Эффекты сильных электронных корреляций в динамической восприимчивости слоистых купратов

М. Ерёмин, И. Ерёмин
Физический факультет, Казанский госуниверситет, 420087 Казань, Россия

Цель данной работы - исследовать поведение динамических зарядовой и спиновой восприимчивостей в эффективной *t-J-G* модели для одно- и бислойных купратов. Формулы для зарядовой и спиновой восприимчивостей для нормальной фазы были получены в работе [1]. В данной работе приводятся соответствующие выражения для сверхпроводящего состояния. Гамильнониан монослоя имеет вид

$$H=\sum t_{ij}\Psi_i^{pd,\sigma}\Psi_j^{\sigma,pd}+\sum_{i>j}J_{ij}\left((S_iS_j)-\frac{n_in_j}{4}\right)+\sum_{i>j}G_{ij}\delta_i\delta_j . \quad (1)$$

Здесь $\Psi_i^{pd,\sigma}$ – операторы рождения квазифермиевских возбуждений, образованных на основе медно-кислородных синглетных состояний, t_{ij} - эффективные интегралы перескока, J_{ij} -параметр суперобменного взаимодействия, G_{ij} -параметр кулоновского отталкивания, $\delta_i=\Psi_i^{pd,pd}$ соответствует числу допированных дырок в расчёте на одну элементарную ячейку. Скелетные формулы для восприимчивостей имеют тот же вид что и в нормальной фазе . В частности, зарядовая восприимчивость записывается в виде [1]

$$\chi^{ch}(q,\omega)=\frac{\chi_0(q,\omega)}{1+(G_q-J_q/4)\chi_0(q,\omega)-(1/2)\pi(q,\omega)-[(2-P)/2]z(q,\omega)} \quad (2)$$

однако выражения для функций $\chi_0(q,\omega)$, $\pi(q,\omega)$ и $z(q,\omega)$ в сверхпроводящем состоянии модифицируются. Функция $\chi_0(q,\omega)$ - с точностью до множителя $P_{pd}=\frac{1+\delta}{2}$ совпадает с выражением для динамической восприимчивости в рамках теории БКШ. Функция $\pi(q,\omega)$ приобретает вид:

$$\pi(q,\omega)=\frac{1}{N}\sum(x_kx_{k+q}+z_kz_{k+q})\frac{t_kn_k-t_{k+q}n_{k+q}}{\omega+i\Gamma+E_k-E_{k+q}}+$$
$$\frac{1}{N}\sum(y_ky_{k+q}+z_kz_{k+q})\frac{t_k(P_{pd}-n_k)-t_{k+q}(P_{pd}-n_{k+q})}{\omega+i\Gamma-E_k+E_{k+q}}$$
$$+\frac{1}{N}\sum(x_ky_{k+q}-z_kz_{k+q})\frac{t_kn_k-t_{k+q}(P_{pd}-n_{k+q})}{\omega+i\Gamma+E_k+E_{k+q}}$$
$$+\frac{1}{N}\sum(y_kx_{k+q}-z_kz_{k+q})\frac{t_k(P_{pd}-n_k)-t_{k+q}n_{k+q}}{\omega+i\Gamma-E_k-E_{k+q}}, \quad (3)$$

где $E_k=\sqrt{(\varepsilon_k-\mu)^2+|\Delta_k|^2}$ -энергия квазичастичных боголюбовских возбуждений в сверхпроводящей фазе. Для сокращения записи когерентных факторов введены обозначения:

$$x_k=u_k^2=\frac{1}{2}[1+\frac{(\varepsilon_k-\mu)}{E_k}],\quad y_k=v_k^2=\frac{1}{2}[1-\frac{(\varepsilon_k-\mu)}{E_k}],$$

$z_k=u_kv_k=\frac{\Delta_k}{2E_k}$. Функция $\pi(q,\omega)$ для случая $\Delta_k=0$, впервые была введена в работе [2], при обсуждении динамической спиновой восприимчивости в модели Хаббарда. Её появление обусловлено отличием коммутационных соотношений композитных операторов (хаббардовских) от фермиевских, что соответствует учету так называемых кинематических электронных корреляций. Быстрые локальные флуктуации плотности заряда (а в случае спиновой восприимчивости - это локальные флуктуации узельного спина) приводят к поправке

$$z(q,\omega)=$$
$$\frac{1}{N}\sum(x_kx_{k+q}+z_kz_{k+q})\frac{\omega+i\Gamma}{\omega+i\Gamma+E_k-E_{k+q}}$$
$$+\frac{1}{N}\sum(y_ky_{k+q}+z_kz_{k+q})\frac{\omega+i\Gamma}{\omega+i\Gamma-E_k+E_{k+q}}$$
$$+\frac{1}{N}\sum(x_ky_{k+q}-z_kz_{k+q})\frac{\omega+i\Gamma}{\omega+i\Gamma+E_k+E_{k+q}}$$
$$+\frac{1}{N}\sum(y_kx_{k+q}-z_kz_{k+q})\frac{\omega+i\Gamma}{\omega+i\Gamma-E_k-E_{k+q}}. \quad (4)$$

Дополнительно отметим что в приведенных выше выражениях энергия квазичастичных возбуждений ε_k и числа заполнения n_k редуцированы, т.е. $n_k=P_{pd}f(E_k)$, где $f(E_k)$ - функция Ферми.

В бислойных купратах имеются симметричная и антисимметричная зоны; $\varepsilon_k^+=P[t_k+t_k^{(12)}]$ и $\varepsilon_k^+=P[t_k-t_k^{(12)}]$, где $t_k^{(12)}$ - Фурье компонента интегралов перескока между медно-кислородными плоскостями, а фактор $P=\frac{2+\delta_s+\delta_a}{4}$ где δ_s и δ_a число дырок в симметричной и антисимметричной зоне, соответственно. Для сопоставления с экспериментом выражение для восприимчивости удобно представить в виде

$$\chi(q,q_z,\omega) = \chi_e(q,\omega)\cos^2(q_z d/2) + \chi_o(q,\omega)\sin^2(q_z d/2) \quad , \quad (5).$$

где d-расстояние между медно-кислородными слоями .

Симметричная (четная) компонента зарядовой восприимчивости определяется выражением

$$\chi_e^{ch} = \frac{\chi_{ss}^0(q,\omega)D_{aa} + \chi_{aa}^0(q,\omega)D_{ss}}{D_{aa}D_{ss} - J_{as}^2\chi_{ss}^0\chi_{aa}^0}, \qquad (6)$$

где

$$D_{ss}(q,\omega) = 1 + (G_q - J_q^+/4)\chi_{ss}^0(q,\omega) + \pi_{ss}(q,\omega) - z_{ss}(q,\omega)$$

Нечетная часть имеет вид:

$$\chi_o^{ch}(q,\omega) = \frac{\chi_{sa}}{1 + (G_q^- - \frac{1}{4}J_q^-)\chi_{sa} - (1/2)\pi_{as} - [(2-P)/2]z_{sa}} \qquad (7)$$

Здесь $G_q^-(J_q^-)$ - соответствующие Фурье-образы. Например $G_q^- = 2G_1(\cos q_x a + \cos q_y b) - G_{12}$. Функции $\chi_{ss}(\chi_{aa})$ и т. п. получаются из приведенных выше формул для монослоя путем замены законов дисперсии зоны на симметричную (антисимметричную) зону. Общий вид факторов когерентности при этом не изменяется. В случае перекрестных компонент восприимчивости факторы когерентности становятся иными. Для пояснения этого приведем выражение для χ_{sa}

$$\begin{aligned}\chi_{sa} = {} & \frac{1}{N}\sum x_k^a x_{k+q}^s \frac{n_{s,k+q} - n_{a,k}}{\omega + i\Gamma + E_{a,k} - E_{s,k+q}} + \\ & \frac{1}{N}\sum y_{k+q}^s y_k^a \frac{n_{a,k} - n_{s,k+q}}{\omega + i\Gamma - E_{a,k} + E_{s,k+q}} + \\ & \frac{1}{N}\sum x_{k+q}^s y_k^a \frac{P - n_{a,k} - n_{s,k+q}}{\omega + i\Gamma - E_{a,k} - E_{s,k+q}} + \\ & \frac{1}{N}\sum y_{k+q}^s x_k^a \frac{n_{a,k} + n_{s,k+q} - P}{\omega + i\Gamma + E_{a,k} + E_{s,k+q}} \qquad (8)\end{aligned}$$

Выражения для спиновых восприимчивостей, в рамках приближения [1], записываются аналогично. В качестве примера приведем здесь формулу для антисимметричной части спиновой восприимчивости бислоя

$$\chi_o^{sp} = \frac{\chi_{sa}}{\frac{1}{2}J_q^-\chi_{sa} + \pi_{sa} + Pz_{ss}} \qquad (9)$$

В отсутствие электронных корреляций, знаменатель формулы (9) превращается в единицу и наш результат естественно переходит в известный в теории идеальной Ферми жидкости [3,4].

Приведенные формулы позволяют проводить анализ широкого круга экспериментальных данных с использованием одних и тех же параметров зоны проводимости и сверхпроводящей щели. При этом, в отличии от обычного приближения случайных фаз, оказывается возможным использовать значения параметров зоны, определенных по фотоэмиссионным исследованиям, реалистические параметры суперобменного взаимодействия и сверхтонких взаимодействий. В докладе предполагается обсудить данные по температурной зависимости ядерной релаксации и сдвигу Найта и данные по неупругому рассеянию нейтронов. Проведенный нами анализ свидетельствует о том что, что в дырочно допированных купратах реализуется $d_{x^2-y^2}$ –тип спаривания, т.е. $\Delta_k = \frac{\Delta_0}{2}(\cos k_x a - \cos k_y a)$. Отметим, что если из-за поляронных эффектов интегралы перескока t_k перенормированы, то функция $\pi(q,\omega)$ имеет зависимости от изотопического состава медно–кислородных слоев, и следовательно, спиновая восприимчивость (9) приводит к изотопическому сдвигу резонансного пика, которых, как известно, уверенно регистрируется в неупругом рассеянии нейтронов [5]. Расчеты показали [7], что при использовании поляронного фактора, как в работе [6], ожидаемых изотопический сдвиг резонансного пика в области 41meV при оптимальном допировании [5] превышает погрешности эксперимента и должен быть наблюдаем.

Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФИ No. 030216550 и Российской программы по сверхпроводимости, грант No. 98014-3.

1. M. Eremin, I. Eremin, and S. Varlamov, Phys. Rev. B **64**, 214512 (2001)
2. J. Hubbard and K. P. Jain, J. Phys. **C1**, 1650 (1968)
3. I. I. Mazin and V. M. Yakovenko, Phys. Rev. Lett. **75**, 4134 (1995)
4. M. Eschrig and M. Norman , Phys. Rev. B **67**, 144503 (2003)
5. H.Fong et al., Phys. Rev. **B** 61, 14773 (2000).
6. G. -M. Zhao, M. B. Hunt, H. Keller, and K. A. Mueller., Nature(London) **385,** 236 (1997)
7. I. Eremin, O. Kamaev, and M.V. Eremin., Phys. Rev. B **69,** 094517 (2004).