

Обобщенный метод сильной связи для расчета электронной структуры ВТСП купратов в широком диапазоне концентраций с учетом сильных электронных корреляций

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

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

В докладе представлен обзор результатов исследования электронной структуры ВТСП купратов с учетом сильных корреляций и ее эволюции с допированием от антиферромагнитного диэлектрика до парамагнитного металла, а также результирующий низкоэнергетический эффективный гамильтониан для магнитного механизма спаривания.

Понимание трансформации электронной структуры купратов с допированием считается ключевым моментом для адекватного решения проблемы ВТСП. Первопринципные методы, основанные на методе функционала плотности, достигли значительных успехов в области оптимально и сильно допированных купратов [1]. В то же время для слабодопированных и диэлектрических недопированных купратов традиционный подход не применим из-за сильных электронных корреляций (СЭК). В настоящем докладе делается обзор работ по исследованию электронной структуры купратов с учетом СЭК в рамках обобщенного метода сильной связи (ОМСС). Хотя сам термин ОМСС мы начали употреблять сравнительно недавно [2], ячеечная форма теории возмущений, на которой основан ОМСС, использовалась нами много ранее для периодической модели Андерсона [3], $s-d$ обменной модели [4] и многозонной $p-d$ модели [5]. В рамках ОМСС точная диагонализация многоэлектронного гамильтониана внутри элементарной ячейки сочетается с теорией возмущений для перескоков и взаимодействий между ячейками. Естественным математическим аппаратом ОМСС являются X -операторы Хаббарда, построенные на точных многоэлектронных молекулярных орбиталях ячейки, детальное описание ОМСС дано в книге [6].

Уже в низшем порядке теории возмущений по межкластерным перескокам (приближение «Хаббард-1») зонная структура квазичастиц в ОМСС обладает такими специфическими чертами, как дробный спектральный вес и дисперсия, зависящие от концентрации носителей, типа магнитного порядка и температуры. В результате для недопированных купратов получается состояние диэлектрика с переносом заряда как в антиферромагнитной (АФМ), так и парамагнитной (ПМ) фазах. Выход за рамки приближения Хаббард-1 позволяет учесть влияние ближнего магнитного порядка через двухцентровые спиновые корреляционные функции [7], что особенно важно для слабодопированных купратов. Результаты расчетов в ОМСС зависят от набора микроскопических параметров, таких как инте-

гралы перескока медь-кислород t_{pd} , кислород-кислород t_{pp} , энергия переноса заряда $\Delta = \epsilon_p - \epsilon_d$, параметров Хаббарда U_d и U_p для меди и кислорода, которые были найдены (рис.1) для недопированных $Sr_2CuO_2Cl_2$ (T -структура) и Nd_2CuO_4 (T -структура) из сопоставления с данными ARPES [2, 8], а также получены из первопринципных методов проектированием LDA зонной структуры на базис Ванье многозонной $p-d$ модели [9].

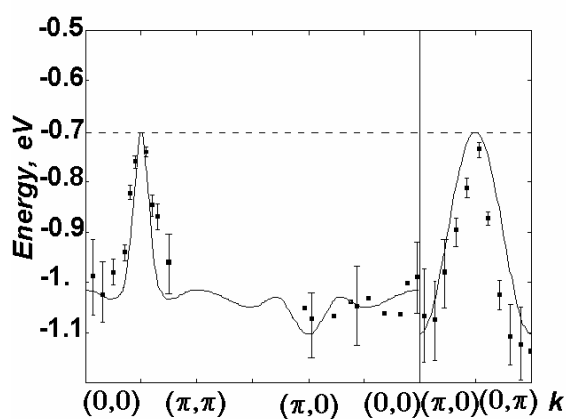


Рис. 1 Вычисленные дисперсионные зависимости для $x=0$ и направлений зоны Бриллюэна представленных в ARPES-экспериментах (точки, $Sr_2CuO_2Cl_2$). Пунктиром обозначен бездисперсный виртуальный уровень с нулевой спектральной плотностью.

Хотя с допированием меняются параметры решетки, и вследствие этого параметры модели, эти изменения малы по сравнению с концентрационной зависимостью зонной структуры квазичастиц. В дальнейшем мы фиксируем параметры, найденные в недопированном случае, и единственным меняющимся с допированием параметром служит концентрация носителей. Для дырочных купратов на потолке валентной зоны появляется внутрещелевое состояние спинполяронной природы, число состояний в котором определяется концентрацией допирования x , при малых x уровень Ферми пиннингуется этими состояниями вплоть до оптимального допирования x_{opt} [10]. При $x > x_{opt}$ уровень Ферми погружается в валентную зону и восстанавливается типичная одноэлектронная картина сильно легированного полупроводника p -типа. Хотя само значение x_{opt} в расчете [10] не согласуется с экспериментальным значением 0,16, однако расчет в оптимальных концентрациях x/x_{opt} дает количественное

согласие с поверхностью Ферми $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ из ARPES данных.

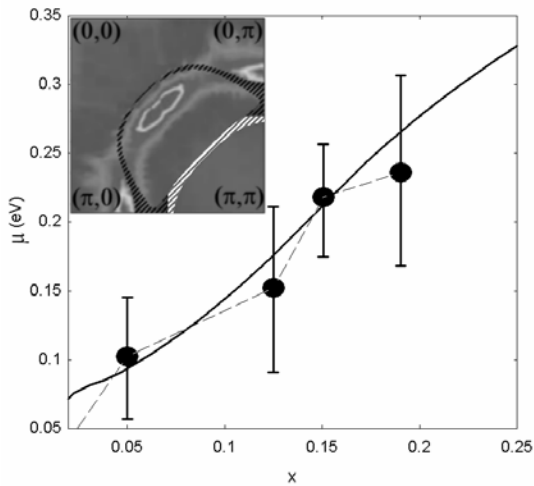


Рис. 2. Сплошная линия – зависимость химпотенциала μ от допирования x в $t\text{-}J^*$ -модели с учетом спиновых корреляторов, штриховая линия соединяет экспериментальные точки. На вставке – экспериментальная и рассчитанная ферми-поверхности для $Nd_{1.85}Ce_{0.15}CuO_4$.

Для электронного допирования купратов с T -структурой дно зоны проводимости в точке $(\pi,0)$ опускается ниже внутрищелевого состояния, препятствуя пиннингу химпотенциала. В результате зависимость $\mu(x)$ немонотонна (рис.2). Псевдощель между основной зоной и внутрищелевыми состояниями при малых x (в области АФМ фазы) имеют

магнитную природу. Как для p -типа, так и для n -типа купратов в области слабого допирования получены участки с $\partial\mu/\partial x < 0$, свидетельствующие о фазовом расслоении [8].

Для исследования сверхпроводящей фазы в рамках ОМСС построен низкоэнергетический эффективный гамильтониан [11], который оказался ассиметричен для дырочного и электронного допирования. В случае купратов n -типа $H_{\text{эфф}} = H_{t\text{-}J^*}$, имеем $t\text{-}J$ модель с трехцентровыми коррелированными перескоками. Для p -типа эффективной моделью явилась более сложная синглет-триплетная $t\text{-}J$ модель. Из-за большой протяженности функций Ванье параметры перескока в эффективных моделях медленно спадают и учитываются нами вплоть до 5 координационных сфер. Для закона дисперсии квазичастиц важны три особенности эффективного гамильтониана: наличие трехцентровых коррелированных перескоков, большое число координационных сфер для перескоков и ближний магнитный порядок (рис.3). Расчет зависимостей $\mu(x)$, поверхности Ферми и $T_c(x)$ (рис.4) с магнитным механизмом спаривания в $t\text{-}J^*$ модели находится в очень хорошем согласии с экспериментальными данными для купратов n -типа [12]. Для p -типа согласия нет, по-видимому, необходимо добавить электрон-фононное взаимодействие.

Работа выполнена при финансовой поддержке программы ОФН «Сильные электронные корреляции» и гранта РФФИ 03-02-16124.

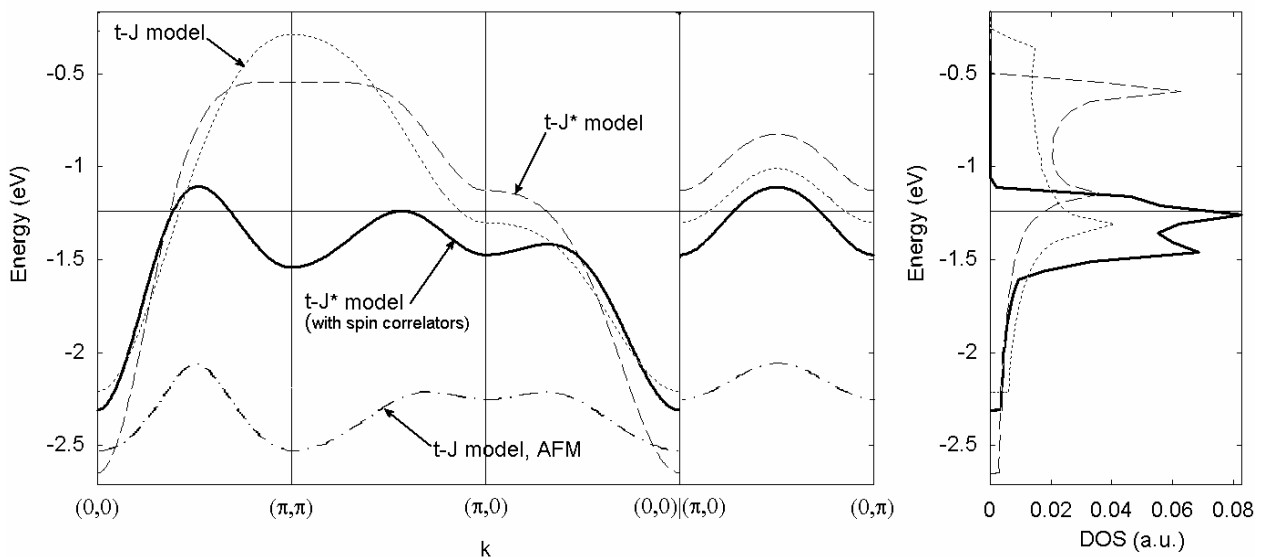


Рис. 3. Дисперсия по основным направлениям зоны Бриллюэна и плотность состояний в парамагнитной фазе в $t\text{-}J$ (пунктирная линия) и $t\text{-}J^*$ (штриховая линия)-моделях Хаббард-1, $t\text{-}J^*$ -модели с учетом спиновых корреляторов (жирная сплошная линия). Сплошная горизонтальная линия – химпотенциал, самосогласованно вычисленный для последней модели. Также приведен спектр $t\text{-}J$ -модели в АФМ фазе (штрихпунктирная линия).

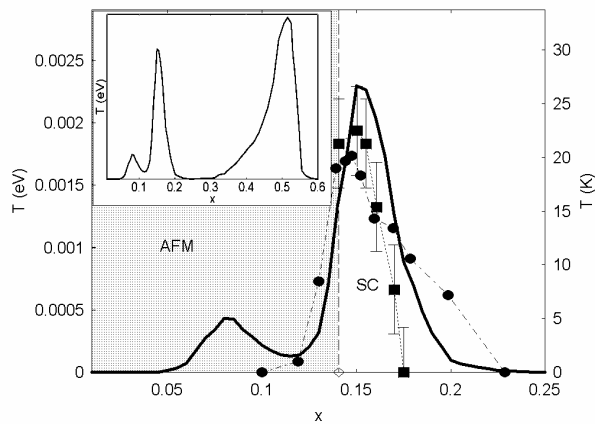


Рис. 4. Фазовая диаграмма купратов n-типа: теоретически рассчитанная зависимость $T_c(x)$ (сплошная жирная линия), экспериментальные зависимости $T_M(x)$ для NCCO (штриховая линия, слева от нее – АФМ фаза, справа – парамагнитная фаза), $T_c(x)$ для NCCO (пунктирная линия с черными квадратами) и для RSCO (штрихпунктирная линия с черными кружками). На вставке – теоретически рассчитанная зависимость $T_c(x)$ для более широкого диапазона концентраций.

1. Е. Г. Максимов, УФН 170, 1033 (2000).
2. В. А. Гавричков, С. Г. Овчинников, А. А. Борисов, Е. Г. Горячев, ЖЭТФ 118, 422 (2000).
3. S. G. Ovchinnikov, I. S. Sandalov, Solid State Commun. 47, 367 (1983).
4. M. Sh. Erukhimov, S. G. Ovchinnikov, Phys. Stat. Sol. b 123, 105 (1984).
5. S. G. Ovchinnikov, I. S. Sandalov, Physica C 161, 607 (1989).
6. В. В. Вальков, С. Г. Овчинников, Квазичастицы в сильнокоррелированных системах, Изд-во СО РАН, Новосибирск, 2001.
7. N. M. Plakida, V. S. Oudovenko, Phys. Rev. B 59, 11949 (1999).
8. В. А. Гавричков, С. Г. Овчинников, ЖЭТФ 125, 630 (2004).
9. М.М.Коршунов, В.А.Гавричков, С.Г.Овчинников, З.В.Пчелкина, И.А.Некрасов, М.А.Коротин, В.И.Анисимов, ЖЭТФ 125, в.8, (2004)
10. А. А. Борисов, В. А. Гавричков, С. Г. Овчинников, ЖЭТФ 124, 862 (2003).
11. М. М. Коршунов, С. Г. Овчинников, ФТТ 43, 399 (2001).
12. М. М. Коршунов, С. Г. Овчинников, А. В. Шерман, Письма ЖЭТФ 80, 45 (2004).