрезают кондовские расходимости, а ее падение означает одновременное уменьшение параметров $I_{\alpha\beta}$, ответственных за рассеяние с туннелированием. Поэтому один дефект

может приводить, через дальнедействующие упругие искажения, к подавлению эффекта Кондо в целой области. В то же время замена кондовского центра обычным дает максимально сильное локальное возмущение электронной системы (фаза кондовского рассеяния на E_F равна $\pi/2$).

Эти соображения позволяют понять высокую чувствительность свойств $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ к немагнитным примесям и облучению. В частности, рост линейного члена в теплоемкости до значений, сравнимых с характерными для систем с тяжелыми фермионами, при легировании цинком ¹² можно интерпретировать как уменьшение "средней" T_K ; при этом термоэдс, как и следует ожидать, возрастает ¹³. Отметим также резкое падение анизотропии сопротивления ρ_c/ρ_{ab} при облучении нейтронами вблизи перехода металл - полупроводник ¹⁴, где ρ_c уже определяется прыжками между плоскостями. В сильно коррелированном состоянии вероятность последних содержит множитель $Z^2 \sim (T_K/D)^2$ ($Z^{1/2}$ имеет смысл перенормировки волновой функции). Это подавление есть следствие катастрофы ортогональности Андерсона (уменьшение вероятности исчезновения или появления электрона в плоскости за счет релаксации многоэлектронной системы). При облучении псевдокондовское состояние разрушается и ρ_c/ρ_{ab} стремится к значению, определяемому лишь затравочным электронным спектром.

Перестройка электронного спектра с формированием энергетического масштаба $T_K \ll D$ радикально меняет характер влияния носителей тока на магнитные взаимодействия в системе. Обменное взаимодействие в плоскостях CuO_2 является сильным ($J \sim 10^3\text{K}$), и можно считать, что $T_K \lesssim J \ll D$. В обычной "хаббардовской" ситуации носители тока приводили бы к "двойному обмену" и давали тенденцию к ферромагнетизму, реально не наблюдающуюся в ВТСП. Вследствие перенормировки спектра носители тока становятся медленными ("антиадиабатический" режим) и могут приводить к изменению знака некоторых обменных интегралов (например, превращение антиферромагнитного суперобмена в ферромагнитный при "статическом" изменении валентности кислорода), т.е. к фрустрациям. Такие "медленные" электроны должны способствовать формированию состояния RVB в $t - J$ -модели (см., например, ¹⁵).

Анализ совокупности экспериментальных данных демонстрирует ряд аналогий между ВТСП, сверхпроводниками с тяжелыми фермионами (СТФ) и соединениями со структурой $A15$ ¹⁶. Можно думать, что во всех этих системах основное состояние является сильно коррелированным и имеет черты решетки Кондо, формирующейся за счет либо магнитных (как в СТФ), либо электрон-решеточных (как в сверхпроводниках $A15$ ¹⁰) взаимодействий. Специфика ВТСП состоит, по нашему мнению, в сосуществовании и взаимном влиянии обоих типов корреляций. Последнее проявляется, например, в легкости образования "свободных" магнитных моментов при облучении ¹⁴ или легировании ¹⁷, т.е. при разрушении "псевдокондовского" состояния.

Литература

1. Anderson P.W. Science, 1987, 235, 1196.
2. Максимов Е.Г., Саврасов С.Ю. УФН, 1990, 160, 155.
3. Anderson P.W. Phys. Rev. B, 1990, 42, 2624.
4. Varma C.M. et al. Phys. Rev. Lett., 1989, 63, 1996.
5. Цвелик А.М. Письма в ЖЭТФ, 1988, 48, 502.
6. Ирхин В.Ю., Кацнельсон М.И., Трефилов А.В. Письма в ЖЭТФ, 1989, 50, 95; Physica C, 1989, 160, 397.

7. Maruyama H. et al. *Physica C*, 1989, 160, 524.
 8. Mustre de Leon J. et al. *Phys Rev. Lett.*, 1990, 65, 1675.
 9. Sharma R.P. et al. *Phys. Rev. Lett.*, 1989, 62, 2869.
 10. Yu C.C., Anderson P.W. *Phys. Rev. B*, 1984, 29, 6165.
 11. Coleman P., Andrei N. J. *Phys.: Cond. Mat.*, 1989, 1, 4057.
 12. Ting S.T. et al. *Physica B*, 1990, 163, 227.
 13. Radhakrishnan V. et al. *Phys. Rev. B*, 1989, 40, 6850.
 14. Goshchitskii B.N. et al. *Proc. Int. Workshop on Effects of Strong Disordering in HTSC (Zarechny, June 1990), Moscow, 1990, p. 14; Davydov S.A. et al. Ibid; p.118.*
 15. Wiegmann P.B. *Phys. Rev. Lett.*, 1988, 60, 821.
 16. Miyaka K., Matsuura T., Varma C.M. *Sol. St. Comm.*, 1989, 71, 1149.
 17. Finkelstein A.M. et al. *Physica C*, 1990, 168, 370.
-