

Зеркальный нестинг: сверхпроводящее спаривание с большим импульсом

В. И. Белявский, В. В. Капаев⁺, Ю. В. Капаев⁺¹⁾

Государственный педагогический университет, 394043 Воронеж, Россия

⁺Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 27 мая 2002 г.

Необходимым условием сверхпроводящего спаривания носителей с большим суммарным импульсом пары является совпадение участков контура Ферми и изолиний нулевой кинетической энергии относительного движения пары (парный контур Ферми). В сверхпроводящих купратах такая ситуация может реализовываться либо как следствие возникновения *страйповой* структуры, либо, в ее отсутствие, контур Ферми должен удовлетворять условию зеркального нестинга. Постепенное отклонение от этого условия приводит к уменьшению сверхпроводящей щели вплоть до обращения ее в нуль.

PACS: 74.20.Rp

1. В предложенном недавно [1, 2] механизме сверхпроводимости купратов в качестве основного канала спаривания носителей заряда рассматривается возникновение пар с большим суммарным импульсом $K \approx 2k_F$ при кулоновском отталкивании частиц, образующих пару, – K -спаривание (k_F – фермиевский импульс в направлении импульса пары K). Такой канал спаривания тесно связан с особенностями фазовой диаграммы в высокотемпературных сверхпроводящих (ВТСП) купратах, на которой области допирования, соответствующие сверхпроводящему (SC) и антиферромагнитному (AF) состояниям, находятся в непосредственной близости друг к другу. Попытка увязать обычный куперовский канал спаривания (при $K = 0$) с антиферромагнетизмом в рамках феноменологической $SO(5)$ модели, в которой двухкомпонентный SC параметр порядка и трехкомпонентный AF параметр порядка объединены в некоторый единый вектор (суперспин) в пятимерном пространстве [3], привела к необходимости рассматривать наряду с генераторами групп $U(1)$ и $SO(3)$, описывающими куперовское d -волновое спаривание и AF упорядочение, соответственно, также генераторы, относящиеся к триплетным парам с большим суммарным импульсом π/a (a – параметр решетки в проводящей плоскости), – так называемые $\hat{\pi}$ -операторы. Ранее этот результат, обоснованный в [3] соображениями симметрии, был получен в микроскопической модели сосуществования сверхпроводимости и антиферромагнетизма [4]. В рамках принятой в [5] $SU(4)$ динамической симметрии пол-

ная совокупность генераторов, образующих алгебру Ли, включает, наряду с введенными в [3], операторы синглетных d -волновых пар, соответствующие орбитальному антиферромагнетизму (ОАФ) [6]. Результаты экспериментов по фотоэмиссии с угловым разрешением (ARPES) с использованием циркулярно поляризованного света [7] интерпретируются как спонтанное нарушение симметрии по отношению к обращению времени в псевдощелевом состоянии недодопированных тонких пленок BSCCO, что согласуется с предположением [8] о существовании вблизи SC области на фазовой диаграмме ВТСП купратах фазы со “скрытым” (в смысле сложности идентификации с помощью имеющихся экспериментальных методик) упорядочением, в качестве которого в [8] обсуждается как раз ОАФ, которому соответствует $d_{x^2-y^2}$ -симметрия параметра порядка – “волны d -плотности” (DDW) [8], аналогичной волне зарядовой плотности в случае s -симметрии. Нам представляется вполне вероятным, что именно K -спаривание и DDW оптимально сосуществуют в купратах.

С соответствующей $\hat{\pi}$ -операторам коллективной модой (π -модой) связывается наблюдаемый ниже температуры SC перехода T_C в ВТСП купратах резонансный пик в рассеянии нейтронов при энергиях, близких к 40 мэВ [9]. Обнаружение несоразмерных магнитных флуктуаций [10] позволило связать их с дисперсией π -моды, энергия которой достигает максимума при “соразмерном” АФ импульсе, по мере отклонения от которого имеет место смягчение π -моды, то есть тенденция к фазовому переходу второго рода в некоторое состояние, соответствующее смеси несоразмерного антиферромагнетизма и сверх-

¹⁾e-mail: kopaev@sci.lebedev.ru

тью $\Xi_K^{(-)}$ состояний, оставшихся заполненными, являются изолинии энергии относительного движения K -пары (линии bc и $b'c'$ на рис.1), на которых энергия пары (1) обращается в нуль. Эти линии и образуют PFC, на котором может осуществляться эффективное SC спаривание носителей с суммарным импульсом K : каждому импульсу k относительного движения K -пары, принадлежащему одной из линий, образующих PFC, соответствует импульс $-k$, принадлежащий другой линии PFC (рис.1). В соответствии с (1), на этой линии выполняется условие

$$\varepsilon\left(\frac{K}{2} + k\right) + \varepsilon\left(\frac{K}{2} - k\right) = 2\mu = \text{const}, \quad (2)$$

указанное в [11] (в виде $\varepsilon(k) + \varepsilon(\pi - k) = \text{const}$) как необходимое условие η -спаривания. Однако в случае идеального нестинга при $K \rightarrow 2k_F$, который рассмотрен в [11], площадь $\Xi_K \rightarrow 0$, поэтому, как показано в [12], сверхпроводящее спаривание может иметь место лишь при достаточно большой величине взаимодействия пар на соседних узлах.

Фактически, (2) является обобщением необходимого для диэлектрического спаривания при слабом взаимодействии условия нестинга, когда $\varepsilon(k) = -\varepsilon(k+Q)$ при любых k , принадлежащих части контура Ферми, и некотором выделенном импульсе Q . Поэтому с учетом того, что при $K \neq 0$ область определения импульсов k относительного движения K -пары обладает симметрией относительно зеркального отражения от перпендикуляра к вектору K в точке $K/2$ и от самого вектора K , равенство (2) можно назвать условием “зеркального” нестинга.

3. Описанный выше сценарий возникновения PFC обусловлен взаимодействием в системе электронов, приводящим к пространственно неоднородному распределению зарядов и спинов в проводящей плоскости CuO_2 и соответствующему изменению формы контура Ферми. Возникновение страйпов может повлиять на форму контура Ферми настолько, что движение электронов в проводящих плоскостях приобретает квазиодномерный характер [13]. В связи с этим можно предположить, что особенности кристаллической структуры и взаимодействия между электронами в ВТСП купратах также могут обеспечить условия для SC спаривания с большим суммарным импульсом пары и без образования пространственно неоднородной структуры.

Примером может служить согласующаяся с ранними расчетами [14, 15] электронной структуры ВТСП соединений двухзонная модель, в которой учитывается взаимодействие между электронами в плоскости CuO_2 и в некоторой параллельной ей плоскос-

ти, например, содержащей кислородные цепочки (как в соединении YBCO) или принадлежащей резервуару (BiO в BSCCO, HgO в HVBSCO или TiO в TBSCO [16, 17]). Таким образом, контур Ферми оказывается неодносвязным, как это схематически показано на рис.2, представляющем центрированный в точке (π, π) двухсвязный дырочный контур Ферми со-

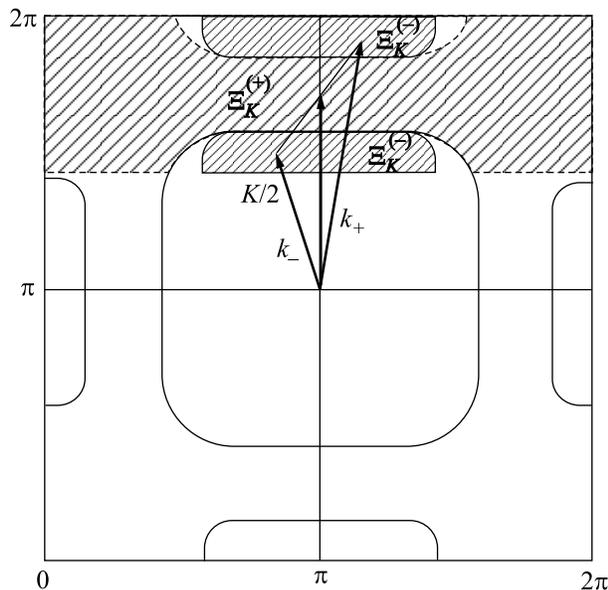


Рис.2. Область импульсного пространства $\Xi_K^{(-)}$, которой принадлежат импульсы k_+ и k_- дырок, составляющих пару с суммарным импульсом K (заштрихована), и область $\Xi_K^{(+)}$, соответствующая электронам с импульсами k'_+ и k'_- , составляющими пару с тем же суммарным импульсом

единения BSCCO (похожая многосвязная структура контура Ферми BSCCO обнаружена в [18] при помощи методики ARPES с высоким разрешением). Односвязная часть контура Ферми, центрированная в точке (π, π) и по форме напоминающая обычный для ВТСП купратов с дырочным допированием “квадрат со скругленными углами” [19], может быть отнесена, в основном, к проводящей плоскости CuO_2 . Вторая (меньшая) односвязная часть, центрированная в точке типа $(0, \pi)$, формируется, главным образом, электронными состояниями, относящимися к обладающей металлической проводимостью плоскости BiO. Достаточно длинные участки этих двух частей контура Ферми “почти параллельны” друг другу. Это позволяет выбрать такой суммарный импульс пары K , что значительная часть границы, разделяющей заполненные и вакантные части соответствующей ему области Ξ_K , будет совпадать с контуром Ферми. Направление вектора K должно совпадать

с направлением вектора нестинга контура Ферми, то есть с направлением типа [100], как показано на рис.2. Длина вектора K выбирается так, что точка $K/2$ делит пополам расстояние между “почти параллельными” участками двух односвязных частей контура Ферми. Тогда область Ξ_K образуется из двух частей: заполненной дырками области $\Xi_K^{(-)}$ и свободной от дырок области $\Xi_K^{(+)}$.

В случае, когда уровень Ферми пересекает всего одна зона, контур Ферми является односвязным, и его форма, найденная из экспериментов ARPES, в купратах с дырочным допированием соответствует “квадрату со скругленными углами”, как схематически показано на рис.2. В [14] отмечено, что наблюдаемая форма контура Ферми может быть удовлетворительно описана в приближении сильной связи при соответствующем подборе интегралов перескока как между ближайшими, так и несколькими следующими соседними атомами. Учет взаимодействия вплоть до третьей координационной сферы приводит к закону дисперсии, который записывается как

$$\varepsilon(k_1, k_2) = 2 - 2t_1(\cos k_1 a + \cos k_2 a) - 4t_2 \cos k_1 a \cos k_2 a - 2t_3(\cos 2k_1 a + \cos 2k_2 a), \quad (3)$$

где t_1 , t_2 и t_3 – интегралы перескока для первой, второй и третьей координационных сфер, соответственно. Эти интегралы, подбираемые так, чтобы форма контура Ферми наилучшим образом соответствовала экспериментально наблюдаемой, формально относятся к узлам проводящей плоскости CuO_2 , фактически же они учитывают взаимодействия также между этой и соседними (принадлежащими резервуару) плоскостями. Можно ожидать, что такой подбор параметров t_1 , t_2 , t_3 приводит к правильному описанию целого семейства изолиний с энергиями, близкими к уровню Ферми.

На рис.3 схематически показаны контур Ферми и изолинии нулевой энергии относительного движения пары при $K = 0.94\pi/a$ и соотношениях между интегралами перескока в (3): $t_1 = 0.5$, $t_2 = -0.3t_1$, $t_3 = t_1$. Из этого рисунка следует, что изолинии нулевой энергии относительного движения K -пары и конечные участки контура Ферми практически совпадают, то есть обеспечивается выполнение условия зеркального нестинга. Условие $t_3 = t_1$, по-видимому, нетипично для купратов, поскольку для его выполнения необходимо существенное перекрытие орбиталей, центрированных на третьих ближайших соседях (атомах меди, между которыми располагается кислород, и наоборот). Однако не исключено, что оно может быть удовлетворено в слоистых соединениях

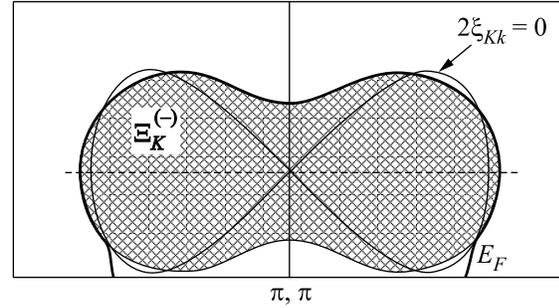


Рис.3. Образование PFC (тонкая линия, $2\xi_{Kk}^{(-)} = 0$) в однозонной модели (3): схематическая иллюстрация приближенного выполнения условия зеркального нестинга для конечных участков контура Ферми (жирная линия). Область значений импульса относительного движения K -пары, соответствующая заполненным состояниям, заштрихована

с иной кристаллохимической структурой, что необходимо иметь в виду при поиске новых сверхпроводящих материалов.

4. Зеркальный нестинг является достаточным условием SC спаривания при большом суммарном импульсе пары. При этом можно ограничиться рассмотрением случая, когда единственным существенным взаимодействием между частицами, образующими K -пару, является экранированное кулоновское отталкивание. Такое эффективное взаимодействие, приводящее к связанному состоянию, приближенно сводится к точечному взаимодействию, интенсивность которого пропорциональна площади импульсного пространства, которой принадлежат начальный и конечный импульсы относительного движения K -пары [1, 2]. Так, матричный элемент эффективного взаимодействия между частицами, составляющими K -пару, зависит от того, в какой части области Ξ_K (рис.2) имеет место рассеяние при взаимодействии: $\tilde{U}^*(k-k') \sim \Xi_K^{(-)}$, если $k, k' \in \Xi_K^{(-)}$, $\tilde{U}^*(k-k') \sim \Xi_K^{(+)}$, если $k, k' \in \Xi_K^{(+)}$, и $\tilde{U}^*(k-k') \sim \Xi_K$, если $k \in \Xi_K^{(-)}$, $k' \in \Xi_K^{(+)}$ или, наоборот, $k \in \Xi_K^{(+)}$, $k' \in \Xi_K^{(-)}$. Уравнение, при $T = 0$ определяющее SC параметр порядка Δ_{Kk} , зависящий от импульса k относительного движения K -пары, имеет вид

$$\Delta_{Kk} = -\frac{1}{2} \sum_{k' \in \Xi_K} \frac{\tilde{U}^*(k-k') \Delta_{Kk'}}{\sqrt{\xi_{Kk}^2 + \Delta_{Kk}^2}}. \quad (4)$$

При рассматриваемом здесь отталкивательном взаимодействии частиц, составляющих пару, знакопостоянное решение уравнения (4), подобное решению Бардина, Купера и Шриффера (BCS), отсутствует. В настоящей работе мы ограничимся рассмотрением

простейшего разрывного решения уравнения (4), полагая $\Delta_{Kk} \equiv \Delta_- > 0$ при $k \in \Xi_K^{(-)}$, $\Delta_{Kk} \equiv -\Delta_+ < 0$ при $k \in \Xi_K^{(+)}$. Изменение знака SC параметра порядка при переходе через PFC вообще типично для двухзонных моделей при отталкивательном взаимодействии [20]; в связи с этим отметим, что в [16, 17] SC параметр порядка меняет знак при переходе из CuO_2 плоскости (в которой предполагается притягивающее взаимодействие между частицами в паре) в плоскость кислородных цепочек или резервуара, обладающую металлической проводимостью, где предполагается взаимодействие отталкивания. Таким образом, приближенно можно считать, что в рассматриваемых здесь двухзонных моделях компоненты K -пары располагаются в разных параллельных плоскостях. Отметим также, что в одномерной модели Пенсона–Колба–Хаббарда, рассмотренной в [12], параметр порядка, соответствующий η -спариванию, меняет знак при переходе на каждый соседний узел, то есть является знакопеременным, принимая постоянные значения противоположного знака на двух эквивалентных подрешетках. Подобное изменение фазы SC параметра порядка на π при переходе K -пар в реальном пространстве (и соответствующее изменение фазы при переходах между областями $\Xi_K^{(-)}$ и $\Xi_K^{(+)}$ в импульсном пространстве) приводит вследствие квантовой интерференции к выигрышу в энергии за счет парного “обменного” вклада и аналогично эффекту Джозефсона.

Сделанные предположения о характере решения уравнения (4) позволяют переписать его [2] в виде системы двух интегральных уравнений для параметров Δ_- и Δ_+ :

$$\begin{aligned} (1 - \alpha)\Delta_- + \Delta_+ &= \frac{U_K h_\alpha}{2S} \sum_{k \in \Xi_K^{(-)}} \frac{\Delta_-}{\sqrt{\xi_{Kk}^2 + \Delta_-^2}}, \\ \Delta_- + \alpha\Delta_+ &= \frac{U_K h_\alpha}{2S} \sum_{k \in \Xi_K^{(+)}} \frac{\Delta_-}{\sqrt{\xi_{Kk}^2 + \Delta_+^2}}. \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь положено $\alpha \equiv \Xi_K^{(-)}/\Xi_K$, $h_\alpha = 1 - \alpha - \alpha^2$, S – нормировочная площадь, $U_K = (e^2 r_0 / 2\pi) \cdot \Xi_K a^2$ [2], где r_0 – радиус экранирования. Величины α и r_0 зависят от уровня допирования, однако в настоящей работе такая зависимость обсуждаться не будет.

В общем случае $\Delta_- \neq \Delta_+$, но при $\alpha = 1/2$, когда площади областей $\Xi_K^{(-)}$ и $\Xi_K^{(+)}$ равны друг другу, система уравнений (5) оказывается инвариантной по отношению к преобразованию $\Delta_- \leftrightarrow \Delta_+$ и, таким

образом, сводится к одному уравнению для единственного параметра $\Delta \equiv \Delta_- = \Delta_+$:

$$\frac{U_K}{4S} \sum_{k \in \Xi_K^{(-)}} \frac{1}{\sqrt{\xi_{Kk}^2 + \Delta^2}} = 1. \quad (6)$$

Ограничимся рассмотрением этого частного случая, который, в принципе, включает в себе все основные черты поведения SC параметра порядка.

5. Зеркальному нестингу соответствует решение уравнения (6), по форме совпадающее с известным решением BCS. В реальной электронной системе условие зеркального нестинга выполняется лишь приближенно, и линия нулей кинетической энергии относительного движения K -пары не совпадает с границей области $\Xi_K^{(-)}$ (именно в пределах этой области в (6) производится суммирование по импульсу относительного движения пары). Таким образом, величина отклонения границ областей $\Xi_K^{(-)}$ и $\Xi_K^{(+)}$ от PFC играет роль своеобразного параметра обрезания в уравнении для SC щели подобно намагниченности в слабых ферромагнетиках [21]. Значительное отклонение границ $\Xi_K^{(-)}$ и $\Xi_K^{(+)}$ от PFC приводит к тому, что состояние с SC щелью оказывается невозможным. Поэтому при переходе от суммирования в (6) к интегрированию по компонентам k_1 и k_2 импульса относительного движения пары следует учесть, что линия нулевой кинетической энергии относительного движения пары (1) отклоняется от границы области $\Xi_K^{(-)}$ на некоторую характерную величину Ω , которая и имеет смысл параметра обрезания интеграла (6) на нижнем пределе. Так, если вектор k пробегает значения, соответствующие границе области $\Xi_K^{(-)}$, то, например, $\varepsilon(K/2 - k) = \mu$, тогда как $\varepsilon(K/2 + k) - \mu \equiv 2\Omega \geq 0$, что и соответствует эффективному обрезанию интеграла на нижнем пределе. Параметр обрезания Ω зависит от компоненты k_1 импульса относительного движения, поэтому при интегрировании выражения (6) удобно перейти от переменной k_2 к другой переменной, в качестве которой естественно выбрать ξ_{Kk} . Перепишем (6) как

$$\frac{U_K}{4(2\pi)^2} \int_{-k_0}^{k_0} \int_{\Omega}^{\varepsilon_0} \frac{1}{\hbar v_{F2}} \frac{d\xi dk_1}{\sqrt{\xi_{Kk}^2 + \Delta^2}} = 1. \quad (7)$$

где v_{F2} – компонента фермиевской скорости вдоль оси k_2 . Эта величина слабо зависит от k в пределах области интегрирования $\Xi_K^{(-)}$, поэтому ее можно заменить некоторым средним значением и вынести из-под знака интеграла. Величина $2k_0$ характеризует протяженность области $\Xi_K^{(-)}$ в направлении оси

k_1 , а ε_0 – ее энергетическую ширину. Примем, что $\varepsilon_0 \gg \Delta$ (при этом условии зависимостью ε_0 от k_1 можно пренебречь) и выполним элементарное интегрирование по ξ . Для вычисления оставшегося интеграла по k_1 воспользуемся теоремой о среднем, определив средний параметр обрезания как $\Omega \approx \nu \hbar^2 k_0^2 / m$, где ν – отношение абсолютных величин компонент m_1 и m_2 тензора обратных эффективных масс (при форме контура Ферми, типичной для ВТСП купратов с дырочным допированием, $\nu \ll 1$). Учитывая, что $k_0 / (2\pi)^2 \hbar v_{F2} = g_k$ – средняя плотность состояний относительного движения K -пары в пределах области Ξ_K , для SC щели имеем

$$\Delta = \sqrt{\Delta_0(\Delta_0 - 2\Omega)}, \quad (8)$$

где

$$\Delta_0 = 2\varepsilon_0 \cdot \exp\left(-\frac{1}{U_K g_k}\right) \quad (9)$$

– энергетическая щель, которая имела бы место в условиях идеального зеркального нестинга, то есть при полном совпадении границ области $\Xi_K^{(-)}$ с PFC.

6. Предполагая, что условие зеркального нестинга наилучшим образом удовлетворяется при некотором оптимальном уровне допирования $x = x_{\text{opt}}$, можно прийти к выводу, что отклонение x в любую сторону от x_{opt} , соответствующее изменению размеров и формы контура Ферми, должно приводить к увеличению эффективного параметра обрезания $\Omega = \Omega(x)$. В соответствии с (8), нетривиальное решение уравнения (6) имеет место, если $2\Omega < \Delta_0$. Таким образом, два решения, x_1 и x_2 , уравнения $2\Omega = \Delta_0$ определяют интервал допирования $x_1 < x < x_2$, в котором существует отличный от нуля SC параметр порядка.

1. В. И. Белявский, В. В. Капаев, Ю. В. Копаев, ЖЭТФ **118**, 941 (2000).
2. V. I. Belyavsky and Yu. V. Kopaev. Phys. Lett. **A287**, 152 (2001); В. И. Белявский, Ю. В. Копаев, ЖЭТФ

- 121**, 175 (2002); V. I. Belyavsky and Yu. V. Kopaev. cond-mat/0203138.
3. S.-C. Zhang, Science **275**, 1089 (1997).
4. Ю. В. Копаев, *Проблема высокотемпературной сверхпроводимости*, под ред. В. Л. Гинзбурга и Д. А. Киржница, М.: Наука, 1977, гл. 5.
5. M. Guidry, L.-A. Wu, Y. Sun, and C.-L. Wu. Phys. Rev. **B63**, 134516 (2001).
6. B. I. Halperin and T. M. Rice, Solid State Physics **21**, 115 (1968); Б. А. Волков, А. А. Горбачевич, Ю. В. Копаев, В. В. Тугушев, ЖЭТФ **81**, 729 (1981); I. Affleck and J. B. Marston, Phys. Rev. **B37**, 3774 (1988).
7. A. Kaminski, S. Rosenkranz, H. M. Fretwell et al., cond-mat/0203133.
8. S. Chakravarty, R. B. Laughlin, D. K. Morr, and C. Nayak. Phys. Rev. **B63**, 094503 (2001).
9. J.-P. Hu and S.-C. Zhang. Phys. Rev. **B64**, 100502 (2001).
10. P. Bourges, Y. Sidis, H. F. Fong et al., Science **288**, 1234 (2000); P. C. Dai, H. A. Mook, R. D. Hunt, and F. Dogan. Phys. Rev. **B63**, 054525 (2001).
11. C. N. Yang, Phys. Rev. Lett. **63**, 2144 (1989).
12. G. I. Japaridze, A. P. Kampf, M. Sekania et al., Phys. Rev. **B65**, 014518 (2001).
13. J. Orenstein and A. J. Millis, Science **288**, 468 (2000).
14. J. Yu, S. Massidda, and A. J. Freeman, Phys. Lett. **A122**, 203 (1987).
15. W. E. Pickett, H. Krakauer, R. E. Cohen, and D. J. Singh, Science **255**, 46 (1992).
16. R. Combescot and X. Leyronas, Phys. Rev. Lett. **75**, 3732 (1995); Phys. Rev. **B54**, 4320 (1996).
17. R. Combescot, Phys. Rev. **B57**, 8632 (1998).
18. P. V. Bogdanov, A. Lanzara, X. J. Zhou et al., Phys. Rev. **B64**, 180505 (2001).
19. Z.-X. Shen, W. E. Spicer, D. M. King et al., Science **267**, 343 (1995).
20. H. Suhl, B. T. Matthias, L. R. Walker, Phys. Rev. Lett. **3**, 552 (1959); В. А. Москаленко, ФММ **4**, 503 (1959).
21. P. Fulde, R. A. Ferrel, Phys. Rev. **135**, A550 (1964); А. И. Ларкин, Ю. Н. Овчинников, ЖЭТФ **47**, 1136 (1964).