

Сверхпроводимость в модели с перекрывающимися широкой и плоской зонами

© М.Д. Медведев

Одесский государственный университет,
270100 Одесса, Украина

(Поступила в Редакцию 2 апреля 1996 г.
В окончательной редакции 19 сентября 1996 г.)

Вычислена плотность одноэлектронных состояний на уровне Ферми с учетом слабых кулоновских корреляций зонных электронов в модели сверхпроводимости с перекрывающимися широкой и плоской зонами. Получена зависимость температуры сверхпроводящего перехода от допирования.

В отличие от классической теории сверхпроводящего состояния микроскопическая теория высокотемпературной сверхпроводимости требует явного учета деталей электронной структуры сверхпроводящих купратов вблизи уровня Ферми. С ней естественно связать их наблюдаемые физические свойства, в том числе аномально высокую температуру сверхпроводящего перехода T_c . Согласно экспериментальным данным [1,2], одной из специфических особенностей электронной структуры высокотемпературных сверхпроводников p -типа является плоская зона вблизи уровня Ферми.

В работах [3,4] показано, что гибридизация энергетического уровня с широкой валентной зоной приводит к формированию высокой плотности одноэлектронных состояний в области края зоны проводимости, на который и попадает уровень Ферми. В этом случае причиной высокотемпературной сверхпроводимости является значительное расширение области фазового пространства одноэлектронных возбуждений, формирующих сверхпроводящее состояние. Однако предложенная модель не учитывала кулоновских корреляций зонных электронов и относилась, скорее, к сверхпроводникам кристаллической структуры $A15$.

В настоящей работе на основании проведенных расчетов зонного спектра высокотемпературных сверхпроводников показано, что описанная ситуация реализуется и в медно-оксидных ВТСП в случае слабых кулоновских корреляций зонных электронов.

Основной вклад в низкоэнергетические одноэлектронные возбуждения сверхпроводящих купратов вносят $d_{x^2-y^2}$ -орбитали атомов меди, формирующие плоскую ε_d -зону, и связывающие и разрыхляющие p_σ -орбитали, образованные из p_x - и p_y -кислородных орбиталей (см. рисунок) и порождающие две широкие зоны $E^-(\mathbf{k})$ и $E^+(\mathbf{k})$

$$E^\pm(\mathbf{k}) = \pm 4V \sin k_x \sin k_y.$$

Последние гибридизуются с ε_d -зоной с матричными элементами гибридизации, равными $-i\sqrt{2}W(\sin k_x - \sin k_y)$ и $-i\sqrt{2}W(\sin k_x + \sin k_y)$ соответственно, где V — постоянная гибридизации

p_x - и p_y -орбиталей, а W — $p_{x(y)}$ - и d -орбиталей. В дальнейшем будем считать $V \gg W$.

Если плоская ε_d -зона лежит в глубине одной из кислородных зон или далеко за их пределами (случай сильных кулоновских корреляций), гибридизация не приводит к повышению плотности электронных состояний в области уровня Ферми. Качественно иная ситуация возникает, если зона ε_d попадает в окрестность максимума зоны $E^+(\mathbf{k})$

$$\varepsilon_d \approx 4V.$$

В этом случае гибридизация приводит к образованию новой зоны проводимости $E(\mathbf{k})$, которая имеет ширину, равную W , отделена от валентной зоны узкой энергетической щелью $2\sqrt{2}W$ и является наполовину заполненной зоной. Поскольку $V/W \gg 1$, плотность одноэлектронных состояний у ее минимума

$$\rho(E_{\min}) = V/(2\pi W^2 a^2)$$

превосходит плотность состояний у максимума зоны $E^+(\mathbf{k})$

$$\rho(E_{\max}^+) = (2\pi V a^2)^{-1}.$$

Однако

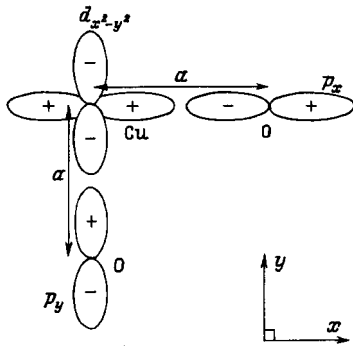
$$\rho(E_{\max}) \left(2\pi(V + \sqrt{2}W)a^2\right)^{-1} \sim \rho(E_{\max}^+).$$

В слаболегированном состоянии сильное кулоновское отталкивание U на медных узлах приводит к снятию вырождения по спину s

$$\varepsilon_{d,s} - \varepsilon_{d,-s} = 2\Delta = U(\langle n_s \rangle - \langle n_{-s} \rangle) \quad (1)$$

и появлению на атомах меди отличного от нуля магнитного момента, имеющего на соседних узлах противоположное направление. Введение таким способом антиферромагнитного порядка приводит к удвоению периода кристаллической решетки, количества атомов в элементарной ячейке CuO_2 -плоскости и, следовательно, увеличению в 4 раза рассматриваемых энергетических зон и соответствующих им волновых функций.

К дальнему антиферромагнитному порядку и аналогичному виду зонного спектра также приводит



$d_{x^2-y^2}$ - и p_{σ} -орбитали в элементарной ячейке CuO-плоскости. a — расстояние между атомами Cu и O.

нестинг ферми-поверхности с волновым вектором $(\pi/2, \pi/2)$ и соответствующим матричным элементом гамильтониана на волновых функциях d -орбиталей, равным $\Delta(1)$.

В случае слабых кулоновских корреляций, когда $\Delta \ll W$, расчеты зонного спектра показывают, что вырождение по спину сохраняется, а зона проводимости $E(\mathbf{k})$ в результате введения не равного нулю U расщепляется на две волновые зоны, разделенные узкой энергетической щелью 2Δ , нижняя из которых $E^{\Delta}(\mathbf{k})$ имеет ширину W^2/V и является полностью заполненной при нулевом допировании. Исследование плотности одноэлектронных состояний зоны $E^{\Delta}(\mathbf{k})$ приводит к следующим результатам.

Для $\Delta < 9W^2/14V$ точка $(\pi/4, \pi/4)$ соответствует локальному максимуму зоны $E^{\Delta}(\mathbf{k})$ и

$$\rho(E_{\max}^{\Delta}) = \frac{V}{2\pi a^2 W^2} \left\{ 1 + \left| \frac{9W^2}{2V\Delta} - 7 \right|^{-1/2} \right\}. \quad (2)$$

В этом случае уровень Ферми лежит у максимума зоны $E^{\Delta}(\mathbf{k})$ и представляет собой карман в окрестности точки $(\pi/4, \pi/4)$ [5,6].

При $\Delta \geq 9W^2/14V$ локальный максимум $(\pi/4, \pi/4)$ переходит в седловую точку, в окрестности которой, согласно [7], расположен уровень Ферми.

В случае $\Delta \leq (2W^2/V)(2/(\sqrt{2}+1))^{1/2}$ точка $(0,0)$ является локальным минимумом зоны $E^{\Delta}(\mathbf{k})$

$$\rho(E_{\min}^{\Delta}) = \left[2\pi a^2 \left| \frac{W^2}{V} - \frac{\Delta^2 V}{8W^2} (1 + \sqrt{2}) \right| \right]^{-1}.$$

Для больших значений Δ точка $(0,0)$ становится локальным максимумом, а уровень Ферми принимает вид односвязной области.

Значительное увеличение плотности одноэлектронных состояний на уровне Ферми, лежащем в окрестности экстремальных точек зоны проводимости, приводит к расширению области фазового пространства зонных электронов, формирующих сверхпроводящее состояние, что в теории БКШ приводит к увеличению критической температуры T_c .

Используя стандартное уравнение теории БКШ для T_c , оценим температуру сверхпроводящего перехода, учитывая вышеперечисленные особенности зонного спектра.

Константа электрон-фононного взаимодействия λ в приближении кристаллического потенциала для фононных мод (в частности, "дышащей" фононной моды), модулирующих длину связи Cu-O в плоскости CuO₂, для $\Delta = 0$ равна $\lambda = \gamma$, где $\gamma = \langle d_{x^2-y^2} | \nabla V | p_x \rangle$, ∇V — градиент внутрискристаллического потенциала. Если $\Delta \neq 0$,

$$\lambda = \frac{\gamma + \gamma^*}{2} - \frac{W^2/V - \Delta}{\sqrt{(W^2/V)^2 - 2W^2\Delta/V + 3\Delta^2}} \frac{\gamma - \gamma^*}{2}.$$

В случае отсутствия кулоновских корреляций зонных электронов

$$T_c = \frac{\lambda^2}{4\pi M \omega_D^2}, \quad (3)$$

где M — масса элементарной ячейки кристалла, ω_D — частота Дебая. Для $\lambda^2 \sim 1$ (eV/Å)², $\omega_D \sim 500$ К, $M \sim 10^{-22}$ г имеем $T_c \sim 35$ К.

При слабых кулоновских корреляциях зонных электронов T_c нельзя определить из уравнения в явном виде, однако можно указать ее зависимость от легирования δ .

Максимальная температура сверхпроводящего перехода $T_{c\max}$ и соответствующее ей оптимальное легирование δ_0 связаны соотношением

$$T_{c\max} = \frac{W^2}{2V} \left(1 + \left| \frac{9W^2}{2V\Delta} - 7 \right|^{-1/2} - 2\pi\delta_0 \right), \quad (4)$$

из которого по известным значениям $T_{c\max}$ и δ_0 может быть определена величина параметра Δ , характеризующего силу кулоновских корреляций. Однако Δ зависит от легирования и уменьшается при переходе сверхпроводника из антиферромагнитного в металлическое состояние.

В малой окрестности δ_0

$$T_c(\delta) = T_{c\max} - \frac{1}{2} \frac{\pi W^2/V - T_{c\max}}{\delta_0 + \rho T_{c\max}} (\delta - \delta_0^2), \quad (5)$$

где ρ — плотность состояний у максимума зоны проводимости $E^{\Delta}(\mathbf{k})$ (2).

При $\delta < \delta_0$

$$\ln \left[\frac{T_{c\max}}{T_c} \right] = \frac{1}{\rho} \left(\frac{\delta_0}{T_{c\max}} - \frac{\delta}{T_c} \right). \quad (6)$$

При $\delta > \delta_0$

$$\ln \left[\left(\frac{W^2}{V} \rho - \delta \right) / \left(\frac{W^2}{V} \rho - \delta_0 \right) \right] = \frac{1}{2\rho} \left(\frac{\delta_0}{T_{c\max}} - \frac{\delta}{T_c} \right). \quad (7)$$

Однако результаты (6) и (7) не описывают областей легирования, соответствующих возникновению и исчезновению сверхпроводимости.

Для $\text{La}_{1.85}\text{Sr}_{0.15}\text{CuO}_4$ $V = 1\text{eV}$, $W = 0.4\text{eV}$, $T_{c\text{max}} = 39\text{K}$, $\Delta = 0.06\text{eV}$, $\Delta/T_{c\text{max}} \sim 20$, $U = 0.18\text{eV}$, $\rho(E_{\text{min}}) \sim 6.3\rho(E_{\text{max}}^+)$, $\rho(E_{\text{max}}^\Delta) \sim 10\rho(E_{\text{max}}^+)$. Поскольку $\Delta < 9W^2/14V \sim 0.1\text{eV}$, то в точке $(\pi/4, \pi/4)$ расположен локальный максимум зоны проводимости, а поверхность Ферми представляет собой карман в окрестности этой точки. Согласно (5), коэффициент при $(\delta - \delta_0)^2$ равен ~ 0.5 .

Поскольку $T_{c\text{max}}$ пропорциональна зонной гибридизации (4) и $\partial^2 T_c(\delta = \delta_0)/\partial \delta^2 < 0$, T_c будет монотонно возрастать с ростом давления для любого δ [8].

Положение уровня Ферми у края зоны проводимости, ширина которой может быть меньше ω_D , приводит к исчезновению изотопического эффекта (3) (или аномально слабому его проявлению).

Точке $(0,0)$ кислородных зон $E^\pm(\mathbf{k})$ соответствует сингулярность ван Хофа плотности одноэлектронных состояний, упомянутая во многих работах по ВТСП [9]. Однако она расположена значительно ниже уровня Ферми, сглаживается в результате зонной гибридизации и поэтому не оказывает существенного влияния на свойства сверхпроводника.

Сочетание в сильно коррелированных системах в единой подсистеме носителей электрических и магнитных степеней свободы, последние из которых играют существенную роль в формировании свойств сверхпроводящих купратов, приводит к рассмотрению магнетизма как одной из возможных причин высокотемпературной сверхпроводимости. Следствием этого является неоднозначное толкование результатов спектроскопических экспериментов, согласно которым делается вывод о существовании плоской зоны. Считается [10], что плоский участок в спектре является следствием многочастичных эффектов в антиферромагнетике. Последующие численные расчеты свойств ВТСП-соединений, в частности $T_c(\delta)$, показали хорошее их согласование с экспериментом [11].

Изучение коллективизированного ($U \ll V$) и локализованного ($U \gg V$) магнетизма в купратах требует, чтобы вид уровня Ферми [12] был аналогичен указанному в настоящей работе. E_F в виде кармана допускает существование у параметра сверхпроводящего порядка наряду с d -симметрией фактически анизотропной s -симметрии. Для значения параметра Δ , большего $\sim 2W^2/V$, поверхность Ферми имеет односвязный характер.

Высокая плотность одноэлектронных состояний на уровне Ферми в сочетании с сильной гибридизацией d -состояний меди с p -состояниями кислорода приводит к существованию на уровне Ферми значительного числа электронных состояний легкого элемента кислорода, что позволяет вовлечь в электрон-фононное взаимодействие его высокочастотные колебания. Это обстоятельство в сочетании со сложным квазидвумерным кристаллическим строением ВТСП-соединений увеличивает константу электрон-фононного взаимодействия и повышает T_c [13].

Рассмотренная модель высокотемпературной сверхпроводимости не объясняет многих ее свойств. Однако она выявляет одну из возможностей повышения критической температуры, согласно которой T_c значительно возрастает в результате расширения области фазового пространства электронов, формирующих сверхпроводящее состояние, что является следствием специфической структуры спектра одноэлектронных возбуждений. Полученные результаты справедливы при сильном легировании высокотемпературных сверхпроводников, когда кулоновские корреляции зонных электронов слабы и имеют масштаб, равный нескольким десяткам электрон-вольт.

Список литературы

- [1] A.A. Abrikosov, J.C. Campuzano, K. Gofron. *Physica C* **214**, 1, 73 (1993).
- [2] K. Gofron, J.C. Campuzano, H. Ding, C. Gu, R. Liu, B. Dabrowski, B.W. Veal, W. Cramer, C. Jenninds. *J. Phys. Chem. Sol.* **54**, 9, 1193 (1993).
- [3] В.М. Адамян, Б.С. Павлов. *ФТТ* **34**, 2, 628 (1992).
- [4] В.М. Адамян, М.Д. Медведев. *СФХТ* **7**, 8–9, 1359 (1994).
- [5] E. Dagotto. *Rev. Mod. Phys.* **66**, 3, 763 (1994).
- [6] A. Moreo, D. Duffy. Hole pockets in the doped 2D Hubbard model. Florida State preprint (1994).
- [7] D.S. Dessau, Z.-X. Shen, D.M. King, D.S. Marshal, L.W. Lombardo, P.H. Dickinson, A.G. Loeser, J. DiCarlo, C.-H. Park, A. Kapitulkin, W.E. Spicer. *Phys. Rev. Lett.* **71**, 17, 2781 (1993).
- [8] C.C. Kim, A.R. Drews, E.F. Skelton, S.B. Quadri, M.S. Osofky. *Phys. Rev.* **B50**, 18, 13778 (1994).
- [9] J. Bok. *J. Supercond.* **7**, 3, 547 (1994).
- [10] N. Bulut, D.J. Scalapino, S.R. White. University of Illinois preprint (1994).
- [11] E. Dagotto, A. Nazarenko, A. Moreo. Antiferromagnetic and van Hove scenarios for the cuprates: taking the best of both worlds. National High Magnetic Field Lab. preprint (1994).
- [12] Ю.А. Изюмов. *УФН* **161**, 11, 1 (1991).
- [13] В.Л. Гинзбург, Е.Г. Максимов. *СФХТ* **5**, 9, 1543 (1992).