

Динамическая природа хаоса в электронных системах высокотемпературных сверхпроводников

М. В. Зверев¹⁾, В. А. Ходель

Российский научный центр “Курчатовский институт”, 123182 Москва, Россия

Поступила в редакцию 14 марта 2002 г.

В рамках модели фермионной конденсации – фазового перехода, формирующего при $T = 0$ плато в спектре одночастичных возбуждений у поверхности Ферми, анализируются черты спектральных функций нормальных состояний высокотемпературных сверхпроводников, присущие маргинальной ферми-жидкости, загрязненной примесями. Показано, что в рассматриваемой модели ответственным за подобное поведение является фермионный конденсат, который играет роль примесной подсистемы, поскольку при $T = 0$ его энергетический спектр – бездисперсионный. Обсуждается влияние анизотропии распределения этого конденсата в зоне Бриллюэна на спектральные функции.

PACS: 71.27.+a, 74.20.Mn

Среди многочисленных аномалий высокотемпературной сверхпроводимости привлекают внимание необычные свойства электронной спектральной функции $A(\mathbf{p}, \varepsilon)$, определяемой формулой

$$\begin{aligned} \pi A(\mathbf{p}, \varepsilon) &= -\text{Im} G_R(\mathbf{p}, \varepsilon) = \\ &= \frac{\gamma(\mathbf{p}, \varepsilon)}{(\varepsilon - \epsilon_{\mathbf{p}}^0 - \text{Re} \Sigma(\mathbf{p}, \varepsilon))^2 + \gamma^2(\mathbf{p}, \varepsilon)} \end{aligned} \quad (1)$$

и извлекаемой из прецизионных фотоэмиссионных данных (ARPES) [1–3]. В (1) введены следующие обозначения: G_R – запаздывающая гриновская функция, $\gamma = -\text{Im} \Sigma_R$ (знак $\gamma(\mathbf{p}, \varepsilon)$ всегда положителен), энергия ε отсчитывается от химического потенциала μ , а затравочный спектр $\epsilon_{\mathbf{p}}^0$ вычисляется в рамках стандартной схемы LDA. Особенно ярко эти аномалии проявляются в нормальной фазе. В области, примыкающей к диагоналям зоны Бриллюэна, которую в дальнейшем мы будем обозначать буквой М, величина $\gamma_M(\mathbf{p}, \varepsilon)$ меняется с энергией линейно – поведение, характерное не для ландауской, а для маргинальной ферми-жидкости [4]. А по мере приближения к точкам ван Хофа $(\pm\pi, 0)$ и $(0, \pm\pi)$ электронная линия еще более уширяется, приобретая почти лоренцовскую форму.

Сразу отметим, что пока энергетическое разрешение составляет около 10 мэВ, и потому, анализируя экспериментальные данные, мы, в основном, будем интересоваться энергиями $\varepsilon > T$, где погрешности измерений относительно невелики. Одна из загадок состоит в том, что хотя при таких энергиях экспериментальная зависимость функции $\gamma_M(\mathbf{n}, \varepsilon)$, где

$\mathbf{n} = \mathbf{p}/p$, от ε и дается линией, близкой к прямой, но если ее экстраполировать к нулевой энергии, то, в противовес предсказанию модели маргинальной ферми-жидкости, та не попадет в начало координат, а пройдет выше. Это особенно отчетливо проявляется в компаунде $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ [5]. Конечно, если в системе есть примеси, такое поведение легко объяснимо. Но на эксперименте длина отрезка, отсекаемого указанной прямой на вертикальной оси, зависит от \mathbf{n} , что ставит это объяснение под удар, поскольку обычно примеси распределены хаотически и рассеивают электроны упруго и изотропно. Определенная анизотропия в $\gamma_M(\mathbf{n}, \varepsilon)$ могла бы возникнуть [6], если бы примеси были локализованы между плоскостями, вдоль которых движутся электроны, но механизм такой избирательной локализации пока неизвестен.

В этой заметке мы покажем, что обсуждаемые аномалии, которые интерпретируются как проявления обычного хаоса [6], могут быть обусловлены причинами, не связанными с загрязнением сверхпроводника. Как и в предыдущей работе [7], тоже посвященной спектральным функциям высокотемпературных сверхпроводников, мы предположим, что в их электронной системе происходит фермионная конденсация. Этот фазовый переход состоит в спонтанном разделении сильно коррелированной системы на две подсистемы. Одночастичный спектр $\epsilon(\mathbf{p})$ одной из них похож на спектр обычной ферми-жидкости. Другая подсистема – фермионный конденсат (ФК) – представляет собой набор одночастичных состояний, энергия $\epsilon(\mathbf{p})$ которых при $T = 0$ равна μ [8–12]. Даже в квадратной решетке распределение ФК анизотропно [9, 13] – он оккупирует район C вблизи точек ван

¹⁾e-mail: zverev@mbslab.kiae.ru

Хова, причем при изменении допинга, как и других входных параметров, величина безразмерного параметра η , характеризующего его “жилую площадь”, остается малой, не превышая 10–15%.

При $T = 0$ конденсатная гриновская функция нулевого приближения $G_C^{(0)}(\mathbf{p}, \varepsilon)$ есть просто $1/\varepsilon$, а спектральная функция ФК имеет почти тот же вид $A_C^{(0)}(\mathbf{p}, \varepsilon) \sim \delta(\varepsilon)$, что и спектральная функция конденсата в бозе-жидкости, чему, собственно, и обязано само название рассматриваемого явления. Наличие δ -функции в $A_C^{(0)}$ делает рассеяние надконденсатных частиц на конденсате абсолютно упругим, как на примесях. Правда, число конденсатных частиц ни в бозе-, ни в ферми-системах не сохраняется, в процессах рассеяния они могут покинуть конденсат и возвращаться обратно. В жидком He-4 импульс частиц бозе-конденсата равен нулю, и учет подобных переходов ведет, как известно [14], к появлению полюса в массовом операторе надконденсатных частиц, уничтожая всякое соответствие между примесной системой и конденсатом. В ферми-системах положение иное: конденсат занимает целую область в импульсном пространстве и поэтому возможные особенности Σ замазываются при интегрировании по конденсатным импульсам. Следовательно, будь нулевое приближение $A_C^{(0)}(\varepsilon) \sim \delta(\varepsilon)$ справедливым, единственная существенная разница между ФК и примесной системой заключалась бы в анизотропии распределения ФК. Именно она, как мы сейчас увидим, приводит к анизотропии электронной спектральной функции $A_C^{(0)}(\mathbf{p}, \varepsilon)$. Чтобы убедиться в этом, обратимся к уравнению [15]

$$\begin{aligned} \text{Im} \Sigma_R(\mathbf{p}, \varepsilon > T) &\sim \int \int \int \int_0^\varepsilon \int_0^\omega |\Gamma(\mathbf{p}, \varepsilon, \mathbf{p}_1, \varepsilon_1, \mathbf{q}, \omega)|^2 \times \\ &\times \text{Im} G_R(\mathbf{p} - \mathbf{q}, \varepsilon - \omega) \text{Im} G_R(-\mathbf{p}_1, -\varepsilon_1) \times \\ &\times \text{Im} G_R(\mathbf{q} - \mathbf{p}_1, \omega - \varepsilon_1) d\mathbf{p}_1 d\mathbf{q} d\omega d\varepsilon_1 \end{aligned} \quad (2)$$

для мнимой части массового оператора Σ_R в нормальной фазе.

Напомним, что входящая в это уравнение амплитуда рассеяния Γ должна существенно зависеть от импульсов – в противном случае о фермионной конденсации не может быть и речи. Искомая импульсная зависимость Γ возникает, когда система приближается к точке фазового перехода второго рода, связанного, например, с появлением в основном состоянии волн зарядовой [16] или спиновой плотности [13], и тогда перестройка одночастичного спектра системы с образованием ФК предшествует коллапсу коллективных степеней свободы.

В дальнейшем мы сосредоточимся на антиферромагнитном сценарии фермионной конденсации, когда амплитуда Γ , вычисленная в отсутствие ФК, имеет резкий максимум при переданном импульсе, равном антиферромагнитному вектору $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$, и сингулярная часть Γ дается формулой [17]

$$N_0 \Gamma(\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{Q}, \omega) = - \frac{\sigma_1^i \sigma_2^i}{\kappa^2 p_F^{-2} (\mathbf{q} - \mathbf{Q})^2 + \beta^2 + i\omega/\omega_0}. \quad (3)$$

Здесь плотность состояний N_0 – стандартный безразмеривающий множитель, а параметр β обращается в нуль в точке антиферромагнитного фазового перехода.

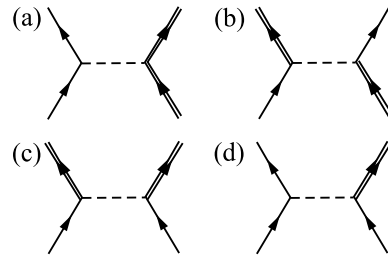


Рис.1. Диаграммы рассеяния, вносящие вклад в мнимую часть массового оператора $\gamma_M(\mathbf{p}, \varepsilon)$ в околодиагональном районе M . Надконденсатной частице отвечает одинарная линия, а конденсатной – двойная

Исследование различных вкладов в (2) мы начнем с изображенной на рис.1а диаграммы рассеяния надконденсатных частиц конденсатом. Она – прямой аналог диаграммы рассеяния электронов на примесях в “грязных” сверхпроводниках. Подставляя в (2) спектральную функцию $A_C^{(0)}(\mathbf{p}, \varepsilon) = \nu_C(\mathbf{p})\delta(\varepsilon)$, найдем, что вклад γ_M^a этой диаграммы в γ_M при относительно малых ε дается формулой

$$\begin{aligned} \gamma_M^a(\mathbf{p}) &\sim N_0^{-1} \varepsilon_F^0 \int \frac{S_C(\mathbf{p} - \mathbf{p}_1)}{[\kappa^2 p_F^{-2} (\mathbf{p} - \mathbf{p}_1 - \mathbf{Q})^2 + \beta^2]^2} \times \\ &\times \frac{\gamma_M(\mathbf{p}_1)}{[\xi_M^2(\mathbf{p}_1) + \gamma_M^2(\mathbf{p}_1)]} d\mathbf{p}_1. \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь введены обозначения $\xi_M(\mathbf{p}) = \epsilon_M(\mathbf{p}) - \mu = p_F(p - p_F)/M_0^*$, где $M/M_0^* = 1 + (\partial R \Sigma / \partial \xi_p^0)_F$, и $S_C(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{p}} \nu_C(\mathbf{p}) \nu_C(\mathbf{p} - \mathbf{q})$, причем $\nu_C(\mathbf{p} \notin C) = 0$.

Как и в задаче с примесями, γ_M^a не зависит от ε . Но, в отличие от этой задачи, в рассматриваемом случае импульсная зависимость подынтегрального выражения оказывается достаточно сложной, во-первых, из-за сингулярности по переданному импульсу амплитуды рассеяния Γ , а во-вторых, из-за

анизотропии импульсного распределения ФК. Последняя проявляется в том, что функция $S_C(\mathbf{q})$ имеет два почти одинаковых максимума шириной $\sim \sqrt{\eta} p_F$ и величиной $\sim \eta p_F$, отвечающих двум узким “окнам” для переданных импульсов $\mathbf{q} = (\mathbf{p} - \mathbf{p}_1)$. Одно окно отвечает малым $q \leq \sqrt{\eta} p_F$, другое – малым $|\mathbf{q} - \mathbf{Q}| \leq \sqrt{\eta} p_F$, так что $S_C(\mathbf{q}) = S_C(\mathbf{q} - \mathbf{Q})$.

При интегрировании (4) по \mathbf{p}_1 в первой из этих областей сингулярная часть амплитуды рассеяния Γ никак не проявляется, и потому там Γ можно положить постоянной и вынести из-под знака интеграла, после чего, как обычно, проинтегрировать по абсолютной величине импульса p_1 , что дает

$$\gamma_M^a(\mathbf{p}) \sim \varepsilon_F^0 \int S_C(\mathbf{p} - \mathbf{p}_1) d\mathbf{n}_1, \quad (5)$$

(сам вектор \mathbf{p}_1 должен лежать на линии Ферми). Результат интегрирования фактически изотропен. Его величина $\sim \eta^{3/2}$ подавлена по сравнению со стандартной ($\sim \eta$) именно из-за анизотропии распределения ФК.

Второе окно открывается при перебросе конденсатных частиц из одного “пятна” ФК в другое, и здесь максимум функции $S_C(\mathbf{q})$ совпадает с максимумом амплитуды $\Gamma(\mathbf{q})$. При вычислении этого интеграла можно воспользоваться тем фактом, что линия Ферми представляет собой кривую, близкую к окружности с центром в углу зоны Бриллюэна. Поместив начало координат в этот угол, вначале проинтегрируем по углам вектора \mathbf{p}_1 , а уже потом – по абсолютной величине p_1 или, что эквивалентно, по энергии ξ_1 . Величина интеграла (4), который берется только численно, кардинально зависит от того, насколько далеко от линии Ферми лежит вектор $\mathbf{p} - \mathbf{Q}$, что, в конечном итоге, и обуславливает анизотропию $\gamma_M(\mathbf{n})$ (см. ниже).

Что касается вкладов в γ_M процессов, изображенных на рис.1b и 1c, то здесь перебросы подавлены, переданный импульс \mathbf{q} не бывает близким к \mathbf{Q} , и, следовательно, эти вклады в γ_M изотропны, а их величина $\sim \eta^{3/2}$.

Диаграмма рис.1d, отвечающая излучению одной конденсатной частицы при столкновении пары надконденсатных частиц, и ей подобные рассчитываются по формуле

$$\gamma_M^d(\mathbf{p}, \varepsilon) \sim \eta N_0^{-2} \int \frac{P_M(\mathbf{p} - \mathbf{q}, \varepsilon)}{[\kappa^2 p_F^{-2} (\mathbf{p} - \mathbf{p}_1 - \mathbf{Q})^2 + \beta^2]^2} d\mathbf{q}. \quad (6)$$

Обозначение $P_M(\mathbf{q}, \varepsilon)$ введено здесь для мнимой части частично-дырочного пропагатора в области М.

Этот интеграл набирается в широкой области переданных импульсов \mathbf{q} , так что сингулярная компонента амплитуды $\Gamma(\mathbf{q})$ опять остается не у дел. Используя для P_M стандартную формулу $P_M(\mathbf{q}, \varepsilon) \sim \varepsilon$, мы находим, что вклад диаграммы рис.1d в γ_M пропорционален энергии ε и плотности η , но почти не зависит от \mathbf{p} [18]. На этом список вкладов в γ_M практически исчерпывается, так как появление в компании с распадающейся надконденсатной частицей одних только частиц ФК кинематически запрещено или, на худой конец, сильно подавлено. Суммируя все, для мнимой части массового оператора в околodiагональном районе М получаем результат:

$$\gamma_M(\mathbf{n}, \varepsilon) = \gamma_0(\mathbf{n}) + s_0 \varepsilon, \quad (7)$$

отличающийся от постулированного в [4] наличием дополнительного слагаемого $\gamma_0(\mathbf{n})$, не зависящего от энергии ε – того самого, которое “заведует” динамическим хаосом в системах с ФК.

Посмотрим теперь, что и как меняется в этой картине, если вспомнить, что состояния, принадлежащие ФК, затухают. При анализе эффектов затухания следует иметь в виду, что при конечной температуре полюсы $G_C(\varepsilon)$ смещаются в комплексную плоскость. При этом и реальная ξ , и мнимая часть γ полюса оказываются пропорциональны T [10, 18]. Если бы дрейф полюса был единственным серьезным изменением в функции Грина $G_C(\varepsilon)$, то переданная при рассеянии надконденсатных частиц на ФК энергия имела бы порядок γ , то есть порядок T , а тогда в изложенной выше картине менять было бы нечего, поскольку здесь мы рассматриваем только случай $\varepsilon > T$.

Но, на самом деле, у конденсатной линии имеются крылья. Своим появлением они обязаны тому обстоятельству, что в области достаточно больших энергий $\varepsilon > T$ конденсатная спектральная функция почти целиком определяется расpadом частицы ФК на три таких же частицы. Для ведущего по ε члена расчет дает [7]

$$A_C(\varepsilon) \sim \beta (\eta \varepsilon_F^0 |\varepsilon|)^{-1/2}. \quad (8)$$

Влияние крыльев конденсатной линии на γ_M выясняется с помощью все той же формулы (2). При малых энергиях добавка $\delta\gamma_M^w$ к γ_M вычисляется на основе формулы, которая отличается от (4) лишь дополнительным интегрированием по частотам и множителем

$$P_C(\omega) = \int_0^\omega A_C(\varepsilon) A_C(\omega - \varepsilon) d\varepsilon. \quad (9)$$

Взятый с другим знаком, этот интеграл есть не что иное, как мнимая часть частично-дырочного пропагатора. Подставляя в (9) спектральную функцию (8), получаем

$$P_C(\omega) = \text{const}, \quad (10)$$

результат, который пришлось постулировать авторам [4], чтобы получить маргинальное поведение электронного массового оператора Σ .

Как показывает более детальный анализ, особого постоянства у $P_C(\omega)$ в системах с ФК нет, хотя, в противоположность теории ферми-жидкости, эта функция действительно не исчезает при $\omega = 0$. Причина этих вариаций связана с добавочными слагаемыми, опущенными в формуле (8), справедливой лишь при весьма малых ε . Первая поправка к $P_C(\omega)$ ведет себя как $\sqrt{\omega}$, а отвечающий ей вклад в γ_M пропорционален $\varepsilon^{3/2}$. Заметим, что вклад диаграммы с излучением только одной частицы ФК, тоже пропорциональный $\varepsilon^{3/2}$, оказывается того же порядка, что и этот добавочный вклад.

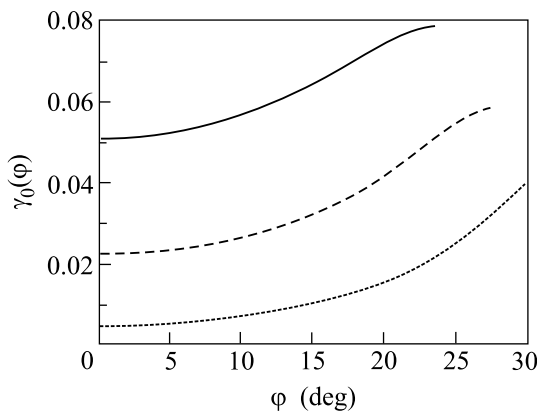


Рис.2. Не зависящий от энергии член в мнимой части массового оператора $\gamma_0(\varphi)$ в единицах ε_F^0 как функция угла φ отклонения вектора \mathbf{n} от диагонали зоны Бриллюэна для различных значений конденсатного параметра: $\eta = 0.13$ (сплошная линия), $\eta = 0.10$ (штриховая линия) и $\eta = 0.07$ (пунктир). В расчете использовалось эффективное взаимодействие (3) с параметрами $\beta = 0.3$, $\kappa = 1$

В расчетах анизотропии $\gamma_M(\mathbf{n})$, результаты которых приведены на рис.2, как и в вычислениях $P_C(\omega)$, эффективное электрон-электронное взаимодействие бралось в виде (3), а спектр – в форме $\varepsilon_{\mathbf{p}}^0 = -e_0[\cos(ap_x) + \cos(ap_y) - 2t \cos(ap_x) \cos(ap_y)]$ с параметром $t = 0.45$ [19]. В расчетах мы также учли зависимость $\text{Re } \Sigma$ от энергии. Для нахождения этой функции использовалось связывающее ее с $\text{Im } \Sigma$ соотношение Крамерса-Кронига в форме [20]

$$\text{Re } \Sigma(\mathbf{p}, \varepsilon) - \text{Re } \Sigma(\mathbf{p}, \varepsilon = 0) =$$

$$= \frac{\varepsilon}{\pi} P \left[\int_0^{\infty} \frac{\text{Im } \Sigma(\mathbf{p}, \varepsilon_1)}{\varepsilon_1(\varepsilon_1 - \varepsilon)} d\varepsilon_1 - \int_0^{\infty} \frac{\text{Im } \Sigma(\mathbf{p}, -\varepsilon_1)}{\varepsilon_1(\varepsilon_1 + \varepsilon)} d\varepsilon_1 \right]. \quad (11)$$

Система уравнений (2), (11) решалась итерациями, которые сходятся достаточно быстро (за 8–10 шагов).

Сравнивая расчеты с экспериментальными данными, следует иметь в виду, что единственно надежно измеряемой в ARPES характеристикой на линии Ферми является полуширина линии, которая имеет лоренцовскую форму в импульсном пространстве. Из измерений извлекается отношение $\text{Im } \Sigma/v_F$, где $v_F = (\partial \xi_p^0 / \partial p) [1 + (\partial \Sigma / \partial \xi)_F]$. Величину $v_F^0 = \partial \xi_p^0 / \partial p$ можно взять из LDA расчетов. Второй множитель обычно берут равным единице, а это – плохое приближение, если вспомнить наблюдаемое выполаживание одночастичных спектров $\varepsilon(\mathbf{p})$ по мере приближения к точкам ван Хофа.

Итак, в рамках антиферромагнитного сценария фермионной конденсации мы показали, что характерные черты хаоса проявляются в электронных системах, даже полностью очищенных от примесей высокотемпературных сверхпроводников. Эти особенности целиком связаны с возникающим в точке фермионной конденсации разделением рассматриваемой системы на две, одна из которых – фермионный конденсат, то есть природа этого хаоса – чисто динамическая. Похожие черты динамического хаоса должны проявляться и в окрестности других фазовых переходов, например, при возникновении волн зарядовой плотности, где этому переходу тоже предшествует фермионная конденсация [16]. И, действительно, прецизионные фотоэмиссионные данные, полученные в последнее время на компаунде 2HTaSe_2 [21, 22], показывают разительное сходство в поведении $\text{Im } \Sigma$ этой системы и высокотемпературных сверхпроводников.

В заключение авторы приносят глубокую благодарность Л. П. Горькову, Г. Е. Воловику, Н. Е. Зейну, Э. Е. Саперштейну, а также P. W. Anderson, A. Kaminski, J. W. Clark, G. Kotliar, A. J. Millis, M. R. Norman за плодотворное обсуждение вопросов, затронутых в данной работе. Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант # 00-15-96590), NSF (Grant # PHY-9900713) и McDonnell Center for the Space Sciences.

1. Z.-X. Shen and J.R. Schrieffer, Phys. Rev. Lett. **78**, 1771 (1997).

2. M. R. Norman, H. Ding, H. Fretwell et al., *Phys. Rev.* **B60**, 7585 (1999).
3. T. Valla, A. V. Fedorov, P. D. Johnson et al., *Science* **285**, 2110 (1999).
4. C. M. Varma, P. B. Littlewood, S. Schmitt-Rink et al., *Phys. Rev. Lett.* **63**, 1996 (1989).
5. A. Kaminski, M. Randeria, J. C. Campuzano et al., *Phys. Rev. Lett.* **86**, 1070 (2001).
6. E. Abrahams and C. M. Varma, cond-mat/0003135.
7. М. В. Зверев, В. А. Ходель, Письма в ЖЭТФ **74**, 502 (2001).
8. В. А. Ходель, В. Р. Шагинян, Письма в ЖЭТФ **51**, 553 (1990); *Condensed Matter Theories* **12**, 222 (1997).
9. Г. Е. Воловик, Письма в ЖЭТФ **53**, 222 (1991); **59**, 798 (1994).
10. P. Nozieres, *J. Phys. I France* **2**, 443 (1992).
11. M. R. Norman, 1999, in *High Temperature Superconductivity*, Eds. S. E. Barnes, J. Ashkenazi, J. L. Cohn, and F. Zuo (AIP, Woodbury, 1999), 298.
12. V. Yu. Irkhin, A. A. Katanin, and M. I. Katsnelson, cond-mat/0110516.
13. М. В. Зверев, В. А. Ходель, Дж. У. Кларк, *JETP Letters* **74**, 46 (2001).
14. С. Т. Беляев, *ЖЭТФ* **34**, 417 (1958).
15. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, М: Физматгиз, 1962.
16. В. А. Ходель, В. Р. Шагинян, М. В. Зверев, Письма в ЖЭТФ **65**, 242 (1997).
17. A. J. Millis, H. Monien, and D. Pines, *Phys. Rev.* **B42**, 167 (1990).
18. J. Dukelsky, V. A. Khodel, P. Schuck, and V. R. Shaginyan, *Z. Phys.* **B102** 245 (1997).
19. T. Schneider and M. P. Sørensen, *Z. Phys.* **B80**, 331 (1990); **81**, 3 (1990).
20. А. Б. Мигдал, *Теория конечных ферми-систем и свойства атомных ядер*, М: Наука, 1967.
21. R. Liu, C. G. Olson, W. C. Tonjes, and R. F. Frindt, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 5762 (1998).
22. T. Valla, A. V. Fedorov, P. D. Johnson et al., *Phys. Rev. Lett.* **85**, 4759 (2000).