

## Формирование псевдощели в медно-оксидных сверхпроводниках при учете спиновых и зарядовых флуктуаций

© В.В. Вальков<sup>1,2</sup>, А.А. Головня<sup>1,2</sup>, М.М. Коровушкин<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск, Россия

<sup>2</sup> Сибирский государственный аэрокосмический университет, Красноярск, Россия

E-mail: vvv@iph.krasn.ru

(Поступила в Редакцию 5 апреля 2011 г.)

Методом диаграммной техники для операторов Хаббарда исследовано влияние спиновых и зарядовых флуктуаций на формирование псевдощели в купратных сверхпроводниках. Показано, что совместный учет спиновых и зарядовых флуктуаций приводит к возникновению „теневых“ зон с сильной модуляцией спектральной интенсивности и уменьшению плотности электронных состояний на уровне Ферми.

Работа выполнена при поддержке Программы Президиума РАН „Квантовая физика конденсированных сред“, РФФИ (проект № 09-02-00127), Междисциплинарного Интеграционного проекта СО РАН № 53 и Федеральной целевой программы „Научные и научно-педагогические кадры инновационной России“ на 2009–2013 гг. Двое из авторов (А.А.Г. и М.М.К.) благодарят Лаврентьевский конкурс молодежных проектов СО РАН.

Одной из нетривиальных особенностей купратных сверхпроводников является наличие псевдощелевого состояния [1], в котором происходит существенное уменьшение плотности электронных состояний в окрестности уровня Ферми. В ряде работ описание псевдощелевой фазы основывается на использовании моделей сильно коррелированных электронных систем. Ключевая идея этого направления связана с учетом спиновых флуктуаций [2–5]. В работе [3] при объяснении псевдощелевой фазы вводится предположение о наличии в системе волны зарядовой плотности. Такой подход позволяет вскрыть микроскопический механизм, приводящий к возникновению теневых зон и модуляции спектральной интенсивности на контуре Ферми. Несмотря на успех этого подхода, открытым остается вопрос о причине возникновения волны спиновой плотности. В этой связи представляется актуальным развитие подхода, в котором спиновая структура сильно коррелированной системы остается однородной, но, несмотря на это, псевдощель индуцируется из-за развитых спин-флуктуационных процессов. В настоящей работе показано, что использование простейшей модели сильно коррелированных систем, а именно  $t-t'-t''$ -модели, позволяет связать электронные степени свободы со спиновыми и за счет этого получить ренормировки электронной энергетической структуры, приводящие к возникновению псевдощелевой фазы.

Гамильтониан  $t-t'-t''$ -модели в атомном представлении может быть записан в виде

$$H = \sum_{j\sigma} (\varepsilon - \mu) X_f^{\sigma\sigma} + \sum_{f m \sigma} t_{fm} X_f^{\sigma 0} X_m^{0\sigma}, \quad (1)$$

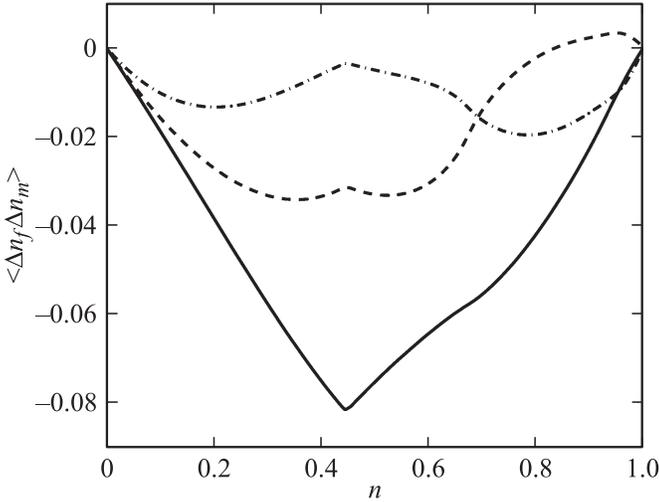
где  $X_f^{pq}$  — операторы Хаббарда [6]:  $X_f^{0\sigma}$  описывает переход иона, находящегося на узле  $f$ , из одноэлек-

тронного состояния со спиновой проекцией  $\sigma = \pm 1/2$  в состояние без электронов,  $X_f^{\sigma 0}$  описывает обратный процесс,  $\bar{\sigma} = -\sigma$ . Диагональный оператор  $X_f^{\sigma\sigma}$  является проекционным оператором для одноэлектронного сектора гильбертова подпространства, соответствующего узлу  $f$ . Энергия одноэлектронного одноионного состояния обозначена посредством  $\varepsilon$ ,  $\mu$  — химический потенциал системы,  $t_{fm}$  — интеграл перескока электрона с узла  $m$  на узел  $f$ .

Для получения уравнений, описывающих нормальную форму, в работе использована графическая фаза теории возмущений для мацубаровских функций Грина в атомном представлении. В основе такого подхода лежит диаграммная техника для операторов Хаббарда [7]. Ранее было показано [8], что в однопетлевом приближении процессы рассеяния на спиновых и зарядовых флуктуациях отражаются посредством силового оператора. Выражение для нормальной компоненты силового оператора в первом борновском приближении имеет вид

$$P_{0\uparrow,0\uparrow}(\mathbf{k}, i\omega_m) \equiv P_{11}(\mathbf{k}, i\omega_m) = \left(1 - \frac{n}{2}\right) + \frac{\chi_s \Omega_s t_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}}{i\omega_m + \mu - \left(1 - \frac{n}{2}\right) t_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}} + \frac{\chi_c \Omega_c t_{\mathbf{k}}}{i\omega_m + \mu - \left(1 - \frac{n}{2}\right) t_{\mathbf{k}}}, \quad (2)$$

где  $\omega_m$  — мацубаровская частота,  $n$  — концентрация электронов,  $T$  — температура,  $\chi_s$  и  $\chi_c$  — статические спиновая и зарядовая восприимчивости, соответственно,  $\Omega_s = 0.01|t|$  и  $\Omega_c = |t|$  — весовые коэффициенты, характеризующие масштабы возбуждений в спиновой и зарядовой подсистемах,  $t_{\mathbf{k}}$  — фурье-образ интеграла перескока,  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ .



**Рис. 1.** Влияние дальних перескоков на концентрационную зависимость коррелятора плотность–плотность.

В основе использования статической спиновой восприимчивости лежит известный экспериментальный факт [9], в соответствии с которым магнитная восприимчивость имеет резко выраженный максимум в точке антиферромагнитной неустойчивости  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ . Поэтому в качестве спиновой восприимчивости была выбрана модель [10,11]

$$\chi_s = \frac{3n}{2\pi\omega_s C(\xi)}, \quad \omega_s = 0.2|t_1|, \quad \xi = 3, \quad (3)$$

$$C(\xi) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{1 + \xi^2(1 + \gamma_{1\mathbf{q}})}.$$

Значение статической спиновой восприимчивости  $\chi_c$  соответствует усредненной по зоне Бриллюэна динамической зарядовой восприимчивости при нулевой частоте. Динамическая зарядовая восприимчивость находилась через фурье-образ двухвременной температурной функции Грина

$$\chi_{CF}(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{4} \langle\langle N_{\mathbf{k}\sigma} | N_{\mathbf{k}} \rangle\rangle_{\omega}. \quad (4)$$

Используя для нее уравнения движения по обычной схеме [12], находим

$$\langle\langle N_{\mathbf{k}\sigma} | N_{\mathbf{k}} \rangle\rangle_{\omega} = \frac{\frac{2}{N} \sum_{\mathbf{q}} (t_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - t_{\mathbf{q}}) K_{\mathbf{q}}}{\omega^2 - \left(1 - \frac{n}{2}\right) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} t_{\mathbf{q}} (t_{\mathbf{q}} - t_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}, \quad (5)$$

где  $K_{\mathbf{q}}$  — фурье-образ кинетического коррелятора. Проведенные расчеты показали, что зарядовая восприимчивость имеет максимум при нулевом значении квазиимпульса.

Одной из величин, характеризующих вклад зарядовых флуктуаций в энергетическую структуру рассматриваемой системы, является коррелятор плотность–плотность. При помощи спектральной теоремы [13], используя выражения (4) и (5), можно получить искомый коррелятор

$$\begin{aligned} \langle \Delta n_f \Delta n_m \rangle &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(f-m)} \langle N_{\mathbf{k}} \rangle \\ &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(f-m)} \frac{(1 + 2f_B(E_{\mathbf{k}}))}{E_{\mathbf{k}}} \left( (\gamma_{1\mathbf{k}} - 1) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}} 4t_1 \gamma_{1\mathbf{p}} K_{\mathbf{p}} \right. \\ &\quad \left. + (\gamma_{2\mathbf{k}} - 1) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}} 4t_2 \gamma_{2\mathbf{p}} K_{\mathbf{p}} + (\gamma_{3\mathbf{k}} - 1) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}} 4t_3 \gamma_{3\mathbf{p}} K_{\mathbf{p}} \right). \end{aligned} \quad (6)$$

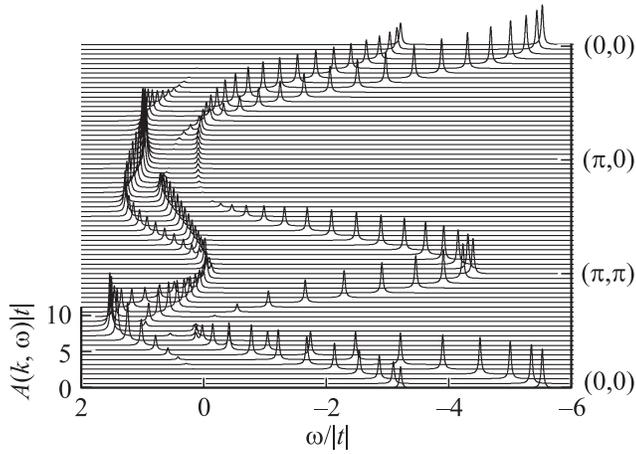
Входящий сюда энергетический спектр бозевских возбуждений

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\left(1 - \frac{n}{2}\right) (4t_1^2(1 - \gamma_{1\mathbf{k}}) + 4t_2^2(1 - \gamma_{2\mathbf{k}}) + 4t_3^2(1 - \gamma_{3\mathbf{k}}))} \quad (7)$$

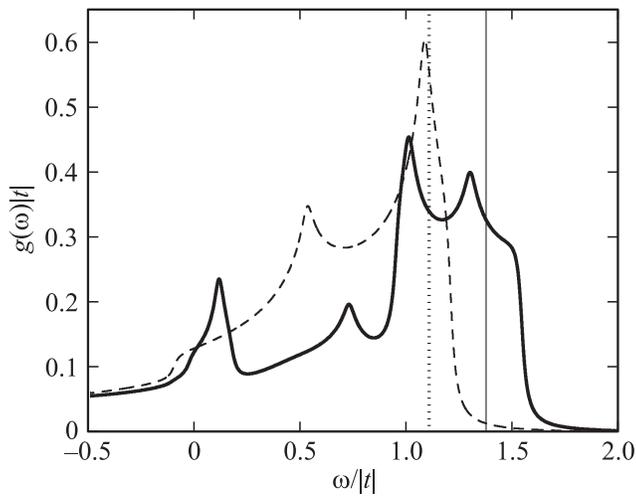
является бесщелевым и имеет линейную по квазиимпульсу зависимость в области малых значений  $\mathbf{k}$ ,  $f_B(x) = 1/[\exp((x - \mu)/T) - 1]$  — функция Бозе–Эйнштейна,  $\gamma_{1\mathbf{k}}$ ,  $\gamma_{2\mathbf{k}}$ ,  $\gamma_{3\mathbf{k}}$  — инварианты простой квадратной решетки

$$\begin{aligned} \gamma_{1\mathbf{k}} &= \frac{1}{2} (\cos k_x + \cos k_y), \\ \gamma_{2\mathbf{k}} &= \cos k_x \cos k_y, \\ \gamma_{3\mathbf{k}} &= \frac{1}{2} (\cos 2k_x + \cos 2k_y). \end{aligned} \quad (8)$$

На рис. 1 приведены концентрационные зависимости корреляторов плотность–плотность, рассчитанные при учете перескоков в пределах трех координационных сфер:  $t_2 = -0.65|t|$ ,  $t_3 = -0.4|t|$ ,  $T = 0.01|t|$ ,  $t \equiv t_1$ . Сплошная, штриховая и штрихпунктирная линии относятся к зависимостям коррелятора для первой, второй и третьей координационных сфер соответственно. Видно, что абсолютная величина этого коррелятора достигает 0.08 (для ближайших соседей). Проведенные расчеты позволяют сделать вывод о том, что учет процессов рассеяния на зарядовых флуктуациях играет важную роль при описании энергетической структуры сильно коррелированной системы. Также из рисунка следует, что для всех кривых имеет место излом зависимостей при значении концентрации  $n = 0.44$ , что связано с изменением топологии поверхности Ферми при данном уровне легирования. Ранее аналогичный излом был обнаружен при исследовании энергетической структуры  $t-J^*$ -модели [14], а связь с изменением топологии поверхности Ферми была установлена в [15].



**Рис. 2.** Модуляция спектральной интенсивности в псевдощелевой фазе при учете спиновых и зарядовых флуктуаций. Набор параметров:  $t' = -0.65|t|$ ,  $t'' = -0.4|t|$ ,  $n = 0.95$ ,  $T = 0.01|t|$ .



**Рис. 3.** Плотность состояний в приближении Хаббард-I (штриховая линия) и при учете спиновых и зарядовых флуктуаций (жирная сплошная линия). Из сравнения значения плотности в точке пересечения пунктирной и штриховой линий со значением этой величины в точке пересечения тонкой и жирной сплошных линий видно, что учет флуктуаций приводит к сильному падению плотности состояний в окрестности уровня Ферми.

Используя выражение (2) и функцию Грина

$$D_{11}(\mathbf{k}, i\omega_m) = \frac{P_{11}(\mathbf{k}, i\omega_m)}{i\omega_m + \mu - t_{\mathbf{k}}P_{11}(\mathbf{k}, i\omega_m)}, \quad (9)$$

после аналитического продолжения  $i\omega_m \rightarrow \omega + i\delta$  можно вычислить электронную спектральную интенсивность

$$A(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}D_{11}(\mathbf{k}, \omega). \quad (10)$$

Учет процессов рассеяния приводит к тому, что электронная функция Грина (9) приобретает трехполосную

структуру, и, следовательно, уравнение, определяющее спектр, становится кубическим. На рис. 2 показана зависимость спектральной интенсивности от волнового вектора вдоль основных направлений зоны Бриллюэна и энергии возбуждений. Видно, что учет флуктуационных процессов в спиновых и зарядовых подсистемах приводит к расщеплению основной зоны и появлению так называемых „теневых“ зон. Одна из этих зон соответствует процессам рассеяния на спиновых, а другая — на зарядовых флуктуациях. Из рисунка видно, что имеет место значительная модуляция спектральной интенсивности в различных точках зоны Бриллюэна.

Влияние спиновых и зарядовых флуктуаций на плотность электронных состояний при концентрации электронов  $n = 0.95$  продемонстрировано на рис. 3. Штриховой линией изображена плотность состояний, полученная в простейшем приближении Хаббард-I, когда флуктуационные процессы полностью игнорируются. В этом случае химпотенциал, изображенный вертикальной пунктирной линией, лежит в области высокой плотности состояний. Включение отмеченных выше флуктуационных процессов приводит к неоднородной по концентрации носителей тока ренормировке плотности состояний. Видно, что в высокоэнергетической области происходит уширение зоны и усложнение рельефа кривой плотности состояний. Важная особенность ренормировки связана с тем, что в окрестности химпотенциала, изображенного на рисунке вертикальной сплошной линией, происходит существенное падение плотности состояний. Этот факт связан с возникновением псевдощелевой фазы, когда из-за гибридационных процессов основной зоны и двух теневых зон (спин-флуктуационной и зарядовой) индуцируется модуляция спектральной интенсивности на контуре Ферми.

В заключение следует подчеркнуть, что в развитом подходе возникновение псевдощелевого состояния индуцируется учетом как спиновых, так и зарядовых флуктуаций. Именно с этим обстоятельством связано смешивание основной зоны с двумя теневыми зонами, и в этом заключается основное отличие от традиционного подхода, когда учет спин-флуктуационных процессов инициирует смешивание основной зоны только с одной теневой зоной. В нашем же случае получается более сложная картина перераспределения спектральной интенсивности на контуре Ферми, которая хорошо коррелирует с экспериментальными данными по псевдощелевому состоянию нормальной фазы купратных сверхпроводников.

### Список литературы

- [1] М.В. Садовский. УФН **171**, 539 (2001).
- [2] Ю.А. Изюмов. УФН **169**, 225 (1999).
- [3] M.V. Sadovskii, I.A. Nekrasov, E.Z. Kuchinskii, Th. Pruschke, V.I. Anisimov. Phys. Rev. B **72**, 155 105-1 (2005).

- [4] N.M. Plakida, V.S. Oudovenko. *ЖЭТФ* **131**, 259 (2007).
- [5] А.Ф. Барабанов, А.М. Белемук. Письма в *ЖЭТФ* **87**, 725 (2008); *ЖЭТФ* **138**, 289 (2010).
- [6] J.C. Hubbard. Proc. R. Soc. London A **276**, 238 (1963).
- [7] Р.О. Зайцев. Диаграммные методы в теории сверхпроводимости и ферромагнетизма. УРСС, М. (2004). С. 176.
- [8] В.В. Вальков, А.А. Головня. *ЖЭТФ* **138**, 1167 (2008).
- [9] P.C. Hammel, M. Takigawa, R.H. Heffner, Z. Fisk, K.C. Ott. Phys. Rev. Lett. **63**, 1992 (1989).
- [10] J. Jaklič, P. Prelovšek. Phys. Rev. Lett. **74**, 3411 (1995).
- [11] J. Jaklič, P. Prelovšek. Phys. Rev. Lett. **75**, 1340 (1995).
- [12] Н.Н. Боголюбов, С.В. Тябликов. Докл. АН СССР **126**, 53 (1959).
- [13] С.В. Тябликов. Методы квантовой теории магнетизма. Наука, М. (1965). 336 с.
- [14] В.В. Вальков, Д.М. Дзедзисашвили. *ЖЭТФ* **127**, 686 (2005).
- [15] С.Г. Овчинников, М.М. Коршунов, Е.И. Шнейдер. *ЖЭТФ* **136**, 898 (2009).