Письма в ЖЭТФ, том 72, вып.8, стр.628 - 633

ВЕРШИННЫЕ ФУНКЦИИ КАК ФАКТОР УСИЛЕНИЯ МЕЖЭЛЕКТРОННОГО ПРИТЯЖЕНИЯ В d-ВОЛНОВОМ КАНАЛЕ ПРИ "КУЛОНОВСКОМ" МЕХАНИЗМЕ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ

Э.А.Пашицкий, В.И.Пентегов

Институт физики НАН Украины
01022 Киев, Украина

Поступила в редакцию 7 сентября 2000 г.
После переработки 22 сентября 2000 г.

Показано, что в высокотемпературных сверхпроводниках на основе слоистых купратных металлооксидов многочастичные кулоновские корреляции, описывающиеся кулоновскими вершинными функциями Γ_c, приводят к существенному усилению эффективного межэлектронного притяжения в d-волновом куперовском канале. Это притяжение возникает благодаря совместному действию сильной анизотропии квазидвумерного электронного спектра в плоскости слоев и эффекта подавления экранированного кулоновского отталкивания при малых передаваемых импульсах в результате малоуглового рассеяния носителей тока на длинноволновых флуктуациях зарядовой плотности. Такой "кулоновский" механизм анизотропного куперовского спаривания способен обеспечить высокие значения критической температуры перехода в сверхпроводящее состояние $T_c \geq 100$ К при оптимальном уровне допирования купратов.

PACS: 74.20.-z, 74.72.Bk

1. Характерной особенностью высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) на основе слоистых купратных металлооксидных соединений (МОС) является экспериментально наблюдаемая $d_{x^2-y^2}$-симметрия сверхпроводящего параметра порядка [1–3]. Возможность такой симметрии сверхпроводящей щели в ВТСП обсуждалась в [4] в рамках узельного представления модели Хаббарда, а затем в работах [5–7], в которых рассматривалась модель почти антиферромагнитной квазидвумерной ферми-жидкости с сильными спиновыми корреляциями. Однако в электрон-электронном взаимодействии, наряду с обменным (спин-флуктуационным) каналом, существует также прямой кулоновский (зарядово-флуктуационный) канал, который не учитывался в [4–7].

В работах [8, 9] в приближении хаотических фаз было показано, что протяженные седловые особенности (СО), существующие в квазидвумерном зонном спектре слоистых кристаллов купратных МОС [10, 11], приводят к сильной анизотропии эффективной массы и групповой скорости квазичастиц вблизи поверхности Ферми и могут служить причиной появления в коллективном электронном спектре длинноволновых низкочастотных сильно затухающих возбуждений электронной плотности с акустическим законом дисперсии ($\omega_q \propto q$ при $q \to 0$). Такие возбуждения аналогичны акустическим плазмонам [12] в многозонных металлах с многосвязной анизотропной поверхности Ферми, а также в многодолинных вырожденных полупроводниках и полуметаллах [13–15].

Как было показано в [9], малоугловое неупругое рассеяние электронов на длинноволновых коллективных флуктуациях зарядовой плотности (ФЗП) в купратных МОС с протяженными СО в 2D зонном спектре приводит к ослаблению экранированного кулоновского отталкивания в области малых передаваемых импульсов $\mathbf{q}$. В сочетании с сильной анизотропией спектра квазичастиц в плоскости слоев, обусловленной протяженными СО, минимум кулоновского отталкивания при малых q (так же, как и максимум отталкивания в углах зоны Бриллюэна [7]) приводит к эффективному межэлектронному притяжению в d-волновом куперовском канале.

В настоящей работе показано, что такое анизотропное притяжение, обусловленное обменом виртуальными длинноволновыми ФЗП, так же, как и электрон-плазмонное взаимодействие (ЭПВ) в изотропном s-волновом канале (см. [16, 17]), существенно усиливается благодаря многочастичным кулоновским корреляциям типа эффектов локального поля, которые описываются кулоновскими вершинными функциями Γ_c. В результате этого такой "кулоновский" механизм куперовского спаривания даже без учета других взаимодействий (электрон-фононного, электрон-магнонного) способен обеспечить высокие значения критической температуры $T_c \geq 100$ К перехода в сверхпроводящее состояние с $d_{x^2-y^2}$-симметрией параметра порядка при оптимальном уровне допирования купратных МОС.

2. Будем исходить из уравнений стандартной теории сверхпроводимости для нормальной и аномальной собственно-энергетических частей в приближении сильной связи [18], в которых в качестве межэлектронного взаимодействия используется только экранированное кулоновское взаимодействие с учетом эффектов запаздывания, обусловленных обменом виртуальными плазмонами (длинноволновыми ФЗП).

Поскольку основной вклад в эффективное взаимодействие между квазичастицами вносят коллективные плазмонные моды с частотами $\Omega >> T_c$, линеаризованное вблизи критической температуры интегральное уравнение для перенормированной анизотропной СП щели на ПФ в приближении сильной связи приводится к виду

$$Z_c\left(\mathbf{k}_{||},0\right)\Delta\left(\mathbf{k'}_{||}\right) = -\frac{1}{2}\int\frac{d^2k'_{||}}{(2\pi)^2}\frac{\Delta\left(\mathbf{k'}_{||}\right)}{\tilde{\xi}\left(\mathbf{k'}_{||}\right)}\left\langle\tilde{V}_c\left(\mathbf{k}-\mathbf{k'},0\right)\right\rangle_{\perp}\times$$

$$\times\Gamma_c^2\left(\mathbf{k}_{||},0;\mathbf{k}_{||}-\mathbf{k'}_{||},0\right)\mathrm{Th}\frac{\tilde{\xi}\left(\mathbf{k'}_{||}\right)}{2T_c}. \tag{1}$$

Здесь $Z_c\left(\mathbf{k}_{||},0\right)$ – кулоновский ренормализационный фактор на ПФ, который возникает благодаря запаздывающему ЭПВ, $\tilde{\xi}\left(\mathbf{k}_{||}\right) = \xi\left(\mathbf{k}_{||}\right)/Z_c\left(\mathbf{k}_{||},0\right)$ – отсчитываемая от уровня Ферми перенормированная энергия электронов с продольным импульсом $\mathbf{k}_{||}$ в плоскости слоев, $\Gamma_c\left(\mathbf{k}_{||},0;\mathbf{k}_{||}-\mathbf{k'}_{||},0\right)$ – кулоновская вершинная функция в статическом пределе, а $\left\langle\tilde{V}_c\left(\mathbf{k}-\mathbf{k'},0\right)\right\rangle_{\perp}$ – усредненный по поперечному передаваемому импульсу q_z матричный элемент статического экранированного кулоновского отталкивания (ЭКО).

Следует подчеркнуть, что квадрат нормальной кулоновской вершины Γ_c в правой части уравнения (1) возникает благодаря учету аномальных кулоновских вершин $\tilde{\Gamma}_c$ (см. [19, 20]) и способствует существенному усилению как кулоновского отталкивания, так и эффективного межэлектронного притяжения, обусловленного запаздывающим ЭПВ.

Точное вычисление вершинной функции Γ_c не представляется возможным ввиду отсутствия малого параметра для кулоновского взаимодействия в реальных системах. Поэтому для оценки кулоновской вершины при ненулевых температурах $T \neq 0$ воспользуемся аппроксимацией Намбу [21, 22], которая удовлетворяет тождеству

Уорда [23] при $\mathbf{q} \to 0$ и в мацубаровском представлении имеет вид

$$\Gamma_c\left(\mathbf{k}_{||}, \omega_n; \mathbf{q}_{||}, \nu_m\right) = \frac{1}{2}\left[Z_c\left(\mathbf{k}_{||} + \mathbf{q}_{||}, \omega_n + \nu_m\right) + Z_c\left(\mathbf{k}_{||}, \omega_n\right)\right], \tag{2}$$

где

$$Z_c\left(\mathbf{k}_{||}, \omega_n\right) = 1 - \frac{\mathrm{Im}\Sigma_c\left(\mathbf{k}_{||}, \omega_n\right)}{\omega_n}, \tag{3}$$

а Σ_c – нормальная собственно-энергетическая часть, которая определяется уравнением

$$\Sigma_c\left(\mathbf{k}_{||}, \omega_n\right) = -\frac{T}{a^2N^2}\sum_{\omega'_n}\sum_{\mathbf{k}'_{||}}\left\langle \tilde{V}_c\left(\mathbf{k} - \mathbf{k}', \omega_n - \omega'_n\right)\right\rangle_{\perp} G\left(\mathbf{k}'_{||}, \omega'_n\right) \times$$
$$\times \Gamma_c\left(\mathbf{k}_{||}, \omega_n; \mathbf{k} - \mathbf{k}', \omega_n - \omega'_n\right) \tag{4}$$

Здесь $\nu_m = 2m\pi T$ и $\omega_n = (2n+1)\pi T$ – бозонные и фермионные дискретные частоты ($m, n = 0, \pm1, \pm2, \ldots$), a – постоянная решетки, N^2 – число дискретных значений импульса в пределах первой зоны Бриллюэна, $G\left(\mathbf{k}_{||}, \omega_n\right)$ – одноэлектронная функция Грина, а $\left\langle \tilde{V}_c\left(\mathbf{k} - \mathbf{k}', \omega_n - \omega'_n\right)\right\rangle_{\perp}$ – усредненный матричный элемент запаздывающего ЭКО, определяющийся перенормированным поляризационным оператором электронов:

$$\tilde{\Pi}_e\left(\mathbf{q}_{||}, \nu_m\right) = -\frac{2T}{a^2N^2}\sum_{\omega_n}\sum_{\mathbf{k}_{||}} G\left(\mathbf{k}_{||}, \omega_n\right) G\left(\mathbf{k}_{||} + \mathbf{q}_{||}, \omega_n + \nu_m\right) \times$$
$$\times \Gamma_c\left(\mathbf{k}_{||}, \omega_n; \mathbf{q}_{||}, \nu_m\right). \tag{5}$$

Численное решение системы уравнений (2)–(5) проводилось с помощью самосогласованного метода быстрого разложения Фурье на решетке, содержащей $N \times N =$ $= 4096$ точек в 2D зоне Бриллюэна и до 2048 точек на мнимой частотной оси с последующим аналитическим продолжением на вещественную ось ω с использованием многоточечных аппроксимаций Паде.

В качестве исходного спектра электронов $E\left(\mathbf{k}_{||}\right)$ выбиралась антисвязывающая ветвь $E_-\left(k_x, k_y\right)$ эмпирического 2D зонного спектра купратных слоев CuO_2 (рис.1), который был предложен в работе [11] на основе данных ARPES экспериментов для кристаллов Y-123.

Перенормированный электронный спектр $\tilde{E}_-\left(k_x, k_y\right)$, соответствующий полюсу одноэлектронной функции Грина и показанный на рис.1 штриховой кривой, характеризуется ярко выраженными протяженными СО вблизи симметричных точек $(\pm\pi, 0)$ и $(0, \pm\pi)$.

На рис.2 представлена импульсная зависимость статической кулоновской вершины $\Gamma_c\left(\mathbf{k}_{||}, 0; \mathbf{q}_{||}, 0\right)$ при $k_x = k_y$, $k = k_F$ (где k_F – импульс Ферми). На рис.2a показана зависимость Γ_c от $\left(q_x, q_y\right)$, полученная на основе эмпирического спектра [11] в рамках аппроксимации (2). Для сравнения на рис.2b приведена аналогичная зависимость для величины $1 + \Gamma_c^{(1)}$, где $\Gamma_c^{(1)}$ – первая поправка перенормированной теории возмущений к кулоновской вершинной функции:

$$\Gamma_c^{(1)}\left(\mathbf{k}_{||}, \omega_n; \mathbf{q}_{||}, \nu_m\right) = \frac{T}{a^2N^2}\sum_{\omega'_n}\sum_{\mathbf{k}'_{||}} \tilde{V}_c\left(\mathbf{k}_{||} - \mathbf{k}'_{||}, \omega_n - \omega'_n\right) \times$$

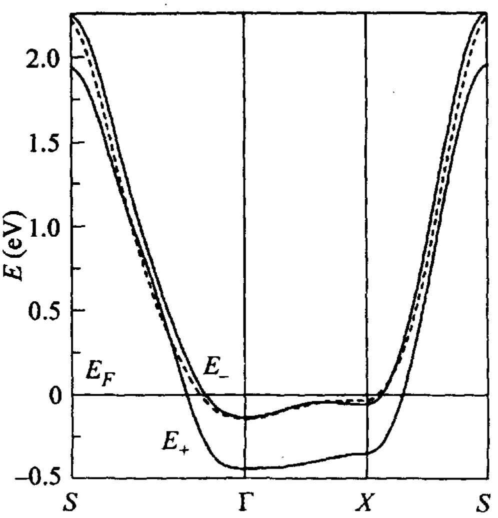

Рис.1. Связывающая, $E_+(k_x, k_y)$, и антисвязывающая, $E_-(k_x, k_y)$, ветви (сплошные линии) эмпирического зонного спектра, предложенного в [11] для купратных 2D слоев кристалла Y-123. Штриховой кривой показан перенормированный за счет межэлектронного взаимодействия спектр $\tilde{E}_-(k_x, k_y)$

$$\times G\left(\mathbf{k}'_{||} + \mathbf{q}_{||}, \omega'_n + \nu_m\right) G\left(\mathbf{k}'_{||}, \omega'_n\right). \tag{6}$$

Как видим, оба приближения – аппроксимация Намбу (2) и учет первой поправки (6) – приводят к сходным импульсным зависимостям $\Gamma_c\left(\mathbf{k}_{||}, 0; \mathbf{q}_{||}, 0\right)$ и почти совпадающим средним значениям $\bar{\Gamma}_c$, что может свидетельствовать о достаточно быстрой сходимости диаграммного ряда для Γ_c.

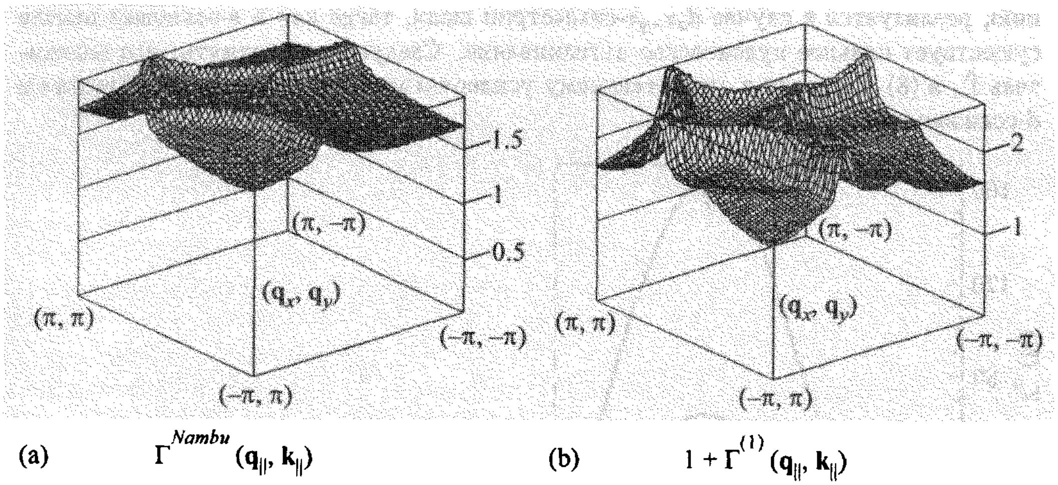

Рис.2. Зависимость кулоновской вершинной функции от $\mathbf{q}$ при $k_x = k_y$, $k = k_F$ в статическом пределе: (a) $\Gamma_c\left(\mathbf{k}_{||}, \mathbf{q}_{||}\right)$ в рамках аппроксимации Намбу (2); (b) $1 + \Gamma_c^{(1)}\left(\mathbf{k}_{||}, \mathbf{q}_{||}\right)$

Расчеты показывают, что вариации Z_c и Γ_c в пределах ЗБ не превышают 10%. Поэтому с хорошей точностью в уравнении (1), а также в (5), можно заменить функции Z_c и Γ_c их усредненными по зоне Бриллюэна значениями $\bar{Z}_c$ и $\bar{\Gamma}_c$. При этом в силу соотношений (2) и (3) можно положить

$$\bar{\Gamma}_c = \bar{Z}_c \equiv \left(1 + \bar{\lambda}_{pl}\right), \tag{7}$$

где $\bar{\lambda}_{pl}$ – усредненная безразмерная константа связи, описывающая изотропное ЭПВ в s-волновом куперовском канале (см. [16, 17]). Согласно проведенным вычислениям, величина $\bar{\Gamma}_c = \bar{Z}_c \approx 2.2$, что соответствует изотропной плазмонной константе связи $\bar{\lambda}_{pl} \approx 1.2$.

3. Критическая температура СП перехода определяется собственными значениями линеаризованного интегрального уравнения (1) для щели на поверхности Ферми, которое при переходе к угловым переменным может быть представлено в следующем виде:

$$\Delta(\varphi) = \bar{\Gamma}_c \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} K(\varphi, \varphi') \Delta(\varphi') \int_0^{\tilde{E}_F} \frac{d\tilde{\xi}}{\tilde{\xi}} \mathrm{Th} \frac{\tilde{\xi}}{2T_c}, \tag{8}$$

где

$$K(\varphi, \varphi') = -\nu(\varphi') \cdot \tilde{V}_e(\varphi, \varphi'). \tag{9}$$

Здесь $\Delta(\varphi) \equiv \Delta(\mathbf{k}_F(\varphi))$, $\tilde{E}_F$ – перенормированная энергия Ферми, φ и φ' – углы между $\mathbf{k}_{||}$ и $\mathbf{k}'_{||}$ и осью a (или b) кристалла в плоскости слоев, $\nu(\varphi')$ – зависящая от угла электронная плотность состояний (ПС) на анизотропной поверхности Ферми, а $\tilde{V}_c(\varphi, \varphi')$ – усредненный по q_z матричный элемент статического ЭКО.

Решение уравнения (8) получено путем разложения ядра $K(\varphi, \varphi')$ и щели $\Delta(\varphi)$ в ряды Фурье по φ и φ' [6]. Благодаря двум эффектам: а) подавлению статического ЭКО при малых передаваемых импульсах за счет длинноволновых ФЗП (см. [8, 9]) и б) сильной анизотропии электронного спектра в плоскости 2D слоев с максимальной ПС в области протяженных СО, структура анизотропного ядра (9) такова, что его максимальное положительное собственное значение, соответствующее притяжению, реализуется в случае $d_{x^2-y^2}$-симметрии щели, тогда как в s-волновом канале существует сильное кулоновское отталкивание. Следует подчеркнуть, что множитель $\bar{\Gamma}_c$ в (8) приводит к существенному усилению межэлектронного притяжения в d-волновом куперовском канале.

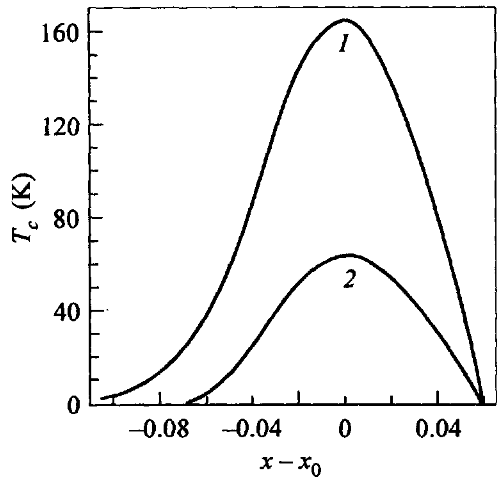

Рис.3. Зависимости T_c от x при $\varepsilon_\infty = 4$ (кривая *1*) и $\varepsilon_\infty = 6$ (кривая *2*)

На рис.3 показаны зависимости T_c от приведенной концентрации x допированных носителей тока (дырок) для разных значений высокочастотной диэлектрической проницаемости ε_∞, которая определяется межзонными электронными переходами. Эти зависимости имеют максимум в точке $x = x_0$, соответствующей положению уровня Ферми вблизи дна протяженных СО, и качественно согласуются с экспериментальными данными для купратных МОС.

Таким образом, даже без учета дополнительных механизмов куперовского спаривания (фононного, магнонного и др.) рассмотренный в данной работе "кулоновский" механизм ВТСП с d-симметрией параметра порядка способен обеспечить достаточно высокие значения максимальной критической температуры $T_c \geq 100\,\text{К}$ при оптимальном допировании благодаря эффективному увеличению (более чем вдвое по сравнению с приближением хаотических фаз [8, 9]) константы связи за счет многочастичных кулоновских корреляций (типа эффектов локального поля), которые описываются вершинной функцией Γ_c.

---

1. D.A.Wollman, D.J. Van Harlingen, J.Giapintzakis et al., Phys. Rev. Lett. **74**, 797 (1995).
2. C.C.Tsuei, J.R.Kirtley, Z.F.Ren et al., Nature **387**, 481 (1997).
3. M.R.Norman, M.Randeria, H.Ding et al., Phys. Rev. **B52**, 15107 (1995).
4. D.J.Scalapino, E.Loh, and J.E.Hirsch, Phys. Rev. **B35**, 6694 (1987).
5. A.J.Millis, H.Monien, and D.Pines, Phys. Rev. **B42**, 167 (1990).
6. T.Moriya, Y.Takahashi, and K.Ueda, J. Phys. Soc. Jpn. **59**, 1905 (1990).
7. P.Monthoux and D.Pines, Phys. Rev. **B47**, 6069 (1993).
8. E.A.Pashitskii, V.I.Pentegov, A.V.Semenov, and E.Abraham, Int. J. Mod. Phys. **B12**, 2946 (1998).
9. Э.А.Пашицкий, В.И.Пентегов, А.В.Семенов, Э.Абрахам, Письма в ЖЭТФ **69**, 703 (1999).
10. K.Gofron, J.C.Campuzano, A.A.Abrikosov et al., Phys. Rev. Lett. **73**, 3302 (1994).
11. M.C.Schabel, C.-H.Park, A.Matsuura et al., Phys. Rev. **B57**, 6090 (1998).
12. D.Pines, Canad. J. Phys. **34**, 1379 (1956).
13. О.В.Константинов, В.И.Перель, ФТТ **9**, 3061 (1967).
14. Э.А.Пашицкий, ЖЭТФ **55**, 2387 (1968).
15. J.Ruvalds, Adv. Phys. **30**, 677 (1981).
16. Э.А.Пашицкий, Письма в ЖЭТФ **57**, 639 (1993); ЖЭТФ **103**, 867 (1993).
17. Э.А.Пашицкий, ФНТ **21**, 995, 1091 (1995).
18. Г.М.Элиашберг, ЖЭТФ **38**, 966 (1960); **39**, 1437 (1960).
19. О.Долгов, Е.Г.Максимов, УФН **138**, 95 (1982).
20. O.V.Dolgov, D.A.Kirzhnits, and E.G.Maksimov, Rev. Mod. Phys. **53**, 81 (1981).
21. Y.Nambu, Phys. Rev. **117**, 648 (1960).
22. Y.Takada, J. Phys. Chem. Solids **54**, 1779 (1993).
23. J.M.Luttinger and J.C.Ward, Phys. Rev. **118**, 1417 (1960).