

О роли кулоновского взаимодействия в формировании сверхпроводящего и псевдощелевого состояний в купратных металло-оксидных соединениях

Э.А. Пашицкий, В.И. Пентегов

Институт физики НАН Украины, 03028 Киев, Украина

Показано, что ключевую роль в механизме высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) в слоистых купратных металло-оксидных соединениях (МОС) с анизотропным квазидвумерным электронным спектром и d -волновой симметрией сверхпроводящего (СП) параметра порядка играет запаздывающее экранированное кулоновское взаимодействие и многоэлектронные корреляции, которые способствуют повышению критической температуры СП перехода T_c . Предложен механизм возникновения псевдощели в купратных МОС за счёт нестинга уплощённых участков поверхности Ферми (ПФ) в окрестности протяжённых седловых особенностей с квазиодномерным спектром. Показано, что появление анизотропной диэлектрической щели на плоских участках ПФ за счёт электрон-дырочного (экситонного) спаривания должно приводить к подавлению анизотропной СП щели с d -волновой симметрией. Однако, благодаря частичному подавлению диэлектрической щели в результате упругого рассеяния электронов и дырок на заряженных точечных дефектах (ионах кислорода, неизвалентных примесях) сверхпроводимость сохраняется, а в области температур $T > T_c$ возникает псевдощелевое состояние, аналогичное «бесщелевой» сверхпроводимости при наличии магнитных примесей в сверхпроводниках с синглетным куперовским спариванием. Предполагается, что полное подавление псевдощели заряженными примесями должно существенно повысить критическую температуру СП перехода в купратных МОС.

1. Эффекты запаздывания в экранированном кулоновском взаимодействии в слоистых кристаллах купратных МОС обусловлены обменом виртуальными коллективными возбуждениями зарядовой (электронной) плотности с квазиакустическим законом дисперсии — акустическими плазмонами (АП). Такие возбуждения возникают как за счёт квазидвумерности зонного спектра в этих соединениях, так и благодаря сильной анизотропии фермиевской скорости в плоскости слоёв. Эта анизотропия обусловлена наличием протяжённых седловых особенностей в спектре квазичастиц вблизи уровня Ферми (УФ) с корневой сингулярностью Ван Хофа в плотности состояний (ПС) [1].

Выполненные нами самосогласованные численные расчёты электронной поляризуемости, экранированного межэлектронного кулоновского взаимо-

действия, нормальной и аномальной собственных энергий показывают, что малоугловое неупругое рассеяние носителей тока (электронов, дырок) на длинноволновых АП приводит к подавлению кулоновского отталкивания при малых передаваемых импульсах и, как следствие, к возникновению эффективного межэлектронного притяжения в d -волновом куперовском канале [2,3]. Многочастичные кулоновские корреляции (эффекты локального поля), которые учитываются с помощью трёххвостой кулоновской вершины Γ_c , усиливают это притяжение и обеспечивают высокие значения критической температуры T_c перехода в СП состояние.

Для численных расчётов нами использовался теоретический электронный спектр для антисвязывающей зоны $Y123$, вычисленный в [4], а кулоновская вершина Γ_c вычислялась с помощью приближённого выражения, предложенного Намбу [5] для заряженных Ферми-жидкостей:

$$\Gamma_c(\mathbf{k}_{\parallel}, \omega_n; \mathbf{q}_{\parallel}, \nu_m) = \frac{1}{2} [Z_c(\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}, \omega_n + \nu_m) + Z_c(\mathbf{k}_{\parallel}, \omega_n)], \quad (1)$$

где

$$Z_c(\mathbf{k}_{\parallel}, \omega_n) = 1 - \frac{\text{Im}\Sigma_c(\mathbf{k}_{\parallel}, \omega_n)}{\omega_n}, \quad (2)$$

а Σ_c — часть электронной собственной энергии, связанная с кулоновским взаимодействием.

Для исследования зависимости критической температуры T_c от положения УФ (по отношению к протяжённым седловым точкам в зонном спектре) численно решалось линейаризованное интегральное уравнение для СП параметра порядка Φ :

$$\Phi(\mathbf{k}_{\parallel}, \omega_n) = -\frac{T}{N^2} \sum_{\mathbf{k}'_{\parallel}, \omega_m} K(\mathbf{k}_{\parallel}, \omega_n; \mathbf{k}'_{\parallel}, \omega_m) \Phi(\mathbf{k}'_{\parallel}, \omega_m), \quad (3)$$

где

$$K(\mathbf{k}_{\parallel}, \omega_n; \mathbf{k}'_{\parallel}, \omega_m) = \tilde{V}_c(\mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{k}'_{\parallel}, \omega_n - \omega_m) \times [\Gamma(\mathbf{k}_{\parallel}, \omega_n; \mathbf{k}'_{\parallel}, \omega_m)]^2 |G(\mathbf{k}'_{\parallel}, \omega_m)|^2, \quad (4)$$

На Рис. 1 показаны вычисленные с учётом $d_{x^2-y^2}$ -волновой симметрии параметра порядка концентрационные зависимости собственного значения Λ ядра уравнения (3) и критической температуры СП перехода, которая соответствует значению $\Lambda = 1$. Видно, что эффективное притяжение в d -волновом канале, обусловленное обменом возбуждениями зарядовой плотности и усиленное благодаря многочастичным корреляциям, обеспечивает достаточно высокие критиче-

ские температуры при оптимальном уровне допирования, и позволяет описать концентрационную зависимость T_c .

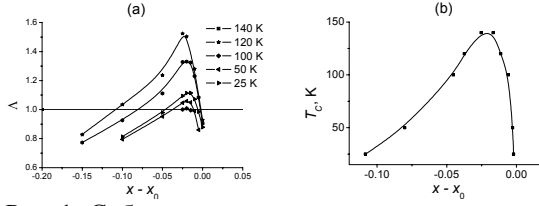


Рис. 1. Собственное значение ядра уравнения (3) для разных температур (а) и критическая температура сверхпроводящего перехода (б) в d -канале, в зависимости от концентрации x допированных дырок. Значение x_0 соответствует пересечению УФ и седловины.

Отметим резкое падение T_c по мере приближения УФ к седловой точке. Такое поведение было предсказано ранее в [6] и является следствием одновременного учёта эффектов сильной связи и корневой особенности в плотности состояний зонного спектра с протяжёнными седловинами.

Действительно, анизотропную ПС, или обратную групповую скорость квазичастиц, зависящую от энергии ξ и азимутального угла θ на почти круглой (в плоскости слоёв) цилиндрической ПФ, можно приближённо представить как

$$v(\xi, \theta) = v_+(\xi) + v_-(\xi) \cdot \cos 4\theta, \quad (5)$$

где

$$v_{\pm}(\xi) = \frac{1}{2} [v_1(\mu_0) \cdot \text{Re} \sqrt{\frac{\mu_0}{\mu + \xi}} \pm v_2], \quad (6)$$

μ — расстояние от УФ до дна протяжённой седловины, а μ_0 — характерная энергия существования корневой особенности в ПС.

Тогда уравнение для критической температуры СП перехода T_{c0} в состояние с $d_{x^2-y^2}$ -симметрией щели $\Delta(\theta) = \Delta_d \cos 2\theta$ с учётом перенормировки, обусловленной эффектами сильной связи, приближённо записывается в следующем виде:

$$1 = \frac{W_1}{16(1 + \lambda^0(\mu))} \times \left\{ 3v_1 \int_{-\mu}^{\Omega} \frac{d\xi}{\xi} \sqrt{\frac{\mu_0}{\mu + \xi}} \text{th} \frac{\xi}{2T_{c0}} + v_2 \int_{-\Omega}^{\Omega} \frac{d\xi}{\xi} \text{th} \frac{\xi}{2T_{c0}} \right\} \quad (7)$$

Здесь $\lambda^0(\mu) \equiv \lambda_1^0 \sqrt{\frac{\mu_0}{\mu}} + \lambda_2^0$ — безразмерная перенормировочная константа, связанная с изотропной частью запаздывающего взаимодействия, W_1 — матричный элемент взаимодействия в $d_{x^2-y^2}$ канале, а Ω — характерная энергия этого взаимодействия. По мере приближения μ к нулю с ростом концентрации носителей в (7) происходит сокращение

корневых особенностей, так что $T_{c0} \propto \mu$ при $\mu \rightarrow 0$. Зависимость T_{c0} от μ , полученная с помощью (7), представлена на Рис. 2а (кривая 1-1').

2. Для спектра квазичастиц на ближайших уплощённых участках ПФ, вытянутых вдоль берегов протяжённых седловин, выполняется условие нестинга $\varepsilon(\mathbf{k}) = -\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}_0)$, где вектор нестинга $q_0 \ll \pi/a$ и зависит от уровня допирования кристалла. При этом кулоновское отталкивание между электронами с передаваемым импульсом q_0 , характеризующееся матричным элементом W_0 , соответствует эффективному притяжению между электронами и дырками. В результате этого на плоских участках ПФ может возникнуть анизотропная диэлектрическая щель за счёт неустойчивости основного состояния по отношению к спонтанному когерентному электрон-дырочному (экситонному) спариванию, т.е. к фазовому переходу в состояние экситонного диэлектрика [7]. Уравнение для такой «экситонной» щели в отсутствие СП щели может быть представлено в виде:

$$1 = \frac{W_0 \cdot v_1(\mu_0)}{2(1 + \lambda^0(\mu))} \times \int_{-\mu}^{\Omega} d\xi \frac{\sqrt{\frac{\mu_0}{\mu + \xi}}}{\sqrt{\xi^2 + \Sigma_0^2(T)}} \text{th} \frac{\sqrt{\xi^2 + \Sigma_0^2(T)}}{2T}. \quad (8)$$

Следует подчеркнуть, что диэлектрическая щель Σ_0 имеет чисто электронную природу и не связана с пайерлсовской неустойчивостью кристаллической решётки, поскольку вектор нестинга q_0 , вообще говоря, несоизмерим с периодом обратной решётки $2\pi/a$.

Зависимость критической температуры перехода в состояние экситонного диэлектрика $T_{D0}(\mu)$ при условии $W_0 > \frac{1}{2}W_1$ показана кривой 2 на Рис. 2а.

Однако, в уравнении (8) не учтено распаривающее влияние заряженных примесей на «экситонную» щель Σ и критическую температуру T_D . Этот эффект аналогичен влиянию магнитных примесей на СП щель и T_c в «бесщелевых» сверхпроводниках с синглетным куперовским спариванием [8]. Учёт распада электрон-дырочных пар в результате упругого рассеяния на ионах кислорода приводит к понижению T_D по сравнению T_{D0} (см. Рис. 2а, кривая 3-3').

3. Поскольку диэлектрическая и СП щели существуют практически на одних и тех же участках ПФ вблизи седловин, имеет место их сильное взаимное влияние. В частности, при условии

$T_{c0} < T_D$ сверхпроводимость подавлена, а критическая температура СП перехода T_c при $\Sigma \neq 0$ определяется уравнением:

$$1 = \frac{W_1}{16(1 + \lambda^0(\mu))} \times \left\{ 3V_1 \int_{-\mu}^{\Omega} d\xi \frac{\sqrt{\frac{\mu_0}{\mu + \xi}}}{\sqrt{\xi^2 + \Sigma^2(T_c)}} \operatorname{th} \frac{\sqrt{\xi^2 + \Sigma^2(T_c)}}{2T_c} \right. \\ \left. + V_2 \int_{-\Omega}^{\Omega} \frac{d\xi}{\xi} \operatorname{th} \frac{\xi}{2T_c} \right\} \quad (9)$$

На Рис. 2а кривой 4 показана зависимость T_c от μ в той области, где $T_{c0} < T_D$.

В то же время, при $T_{c0} > T_D$ для T_c из (9) следует прежний результат, даваемый уравнением (7), т.е. $T_c = T_{c0}$ (кривая 1).

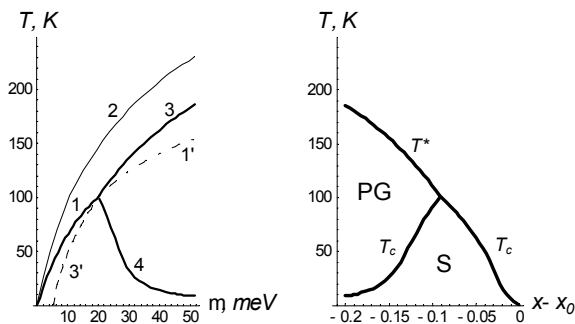


Рис. 2. Зависимости T_c и T_D от μ (а) и фазовая диаграмма СП и псевдощелевого состояний (б).

На Рис. 2б показаны зависимости критических температур сверхпроводящего T_c и диэлектрического T_D переходов от концентрации допированных дырок. Как видим, полученная фазовая диаграмма качественно согласуется с экспериментально наблюдаемой фазовой диаграммой купратных МОС [9], если T_D отождествить с характеристической температурой псевдощелевого состояния T^* .

Таким образом, в рамках данной модели предполагается, что наблюдаемая в ARPES экспериментах псевдощель [9] представляет собой частично

подавленную отрицательно заряженными ионами кислорода диэлектрическую щель в спектре квази-частиц.

Следует отметить, что полное подавление диэлектрической (экситонной) щели Σ , согласно рассмотренной модели, могло бы привести к заметному повышению максимального значения T_c (вплоть до максимума T_{c0}). В связи с этим в качестве возможного механизма подавления псевдощели и повышения T_c можно предложить дополнительное допирование кристаллов купратных МОС донорами и акцепторами с оптимально подобранными концентрациями (по аналогии с компенсированными полупроводниками), поскольку эффект распаривания электрон-дырочных пар не зависит от знака заряда примеси.

В заключение заметим, что электрон-дырочное спаривание на плоских участках ПФ вблизи протяжённых седловых особенностей должно сопровождаться возникновением вдоль главных кристаллографических осей волн зарядовой плотности (ВЗП), несоизмеримых с периодом кристаллической решётки. В случае подавления диэлектрической щели заряженными примесями эти ВЗП должны вырождаться в метастабильную «страйп»-структуру, сосуществующую с СП состоянием.

1. А. А. Abrikosov, J. C. Campuzano, K. Gofron, *Physica C* **214**, 73 (1993).

2. Э. А. Пашицкий, В. И. Пентегов, *Письма в ЖЭТФ* **72**, 628 (2000).

3. E. A. Pashitskii and V. I. Pentegov, in *Models and Methods in High-Temperature Superconductivity: Some Frontal Aspects* (edited by J. K. Srivastava and S. N. Rao), Nova Science Publishers, Hauppauge (New York), 2003, Vol. 1, p. 299.

4. O. K. Andersen, O. Jepsen, A. I. Liechtenstein, I. I. Mazin, *Phys. Rev.* **B 49**, 4145 (1994).

5. Y. Nambu, *Phys.Rev.* **117**, 648 (1960).

6. Э. А. Пашицкий, В. И. Пентегов, Э. Абрахам, *Письма в ЖЭТФ* **67**, 473 (1998).

7. Л. В. Келдыш, Ю. В. Копаев, *ФТТ* **6**, 2791 (1964).

8. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, *ЖЭТФ* **39**, 1781 (1960).

9. A. Damascelli, Z. Hussain, Z.-X. Shen, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 473 (2003).