

## Сверхпроводимость в псевдощелевом состоянии в модели “горячих точек” – моделирование фазовой диаграммы.

Н.А.Кулеева, Э.З.Кучинский, М.В.Садовский

Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург 620016, Россия.

Анализируются особенности сверхпроводящего состояния, формирующегося “на фоне” псевдощели, вызванной флуктуациями ближнего порядка “диэлектрического” (AFM (SDW) или CDW) типа в рамках сценария “горячих точек” на Ферми поверхности. Учитываются все диаграммы теории возмущений по взаимодействию электронов с псевдощелевыми флуктуациями. Найдена зависимость температуры сверхпроводящего перехода  $T_c$  от эффективной ширины псевдощели, корреляционной длины ближнего порядка и концентрации немагнитных примесей. Обсуждается связь этих результатов с общей проблемой описания фазовой диаграммы ВТСП – купратов.

Одной из основных проблем в физике высокотемпературных сверхпроводников на основе оксидов меди остается теоретическое объяснение типичной фазовой диаграммы этих соединений [1]. Особенно важным является прояснение природы псевдощелевого состояния [2], определяющего электронные свойства нормального и сверхпроводящего состояний в широкой области фазовой диаграммы. Предпочтительный “сценарий” формирования псевдощели, по – видимому, связан с моделью сильного рассеяния электронов флуктуациями антиферромагнитного (AFM, SDW) ближнего порядка [2,3].

В работе [6] мы провели микроскопический вывод разложения Гинзбурга – Ландау и рассмотрели влияние таких псевдощелевых флуктуаций (в рамках модели “горячих” точек на поверхности Ферми [2]) на основные свойства сверхпроводника (для случаев  $s$ - и  $d$ -спаривания). Аналогичный анализ на основе уравнений Горькова был выполнен в [7].

В модели почти антиферромагнитной ферми – жидкости [4] взаимодействие электронов со спиновыми флуктуациями описывается динамической восприимчивостью, характеризуемой корреляционной длиной  $\xi$  и частотой  $\omega_{sf}$  спиновых флуктуаций, которые должны определяться из эксперимента и могут зависеть как от кон-

центрации носителей, так и от температуры. Эта восприимчивость, а с ней и взаимодействие, имеет максимум (в импульсном пространстве) в окрестности вектора  $\mathbf{Q} = (\pi/a, \pi/a)$  ( $a$  – постоянная решетки), что приводит к появлению двух типов квазичастиц — “горячих”, с импульсами вблизи точек на поверхности Ферми, связанных вектором рассеяния  $\sim \mathbf{Q}$ , и “холодных”, с импульсами в окрестности частей поверхности Ферми, пересекающих диагонали зоны Бриллюэна [2,4,5].

Для достаточно высоких температур  $2\pi T \gg \omega_{sf}$  можно пренебречь спиновой динамикой [4], так что взаимодействие электрона со спиновыми флуктуациями сводится к статическому гауссову случайному полю. Для такой модели можно предложить упрощенную форму эффективного взаимодействия (коррелятора случайного поля) [4,5], позволяющую провести полное суммирование фейнмановского ряда теории возмущений, что приводит к следующей рекуррентной процедуре для одноэлектронной функции Грина [5]:

$$G(\varepsilon_n \mathbf{p}) = G_{k=0}(\varepsilon_n \mathbf{p}), \quad (1)$$

$$G_k(\varepsilon_n \mathbf{p}) = \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_k(\mathbf{p}) + ikv_k\kappa - \Sigma_k(\varepsilon_n \mathbf{p})} \quad (2)$$

$$\Sigma_k(\varepsilon_n \mathbf{p}) = W^2 s(k+1)G_{k+1}(\varepsilon_n \mathbf{p}) \quad (3)$$

где  $\kappa = \xi^{-1}$  — обратная корреляционная длина псевдощелевых флуктуаций,  $\varepsilon_n = 2\pi T(n + 1/2)$ ,

$$\xi_k(\mathbf{p}) = \begin{cases} \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}} & \text{для нечетных } k \\ \xi_{\mathbf{p}} & \text{для четных } k \end{cases} \quad (4)$$

$$v_k = \begin{cases} |v_x(\mathbf{p} + \mathbf{Q})| + |v_y(\mathbf{p} + \mathbf{Q})| & \text{для нечетных } k \\ |v_x(\mathbf{p})| + |v_y(\mathbf{p})| & \text{для четных } k \end{cases} \quad (5)$$

где  $\mathbf{v}(\mathbf{p}) = \frac{\partial \xi_{\mathbf{p}}}{\partial \mathbf{p}}$  – скорость квазичастицы со спектром  $\xi_{\mathbf{p}}$ , который берется в стандартном виде [4]:

$$\xi_{\mathbf{p}} = -2t(\cos p_x a + \cos p_y a) - 4t' \cos p_x a \cos p_y a - \mu \quad (6)$$

Параметр  $W$  размерности энергии определяет эффективную ширину псевдощели. В рамках полуперенормированного подхода он также определяется из эксперимента [4,5]. Фактор  $s(k)$  определяется комбинаторикой фейнмановских диаграмм, и для случая гейзенберговских спиновых флуктуаций равен [4]:

$$s(k) = \begin{cases} \frac{k+2}{3} & \text{для нечетных } k \\ \frac{k}{3} & \text{для четных } k \end{cases} \quad (7)$$

Замечательным преимуществом нашей модели является возможность выполнить полное суммирование *всех* фейнмановских диаграмм (в том числе с перекрещивающимися линиями взаимодействия) также и для вершинной части, определяющей отклик на произвольное внешнее возмущение [8]. Здесь мы приведем соответствующие рекуррентные уравнения, возникающие для “треугольной” вершины в куперовском канале [6], описывающей отклик на произвольную флуктуацию сверхпроводящего параметра порядка (щели)  $\Delta_{\mathbf{q}}\epsilon(\mathbf{p})$ . Симметричный фактор, определяющий тип спаривания, для случая спаривания  $d$ -типа имеет вид:  $\epsilon(\mathbf{p}) = \cos p_x a - \cos p_y a$ , и мы предполагаем, спаривание синглетно по спину. Интересующая нас вершина записывается как:

$$\Gamma(\varepsilon_n, -\varepsilon_n, \mathbf{p}, -\mathbf{p} + \mathbf{q}) \equiv \Gamma_{\mathbf{p}}(\varepsilon_n, -\varepsilon_n, \mathbf{q})\epsilon(\mathbf{p}) \quad (8)$$

Тогда  $\Gamma_{\mathbf{p}}(\varepsilon_n, -\varepsilon_n, \mathbf{q})$  определяется следующими рекуррентными уравнениями:

$$\Gamma_{\mathbf{p}k-1}(\varepsilon_n, -\varepsilon_n, \mathbf{q}) = 1 - W^2 r(k) G_k(\varepsilon_n, \mathbf{p} + \mathbf{q}) \times G_k(-\varepsilon_n, \mathbf{p}) \Xi_k(\varepsilon_n, \mathbf{p}, \mathbf{q}) \Gamma_{\mathbf{p}k}(\varepsilon_n, -\varepsilon_n, \mathbf{q}) \quad (9)$$

где

$$\Xi_k(\varepsilon_n, \mathbf{p}, \mathbf{q}) = \left\{ 1 + \frac{2ik\kappa v_k}{G_k^{-1}(\varepsilon_n, \mathbf{p} + \mathbf{q}) - G_k^{-1}(-\varepsilon_n, \mathbf{p}) - 2ik\kappa v_k} \right\} \quad (10)$$

“Физическая” вершина  $\Gamma_{\mathbf{p}k=0}(\varepsilon_n, -\varepsilon_n, \mathbf{q})$ .

Дополнительный комбинаторный множитель  $r(k)$  для случая гейзенберговских спиновых (SDW) флуктуаций равен [4]:

$$r(k) = \begin{cases} k & \text{для четных } k \\ \frac{k+2}{3} & \text{для нечетных } k \end{cases} \quad (11)$$

Выбор знака перед множителем  $W^2$  в правой части (9) зависит от симметрии сверхпроводящего параметра порядка и природы псевдощелевых флуктуаций [6], здесь наш выбор соответствует случаю гейзенберговских спиновых (SDW) флуктуаций [10].

Рассеяние на нормальных (немагнитных) примесях может быть легко учтено в самосогласованном борновском приближении. Для этого запишем “уравнение Дайсона” для одноэлектронной функции Грина, обобщающее (2) и показанное в диаграммном виде на Рис. 1 (а), где введена:

$$G_{0k}(\varepsilon_n \mathbf{p}) = \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_k(\mathbf{p}) + ikv_k \kappa} \quad (12)$$

так что вместо (3) имеем:

$$\Sigma_k(\varepsilon_n \mathbf{p}) = \rho U^2 \sum_{\mathbf{p}} G(\varepsilon_n \mathbf{p}) + W^2 s(k+1) G_{k+1}(\varepsilon_n \mathbf{p}) \quad (13)$$

где  $\rho$  – концентрация точечных примесей с потенциалом  $U$ , а в примесную собственно – энергетическую часть входит “одетая”  $G(\varepsilon_n \mathbf{p})$ .

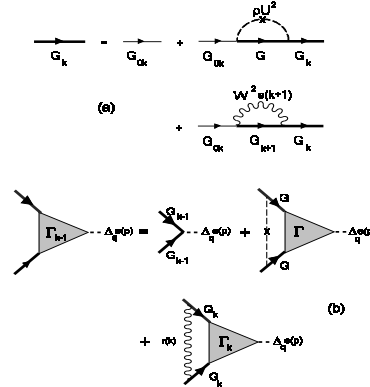


Рис. 1. Рекуррентные уравнения для функции Грина (а) и “треугольной” вершины (б) с учетом рассеяния на примесях.

По сравнению с беспримесным случаем в функции Грина происходит простая замена:

$$\varepsilon_n \rightarrow \varepsilon_n - \rho U^2 \sum_{\mathbf{p}} \text{Im} G(\varepsilon_n \mathbf{p}), \quad (14)$$

которая в несамосогласованном приближении сводится к:

$$\varepsilon_n \rightarrow \varepsilon_n + \gamma_0 \text{sign} \varepsilon_n \quad (15)$$

где  $\gamma_0 = \pi\rho U^2 N_0(0)$  – стандартная борновская частота рассеяния на примесях ( $N_0(0)$  – плотность состояний свободных электронов на уровне Ферми).

Для “треугольной” вершины, учитывающей рассеяние на примесях, получаем рекуррентные уравнения, показанные графически на Рис. 1 (b). Для случая вершины, описывающей взаимодействие со сверхпроводящим параметром порядка с  $d$  – симметрией, это уравнение существенно упрощается, поскольку второй член в правой части Рис. 1 (b) фактически равен нулю в силу  $\sum_{\mathbf{p}} \epsilon(\mathbf{p}) = 0$  (ср. обсуждение аналогичной ситуации в [9]). В результате, рекуррентное соотношение для вершины сводится к (9), где функции Грина  $G_k(\pm\epsilon_n \mathbf{p})$  определяются уравнениями (12), (13), учитывающими примесное рассеяние (Рис. 1 (a)).

Температура сверхпроводящего перехода определяется обычным уравнением для куперовской неустойчивости нормальной фазы:

$$1 - V\chi(0; T) = 0 \quad (16)$$

где обобщенная восприимчивость в куперовском канале:

$$\chi(\mathbf{q}; T) = -T \sum_n \sum_{\mathbf{p}} \epsilon^2(\mathbf{p}) \times \\ \times G(\epsilon_n \mathbf{p} + \mathbf{q}) G(-\epsilon_n, -\mathbf{p}) \Gamma_{\mathbf{p}}(\epsilon_n, -\epsilon_n, \mathbf{q}) \quad (17)$$

Константа спаривательного взаимодействия  $V$  считается отличной от нуля в слое шириной  $2\omega_c$  вокруг уровня Ферми и определяет “затравочную” температуру перехода  $T_{c0}$  в отсутствие псевдощелевых флуктуаций с помощью обычных уравнений БКШ [6].

Знание функций Грина и вершин позволяет провести стандартный вывод разложения Гинзбурга – Ландау [6]. Тогда, с помощью микроскопических выражений для коэффициентов этого разложения можно рассчитать все основные характеристики сверхпроводника вблизи  $T_c$  (длину когерентности, глубину проникновения, скачок теплоемкости и т. п.). Результаты таких расчетов приведены в [10].

На Рис. 2 показана зависимость температуры сверхпроводящего перехода  $T_c$  от эффективной ширины псевдощели  $W$  для различных значений частоты рассеяния на примесях. Видим, что псевдощелевые флуктуации приводят к подавлению сверхпроводимости. В присутствии примесей всегда возникает некоторое “критическое” значение  $W$ , при котором  $T_c$  обращается в нуль.

Такое подавление  $T_c$ , очевидно, связано с частичной “диэлектризацией” электронного спектра в окрестности “горячих точек” на поверхности Ферми [4,5]. Зависимость  $T_c$  от величины корреляционной длины ближнего порядка (псевдощелевых флуктуаций) существенно более слабая, во всех случаях рост  $\xi$  (уменьшение  $\kappa$ ) усиливает эффект псевдощелевых флуктуаций (подавление  $T_c$ ).

Перейдем теперь к моделированию типичной фазовой диаграммы купратного сверхпроводника в модели “горячих точек”. Впервые такая попытка была предпринята в упрощенной (“toy”) версии нашей модели в работе [11]. Основная идея состоит в отождествлении параметра  $W$  с экспериментально наблюдаемой эффективной шириной псевдощели (температурой кроссовера в псевдощелевую область на фазовой диаграмме)  $E_g \approx T^*$  [1–3]. Хорошо известно, что эта величина более или менее линейно падает с ростом концентрации носителей, от значений порядка  $10^3\text{K}$ , обращаясь в нуль при некоторой критической концентрации  $x_c \approx 0.19..0.22$ , несколько превышающей “оптимальную” концентрацию  $x_o \approx 0.15..0.17$  [1,12]. Соответственно, мы предположим такую зависимость для параметра  $W(x)$ . В этом смысле,  $W(x)$  определяется прямо из эксперимента. Тогда единственным “подгоночным” параметром модели остается концентрационная зависимость “затравочной” температуры сверхпроводящего перехода  $T_{c0}(x)$ , которая существовала бы в отсутствие псевдощелевых флуктуаций. К сожалению, такая зависимость  $T_{c0}(x)$ , в общем случае, неизвестна и не определяется из каких – либо известных экспериментов.

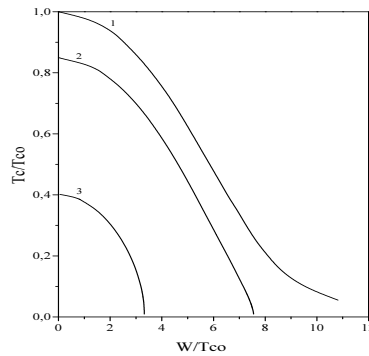


Рис. 2. Зависимость  $T_c$  от эффективной ширины псевдощели  $W$  для случая  $d$  – спаривания и различных значений частоты рассеяния на примесях:  $\gamma_0/T_{c0}$ : 0 – 1; 0.18 – 2; 0.64 – 3. Обратная корреляционная длина  $\kappa a = 0.2$ .

В рамках подхода типа БКШ заметная концентрационная зависимость “затравочной”  $T_{c0}$  представляется маловероятной. Поэтому, мы предположим ее полное отсутствие, но учтем, что введение легирующей примеси всегда вызывает появление некоторого примесного рассеяния (внутреннего беспорядка), который можно описать соответствующей линейной зависимостью  $\gamma(x)$ . Предположим, что именно этот рост беспорядка приводит к полному подавлению  $d$ -спаривания (в соответствии с известной зависимостью Абрикосова – Горькова [9]) при  $x = 0.3$ . Тогда, в рамках нашей модели, можно рассчитать концентрационную зависимость  $T_c(x)$  для всех значений  $x$ . Результаты такого расчета, с параметрами более или менее соответствующими  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ , для случая гейзенберговских спиновых (SDW) флуктуаций ближнего порядка приведены на Рис. 3. Параметры, использованные при расчете, приведены на рисунке. “Экспериментальные” данные для  $T_c(x)$ , показанные на этом же рисунке “ромбиками” получены с помощью эмпирического соотношения [12,13]:

$$\frac{T_c(x)}{T_c(x=x_o)} = 1 - 82.6(x - x_o)^2 \quad (18)$$

Во всей области недодопированных составов имеем практически идеальное описание “экспериментальных” данных, при вполне разумных значениях  $W(x)$ .

Рассмотрим поведение  $T_c$  при введении дополнительного беспорядка при различных составах (концентрациях носителей). Такое разупорядочение изучалось в целом ряде экспериментов, например при введении дополнительного беспорядка нейтронным облучением [14] или химическими замещениями [15]. Это разупорядочение можно моделировать введением дополнительного параметра  $\gamma_0$ , который просто добавляется к параметру “внутреннего” беспорядка  $\gamma(x)$ . Результаты соответствующих расчетов для двух значений такого дополнительного параметра рассеяния также показаны на Рис. 3. В полном соответствии с экспериментом [15], введение дополнительного беспорядка приводит к быстрому сужению области существования сверхпроводимости на фазовой диаграмме, причем подавление сверхпроводимости беспорядком в недодопированной (псевдощелевой) области происходит существенно быстрее, чем при оптимальном составе [14,15].

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (грант 02-02-16031), программы Президиума РАН “Квантовая макрофизика” и программы ОФН РАН “Сильно коррелированные электроны в полупроводниках, металлах, сверхпроводниках и магнитных материалах”.

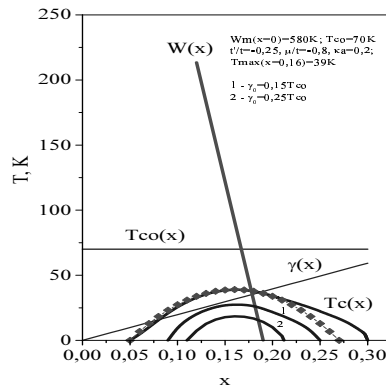


Рис. 3. Фазовая диаграмма системы типа  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$  для случая гейзенберговских (SDW) псевдощелевых флуктуаций, постоянной “затравочной”  $T_{c0}$  и линейного “внутреннего” беспорядка  $\gamma(x)$ .

- 
- [1] J.L.Tallon, J.W.Loram. *Physica C* **349**, 53 (2000)
  - [2] М.В.Садовский. *УФН* **171**, 539 (2001)
  - [3] D.Pines. *ArXiv: cond-mat/0404151*
  - [4] J.Schmalian, D.Pines, B.Stojkovic. *Phys.Rev.* **B60**, 667 (1999)
  - [5] Э.З.Кучинский, М.В.Садовский. *ЖЭТФ* **115**, 1765 (1999)
  - [6] Э.З.Кучинский, М.В.Садовский, Н.А.Стригина. *ЖЭТФ* **125**, 854 (2004)
  - [7] Н.А.Кулеева, Э.З.Кучинский. *ФТТ* **46**, 1557 (2004)
  - [8] М.В.Садовский, Н.А.Стригина. *ЖЭТФ* **122**, 610 (2002)
  - [9] А.И.Посаженикова, М.В.Садовский. *Письма ЖЭТФ* **63**, 347 (1996); *ЖЭТФ* **112**, 2124 (1997)
  - [10] E.Z.Kuchinskii, N.A.Kuleeva, M.V.Sadovskii. *ArXiv: cond-mat/0406156*
  - [11] A.Posazhennikova, P.Coleman. *Phys.Rev.* **B67**, 165109 (2003)
  - [12] S.H.Naqib, J.R.Cooper, J.L.Tallon, R.S.Islam, R.A.Chakalov. *ArXiv: cond-mat/0312443*
  - [13] M.R.Presland et al. *Physica C* **176**, 95 (1991)
  - [14] А.Е.Карькин и др. *ФММ* **76**, 103 (1993)
  - [15] J.L.Tallon et al. *Phys.Rev.Lett.* **79**, 5294 (1997)