

Спин-флуктуационный и спин-экситонный механизмы сверхпроводимости в эффективной синглет-триплетной t-J* модели оксидов меди

М.М. Коршунов, С.Г. Овчинников, В.А. Гавричков,

Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Академгородок, 660036 Красноярск, Россия

З.В. Пчелкина, В.И. Анисимов,

Институт физики металлов УрО РАН, ул.С.Ковалевской 18, 620219 Екатеринбург, Россия

А.В. Шерман

Институт физики, Университет Тарту, Риа 142, 51014 Тарту, Эстония

Из микроскопической многозонной p-d модели, параметры которой определены из ab initio LDA расчета для недопированных антиферромагнитных купратов, в режиме сильных электронных корреляций получен низкоэнергетический эффективный гамильтониан синглет-триплетной t-J* модели, в котором перескоки и обмен медленно спадают с расстоянием и учитываются вплоть до пятой координационной сферы. С учетом ближнего магнитного порядка рассчитана зависящая от концентрации допирования зонная структура квазичастиц и построена теория сверхпроводимости со спин-флуктуационным и спин-экситонным механизмами спаривания. Показано, что вклад спин-экситонного механизма в зависимость $T_c(x)$ мал.

Существует два типа высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) - р-тип, т.е. дырочно допированные купраты ($La_{2-x}Sr_xCuO_4$ - LSCO и др.) и n-тип, т.е. электронно допированные купраты ($Nd_{2-x}Sr_xCuO_4$ - NCCO и др.). Несмотря на наличие базового для ВТСП элемента - CuO_2 -плоскости - свойства этих двух типов купратов существенно отличаются.

Адекватной моделью, отражающей электронную структуру ВТСП купратов, является многозонная p-d модель [1]. Исследование этой модели с учетом сильных электронных корреляций в рамках обобщенного метода сильной связи позволили добиться количественного согласия с ARPES данными для недопированного антиферромагнитного (АФМ) LSCO [2] и NCCO [3].

На основе гамильтониана многозонной p-d модели нами с помощью операторной теории возмущений был получен эффективный низкоэнергетический гамильтониан [4]. Эффективный гамильтониан ассиметричен по отношению к электронному и дырочному допированию - для систем n-типа имеет место обычная t-J модель, в то время как для систем р-типа со сложной зонной структурой на потолке валентной зоны адекватной моделью является эффективная синглет-триплетная модель. В работе [5] было показано, что учет трехцентровых слагаемых в эффективном гамильтониане играет очень существенную роль при рассмотрении сверхпроводящей (СП) фазы. Учитывая вышесказанное, эффективный гамильтониан для сверхпроводников

n-типа с учетом трехцентровых слагаемых имеет вид t-J* модели (обычная t-J модель с трехцентровыми слагаемыми), а для ВТСП р-типа - синглет-триплетная t-J* модель, где в двухдырочном секторе Гильбертова пространства помимо синглетного состояния учтено триплетное состояние.

Микроскопические параметры в данной работе были получены в рамках ab initio LDA расчета, с последующим проектированием функций Ванье на базис многозонной p-d модели. Параметры эффективных гамильтонианов выражаются через микроскопические параметры p-d модели (см. работы [6]). Зависимость от расстояния обменных интегралов и интегралов перескока известна и дальнейшие расчеты в данной работе проводились с учетом всех интегралов вплоть до пятой координационной сферы.

При исследовании моделей в немагнитной фазе использовался метод уравнений движения в рамках обобщенного приближения Хартри-Фока. Возникающие при этом корреляторы расцеплялись следующим образом: $\langle X_f^{\sigma\sigma} X_g^{\sigma'\sigma'} \rangle \rightarrow n_p^2 + \frac{\sigma}{\sigma'} C_{fg}$, $\langle X_f^{\sigma\bar{\sigma}} X_g^{\bar{\sigma}\sigma} \rangle \rightarrow C_{fg}$, где n_p - числа заполнения одночастичного состояния, спиновые корреляционные функции $C_{fg} \equiv \langle X_f^{\sigma\bar{\sigma}} X_g^{\bar{\sigma}\sigma} \rangle = \langle S_f^+ S_g^- \rangle$ были самосогласованно вычислены в t-J модели в приближении сферической симметрии [7].

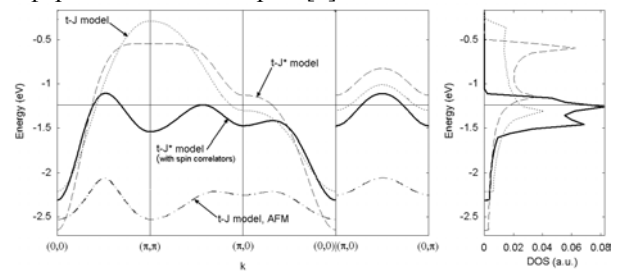


Рис. 1. Дисперсия квазичастиц и плотность состояний в парамагнитной фазе в t-J и t-J* моделях в Хаббард-I, и в t-J* модели с учетом спиновых корреляторов. Сплошная горизонтальная линия - химпотенциал, самосогласованно вычисленный в последней модели.

На рис.1 показаны рассчитанные законы дисперсии и соответствующие плотности состояний в

парамагнитной несверхпроводящей фазе для t-J и t-J* моделей с учетом и без учета спиновых корреляторов. Как видно, учет трехцентровых слагаемых приводит к сильному изменению на потолке зоны проводимости, т.е. будет сказываться при малых уровнях допирования x . В АФМ фазе в спектре t-J модели существует симметрия в окрестности точек $(\pi/2, \pi/2)$ и $(\pi, 0)$. В парамагнитной фазе такой симметрии нет. Однако учет спиновых корреляторов C_{fg} дает тенденцию к восстановлению симметрии в упомянутых точках.

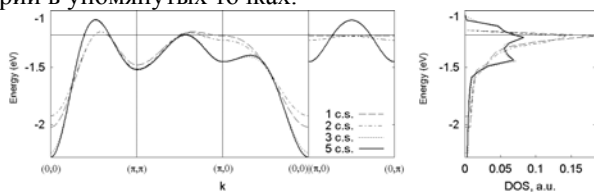


Рис. 2. Зависимость дисперсии и плотности состояний от числа учитываемых координационных сфер (c.s.) в t-J* модели с учетом C_{fg} .

Важность учета дальних перескоков и обмена хорошо видна из рис.2, где показано сравнение законов дисперсии и плотности состояний для различного числа учитываемых координационных сфер. Как видно, минимальная эффективная модель купратов должна включать как минимум 3 координационные сферы (t-t'-t''-J модель, например), т.к. при учете 3 c.s. дисперсия в окрестности точки $(\pi, 0)$ претерпевает существенные изменения по сравнению с приближением ближайших соседей и следующих за ближайшими соседями.

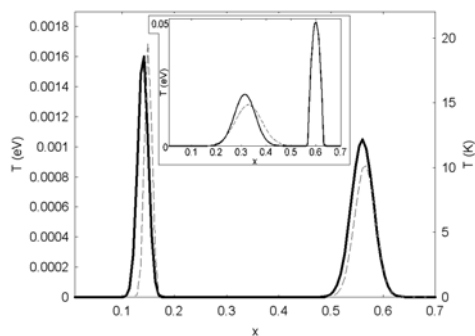


Рис. 3. $T_c(x)$ для купратов p-типа: рассчитанная зависимость в t-J* модели (штриховая линия) и в синглет-триплетной t-J* модели (сплошная жирная линия). На вставке - $T_c(x)$ в тех же моделях, но в приближении ближайших соседей и без учета спиновых корреляторов.

Теперь перейдем к рассмотрению СП фазы. Полученные нами уравнения на сверхпроводящий параметр порядка Δ_k аналогичны приведенным в работах [9]. В соответствии с последними экспериментальными данными, далее мы будем исследовать сверхпроводящее состояние только с $d_{x^2-y^2}$ типом симметрии. На вставке рис.3 приведена зави-

симость $T_c(x)$ в синглет-триплетной t-J модели (жирная сплошная линия) и t-J модели (штриховая линия), вычисленная в приближении ближайших соседей без учета трехцентровых слагаемых и спиновых корреляторов. Видно, что за счет синглет-триплетного вклада в сверхпроводящее спаривание максимум $T_c(x)$ сместился с типичного для t-J модели значения $x_{opt} = 0.33$ до $x_{opt} = 0.315$. Максимум $T_c(x)$ при $x \approx 0.6$ обусловлен спариваниями в триплетной подзоне.

При учете трехцентровых взаимодействий, спиновых флуктуаций и интегралов перескока и обмена вплоть до пятой координационной сферы ситуация существенно меняется (см. рис.3). Во-первых, возникает «колокол» СП фазы с максимальной $T_c(x)$ при $x_{opt} \approx 0.14$. Причина возникновения этого «колокола» - спин-флуктуационный механизм спаривания, характерный для t-J* модели [8]. Во-вторых, максимум $T_c(x)$ при $x_{opt} = 0.315$ сдвигается в область больших концентраций и ему соответствует $x_{opt} \approx 0.52$. В-третьих, максимум, обусловленный спариваниями в триплетной подзоне, сдвигается в недостижимую область очень высоких концентраций $x > 1$ и не показан на рисунке. Как видно из сравнения зависимостей $T_c(x)$ для синглет-триплетной t-J* и t-J* моделей, влияние синглет-триплетной гибридизации и связанного с ней спин-экситонного механизма спаривания [9], специфичной для синглет-триплетной t-J* модели, мало. Это влияние проявляется как небольшой сдвиг в область малых концентраций и небольшое увеличение максимумов $T_c(x)$.

Работа выполнена при поддержке РФФИ грант 03-02-16124, ФЦП «Интеграция» грант Б0017, ЕТФ грант 5548, программа РАН «Квантовая макрофизика», Междисциплинарного Интеграционного проекта СО РАН-УрО РАН, Сибирского Отделения РАН (Лаврентьевский конкурс молодежных проектов), Фонда «Династия» и МЦФФМ.

1. Yu.B. Gaididei, V.M. Loktev, Phys. Status Solidi B 147, 307 (1988).
2. В.А. Гавричков и др., ЖЭТФ 118, 422 (2000).
3. В.А. Гавричков, С.Г. Овчинников, ЖЭТФ 125, 630 (2004).
4. М.М. Коршунов, С.Г. Овчинников, ФТТ 43, 399 (2001).
5. В.В. Вальков и др., Письма в ЖЭТФ 75, 450 (2002).
6. М.М. Korshunov et al., ЖЭТФ 126, 642 (2004).
7. A. Sherman, M. Schreiber, Eur. Phys. J. B 32, 203 (2003).
8. В.В. Вальков и Д.М. Дзедзисашвили, Письма в ЖЭТФ 77, 450 (2002); направлено в ЖЭТФ (2004).
9. С.Г. Овчинников, Письма в ЖЭТФ 64, 23 (1996).