Письма в ЖЭТФ, том 48, вып. 5, стр. 281 – 284 *10 сентября 1988 г.*

О СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЯХ ЭЛЕКТРОНОВ (ДЫРОК) НА КВАДРАТНОЙ РЕШЕТКЕ И ИХ СВЕРХТЕКУЧЕСТЬ

Г.В.Уймин, Л.А.Максимов[1)], *А.Ф.Барабанов*[2)]

Предложена микроскопическая модель типа Хаббарда, в рамках которой исследован спектр двухчастичных электронных состояний. Найдены условия сосуществования связанных состояний с несвязанными. Обсуждаются критерии сверхтекучести.

Эксперименты [1] показывают, что основные свойства высокотемпературных сверхпроводников определяются электронами медно-кислородных слоев CuO_2, причем дырки, возникающие в результате допирования, принадлежат кислородной зоне. Это обстоятельство последовательно учитывается в рамках обобщенной модели Хаббарда [2, 3], которая использовалась в предыдущей работе авторов [4] при изучении спектра дырочных возбуждений. В случае сильной гибридизации p- и d-состояний, как указывалось в работе [3], обобщенная модель Хаббарда сводится к обычной с ренормированными значениями кулоновской U и перескоковой t энергий. Элементарная ячейка $\mathbf{r}$ в этом случае состоит из одного иона меди и его кислородного окружения. Локализованная на ионе меди дырка образует почти синглетное состояние со свободной дыркой, размазанной по кислородному окружению данного иона. "Перескоки" указанного комплекса формируют дырочную зону [4]. Приближенно этот вари-

1) Институт атомной энергии им. И.В.Курчатова.

2) Институт физики высоких давлений АН СССР.

ант может быть описан гамильтонианом:

$$\mathcal{H} = -\sum_{\langle \mathbf{r},\mathbf{r}'\rangle,\sigma} a^{+}_{\mathbf{r}\sigma} a_{\mathbf{r}'\sigma} \left(t + \tau\left(n_{\mathbf{r}-\sigma} + n_{\mathbf{r}'-\sigma}\right)\right) + \sum_{\mathbf{r}} U n^{\uparrow}_{\mathbf{r}} n^{\downarrow}_{\mathbf{r}} . \qquad (1)$$

Здесь $a_{\mathbf{r}\sigma}$ $(a^{+}_{\mathbf{r}\sigma})$ – фермиевские операторы уничтожения (рождения) дырки в ячейке $\mathbf{r}$. Обозначение $\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle$ принято для ближайших ячеек. Величина τ описывает изменение амплитуды перескока t, связанное с образованием или распадом в одной ячейке двухчастичного (2ч) состояния, характеризуемого энергией U. Естественно, что в нашем подходе "хаббардовская" энергия U, так же, как и τ, имеет порядок t. Далее мы будем рассматривать случай слабо заполненной зоны $(nU \ll t)$, при котором можно отвлечься от проблемы хаббардовской щели. Одночастичные (1ч) состояния гамильтониана (1) имеют спектр:

$$\epsilon(R) = -2t(\cos(K_x) + \cos(K_y)) \qquad (2)$$

(постоянная решетки принята за единицу). Спектр синглетных 2ч состояний $E(\mathbf{Q})$ с суммарным волновым вектором $\mathbf{Q}$ определяется из уравнения:

$$\theta U + (1-\theta)E = W^{-1}(E;\mathbf{Q}), \qquad (3)$$

где $\theta = (1+\tau/t)^{-2}$, а

$$W(E;\mathbf{Q}) = \int d^2K\,(E - \epsilon(K) - \epsilon(K - \mathbf{Q}))^{-1} / (2\pi)^2 . \qquad (4)$$

Уравнение (3) можно получить, решая 2ч уравнение Шредингера, либо определяя полюса 2ч функции Грина. Легко видеть, что (3) симметрично относительно одновременной замены $U \to -U$ и $E \to -E$, а спектр $E(\mathbf{Q})$ полностью задается своими значениями в области $\pi \geqslant Q_y \geqslant Q_x \geqslant 0$. Заметим, что уравнение (3) содержит сплошной спектр решений, который отвечает 2ч несвязанным состояниям с импульсами $\mathbf{Q} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$ и энергиями $E = \epsilon(\mathbf{k}_1) + \epsilon(\mathbf{k}_2)$. Эти решения ограничены поверхностями:

$$E = \pm A(\mathbf{Q}), \quad A(\mathbf{Q}) = 4t\,(|\cos(Q_x/2)| + |\cos(Q_y/2)|). \qquad (5)$$

На рис. 1 изображено сечение $Q_x = Q_y$. Область несвязанных состояний заштрихована. Кроме сплошного спектра уравнение (3) может иметь при фиксированном $\mathbf{Q}$ дискретные решения $E(\mathbf{Q})$. Этим состояниям соответствуют волновые функции, экспоненциально спадающие при увеличении расстояния между частицами. Если $E(\mathbf{Q}) < -8t$, то это стабильное 2ч состояние. При $E(\mathbf{Q}) > -8t$ связанное состояние метастабильно и может распадаться на несвязанные состояния сплошного спектра при передаче импульса (энергии) третьей частице или фонону (аналогия – экситон в полупроводнике).

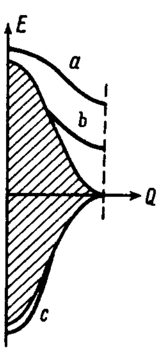

Рис.1

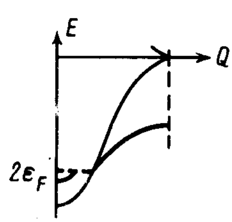

Рис. 2. Один из видов деформации моды b в случае $U < 0$

В области существования связанных состояний $|E| > A(\mathbf{Q})$ величина W^{-1} отлична от нуля и равна

$$W^{-1}\ (E;\mathbf{Q}) = 0,5\pi\ \mathrm{sign}\,(E)\,(E^2 - B^2)^{1/2}\ \mathbf{K}^{-1}\ (R), \tag{6}$$

где $B = 4t\ (|\cos(Q_x/2)| - |\cos(Q_y/2)|)$, $R^2 = (A^2 - B^2)/\ (E^2 - B^2)$, а $\mathbf{K}(R)$ – полный эллиптический интеграл. Легко увидеть, что всегда имеется дискретное решение уравнения (3) в точке $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$:

$$E(\pi, \pi) = U.$$

Пусть для определенности $U > 0$ и $\theta > 1$. Последнее означает, что амплитуда $(t + \tau)$ слияния двух частиц в одну ячейку меньше амплитуды перескока t. Тогда при выполнении неравенства

$$U > U_0 = 8t\ (1 - \theta^{-1}) \tag{7}$$

существует мода a дискретных состояний, которая при всех $\mathbf{Q}$ находится над сплошным спектром (см. рис. 1, кривая a). Обратим внимание, что спектр 2ч возбуждений при $U > 8t$ является двухзонным, в то время, как спектр 1ч возбуждений (2) остается однозонным даже в пределе $U >> t$ (но $nU < t$).

Если условие (7) не выполнено, то дискретная мода b (кривая b, рис. 1) сливается со сплошным спектром по изолинии

$$E_c\ (\mathbf{Q}) = A_c\ (\mathbf{Q}) = U\,(1 - \theta^{-1}). \tag{8}$$

При $\theta < 1$ уравнение (3) имеет изолированную моду типа a и кроме того при $0 < U < |U_0|$ имеет еще одну дискретную моду c (кривая c, рис. 1), которая сливается со сплошным спектром вдоль линии (8), но $E_c < 0$! Эта мода имеет минимум в точке $(0, 0)$:

$$E\,(0,\ 0) = -8t - \Delta,\ \ \Delta = 64t\,\exp\,(-1/\lambda). \tag{9}$$

В случае U близкого к $|U_0|$ $\lambda = \pi^{-1}\ (1 - \theta)\,(1 - U/|U_0|)$, а эффективная масса связанного возбуждения $m \cong t^{-1}$.

Стабильные связанные состояния существуют и для локального одноячеечного притяжения при $\theta < 1$ для всех $U < 0$, а при $\theta > 1$ для $U < -|U_0|$. Картинка, изображенная на рис. 1, для этого случая должна быть отражена относительно плоскости (Q_x, Q_y).

Все упомянутые здесь связанные 2ч состояния отвечают бозевской статистике и при низких температурах $T < T_c \approx nT$ могут образовать сверхтекучий газ. Проведенный анализ справедлив, пока характерная кинетическая энергия ($\propto nT$) мала по сравнению с энергией связи Δ, или, что то же самое, размер составных бозе-частиц много меньше расстояния между ними. В обратном случае следует учитывать деформацию связанного состояния, обусловленную фермиевским заполнением 1ч состояний. Уравнения (3) – (4) в этом случае видоизменяются:

$$\theta U + (1 - \theta)E + 4\tau^2 t^{-1} I_1 \theta = W^{-1}, \tag{3'}$$

где $\theta = (1 + \tau t^{-1} I_0)^{-2}$, $W = (2\pi)^{-2} \int d^2R\,(E - \epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k} - \mathbf{Q}))^{-1}$,

$$I_0 = (2\pi)^{-2} \int d^2K,\ I_1 = (2\pi)^{-2} \int d^2K(\cos(K_x) + \cos(K_y)) \tag{4'}$$

причем интегрирование в формуле (4′) ведется по области $\epsilon\,(\mathbf{k}) > \epsilon_F$ и $\epsilon\,(\mathbf{k} - \mathbf{Q}) > \epsilon_F$.

Подробный анализ такой задачи Купера будет представлен в отдельной публикации (см. также рис. 2). Из этого анализа следует, в частности, что с ростом концентрации n энергия связи куперовской пары уменьшается для моды c и увеличивается в случае моды b (при $U < 0$).

В конце для анализа задачи воспользуемся теорией БКШ. Гамильтониан (1) в импульсном представлении имеет следующий вид:

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} \xi(\mathbf{k})\, a^{+}_{\mathbf{k}\sigma} a_{\mathbf{k}\sigma} + (2N)^{-1} \sum_{\{\mathbf{k}\}} \lambda(\{\mathbf{k}\}) a^{+}_{\mathbf{k}_1\sigma} a^{+}_{\mathbf{k}_2 -\sigma} a_{\mathbf{k}_3 -\sigma} a_{\mathbf{k}_4 \sigma}, \tag{10}$$

где $\xi(\mathbf{k}) = \epsilon(\mathbf{k}) - \mu$, $\lambda(\{\mathbf{k}\}) = U + \sum_i \tau_{\mathbf{k}_i}$, $\tau_{\mathbf{k}} = -2\tau\ (\cos(K_x) + \cos(K_y))$. Уравнение для щели хорошо известно:

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -(2N)^{-1} \sum_{\mathbf{k}_1} \Delta_{\mathbf{k}_1} \lambda(\mathbf{k}, \mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_1) E^{-1}(\mathbf{k}_1)\, \mathrm{th}\, (E(\mathbf{k}_1)/(2T)), \tag{11}$$

где $E(\mathbf{k}) = (\xi^2(\mathbf{k}) + \Delta^2(\mathbf{k}))^{1/2}$ – спектр элементарных возбуждений. Из уравнения (11) следует, что $\Delta_{\mathbf{k}} = D_0 + D_1 \tau_{\mathbf{k}}$.

Поскольку в нашей модели параметры (U, t, τ) могут иметь одинаковый порядок величины, то при $T = 0$ в решении уравнения (11) нельзя ограничиться обычным логарифмическим приближением. Однако, когда $T \to T_c$ щель стремится к нулю и это становится возможным. В этом случае $D_0 = D_1\ (U + 2\tau_F)/2$, $\tau_F = \mu\tau/t$ и

$$1 = -(2N)^{-1}\, (U + 4\tau_F) \sum_{\mathbf{k}} E^{-1}(\mathbf{k})\, \mathrm{th}\, (E(\mathbf{k})/(2T)). \tag{12}$$

Мы видим, что уравнение для щели имеет обычный вид, причем роль эффективной константы взаимодействия играет значение λ на поверхности Ферми:

$$\lambda_{\text{эфф}} = U + 4\mu\tau/t. \tag{13}$$

Решение уравнения (13) существует, когда $\lambda_{\text{эфф}} < 0$. Если $U < 0$, то необходимо $\mu < |U| t/(4\tau)$, т.е. в принципе зона $\epsilon(\mathbf{k})$ может быть заполнена больше, чем наполовину. Если же $U > 0$, то энергия Ферми должна быть отрицательной и $|\mu| > |U|\, t/(4\tau)$. Поскольку $|\mu|$ в данной модели не может быть больше $4t$, то при $U > 0$ сверхтекучее состояние существует, только если

$$U < 16\tau. \tag{14}$$

Литература

1. *Tranquada J.M. et al.* Phys. Rev. B,1987, 35,7187; *Fujimory A. et al.* Phys. Rev. B, 1987, 35, 8814; *Nucker N. et al.* Z. Phys.. B, 1987, 67, 9.
2. *Varma C.M., Schmitt-Rink S., Abrahams E.* Sol. St. Comm., 1987, 62, 681; *Emery V.J.* Phys. Rev. Lett., 1987, 58, 2794; *Hirsch J.E.* Phys. Rev. Lett., 1987, 59, 228.
3. *Zhang F.C., Rice T.M.* Phys. Rev. B, 1988, 37, 3759.
4. *Барабанов А.Ф., Максимов Л.А., Уймин Г.В.* Письма в ЖЭТФ, 1988, 47, 532.

Поступила в редакцию
13 июня 1988 г.
После переработки
28 июля 1988 г.

Институт теоретической физики им. Л.Д.Ландау
Академии наук СССР