

# Динамическая зарядовая восприимчивость и смягчение продольных фононных мод в купратах

М. В. Еремин<sup>1)</sup>, М. А. Малахов

Казанский (Приволжский) федеральный университет, 420008 Казань, Россия

Поступила в редакцию 7 июля 2014 г.

Анализируется динамическая зарядовая восприимчивость как функция волнового вектора и частоты в контексте имеющихся экспериментальных данных о частотах плазмонов, о смягчении продольных фононных мод и о волнах зарядовой плотности в электронной подсистеме высокотемпературно сверхпроводящих купратов. Подчеркивается, что совокупность всех экспериментальных данных может быть объяснена лишь в предположении, что взаимодействие через поле фононов играет важную роль и различно на разных участках ферми-поверхности, т.е. параметры электрон-фононной связи зависят не только от величины переданного импульса  $\mathbf{q}$ , но и от волнового вектора  $\mathbf{k}$ .

DOI: 10.7868/S0370274X1417007X

Несмотря на то что имеется значительное количество экспериментальных данных [1, 2], свидетельствующее о нестабильности высокотемпературно сверхпроводящих (ВТСП) купратов по отношению к возникновению волн зарядовой плотности (ВЗП), происхождение их не вполне понятно.

Принято считать, что свойства зарядовой системы купратов определяются поведением зарядовой восприимчивости [3, 4], выражение для которой в случае купратов пока не известно. В рамках модели свободных квазичастиц она определяется как:

$$\chi_{\omega\mathbf{q}}^0 = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \chi_{\omega, \mathbf{k}\mathbf{q}}^0 = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}}}{\omega + \varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}, \quad (1)$$

где  $\varepsilon_{\mathbf{k}}$  – дисперсия,  $n_{\mathbf{k}}$  – число квазичастиц. Зависимость  $\chi_{\omega\mathbf{q}}^0$  от  $\mathbf{q}$  на нулевой частоте анализировалась в ряде работ. В частности, в работах [3, 4] обнаружено, что в реальной части  $\chi_{\omega\mathbf{q}}^0$  имеются пики на векторах  $(0.35\pi, 0)$ ,  $(0.35\pi, 0.35\pi)$  и  $(\pi, \pi)$ , обусловленные топологическими особенностями поверхности Ферми. Эти пики обсуждались в контексте экспериментальных данных о так называемых страйповых структурах. Между тем такое рассмотрение вызывает сомнение, так как выражение (1) не позволяет получить ни спектр плазмонов, ни смягчение фононных мод. Для более полного обсуждения динамической восприимчивости необходимо рассмотреть влияние кулоновского взаимодействия электронов между собой и влияние электрон-фононного взаимодействия. Наиболее реалистической моделью для купратов считается обобщенная  $t$ – $J$ – $G$ -модель. Без

учета электрон-фононного взаимодействия гамильтониан  $t$ – $J$ – $G$ -модели имеет вид [5]

$$H = \sum t_{ij} \psi_i^{pd, \sigma} \psi_j^{\sigma, pd} + \frac{1}{2} \sum G_{ij}^{\infty} \delta_i \delta_j + \frac{1}{2} \sum J_{ij} \left[ S_i S_j - \frac{n_i n_j}{2} \right]. \quad (2)$$

Здесь  $\psi_i^{pd, \sigma}$  ( $\psi_j^{\sigma, pd}$ ) – операторы рождения (уничтожения) композитных квазичастиц (считается, что внедряемые дырки распределены по позициям кислорода в плоскости CuO),  $J_{ij}$  и  $G_{ij}^{\infty}$  – параметры суперобменного и экранированного кулоновского взаимодействия,  $n_i$  и  $\delta_i$  – число спинов и дырок на одну элементарную ячейку.

Комбинируя при линеаризации уравнений движений для функций Грина метод проекционных операторов и приближение случайных фаз аналогично тому, как это было сделано при выводе динамической спиновой восприимчивости [6, 7], можно получить следующее выражение для динамической зарядовой восприимчивости:

$$\chi_{\text{ch}}^{\text{total}}(\omega, \mathbf{q}) = \frac{\chi_{\omega\mathbf{q}}^0 \zeta_{t, \omega\mathbf{q}} - \chi_{t, \omega\mathbf{q}}^0 \zeta_{\omega\mathbf{q}}}{(1 + \lambda_{\omega\mathbf{q}}) \zeta_{t, \omega\mathbf{q}} - (\omega + \lambda_{t, \omega\mathbf{q}}) \zeta_{\omega\mathbf{q}}}. \quad (3)$$

Входящие в уравнение (3) функции  $\chi_{t, \omega\mathbf{q}}^0$ ,  $\zeta_{\omega\mathbf{q}}$ ,  $\zeta_{t, \omega\mathbf{q}}$ ,  $\lambda_{\omega\mathbf{q}}$ ,  $\lambda_{t, \omega\mathbf{q}}$  определяются выражениями

<sup>1)</sup>e-mail: Mikhail.Eremin@kpfu.ru

$$\begin{aligned} \zeta_{\omega\mathbf{q}} &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \zeta_{\omega\mathbf{kq}}, \quad \zeta_{\omega\mathbf{kq}} = \frac{1}{\omega + \varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k+q}}}, \\ \zeta_{t,\omega\mathbf{q}} &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} (t_{\mathbf{k+q}} - t_{\mathbf{k}}) \zeta_{\omega\mathbf{kq}}, \\ \chi_{t,\omega\mathbf{q}}^0 &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} (t_{\mathbf{k+q}} - t_{\mathbf{k}}) \chi_{\omega,\mathbf{kq}}^0, \\ \lambda_{\omega\mathbf{q}} &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \lambda_{\omega\mathbf{kq}}, \quad \lambda_{t,\omega\mathbf{q}} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} (t_{\mathbf{k+q}} - t_{\mathbf{k}}) \lambda_{\omega\mathbf{kq}}, \\ \lambda_{\omega\mathbf{kq}} &= \frac{M_{\mathbf{k+q},\mathbf{q}} n_{\mathbf{k+q}} - M_{\mathbf{k},\mathbf{q}} n_{\mathbf{k}} - \omega}{\omega + \varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k+q}}}. \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь  $M_{\mathbf{k},\mathbf{q}} = G_{\mathbf{q}}^{\infty} - J_{\mathbf{q}}/4 + t'_{\mathbf{k}}/2$  соответствует эффективному потенциальному полю, в котором движутся квазичастицы,  $t_{\mathbf{k}}$  – фурье-образы интегралов перескока,  $J_{\mathbf{q}}$  – фурье-образ обменного взаимодействия.  $t'_{\mathbf{k}} = \sum_j t_{ij} [1 - F_j^t \exp(ikR_j)]$  – редуцированный интеграл перескока, параметр проектирования  $F_j^t$  определяется самосогласованно через однородную часть распределения дырок  $\delta_0$  и спин-спиновые корреляционные функции [7].

Фурье-образ экранированного кулоновского взаимодействия  $G_{\mathbf{q}}^{\infty}$  был найден путем решения уравнения Пуассона методом конечных разностей. Он имеет вид [8]

$$\begin{aligned} G_{\mathbf{q}}^{\infty} &= \quad (5) \\ &= \frac{\pi e^2}{abc} \left[ \varepsilon_a \frac{\sin^2\left(\frac{q_x a}{2}\right)}{a^2} + \varepsilon_b \frac{\sin^2\left(\frac{q_y b}{2}\right)}{b^2} + \varepsilon_c \frac{\sin^2\left(\frac{q_z c}{2}\right)}{c^2} \right]^{-1}, \end{aligned}$$

где  $a, b, c$  и  $\varepsilon_a, \varepsilon_b, \varepsilon_c$  – параметры решетки и диэлектрическая проницаемость соответственно. Ниже мы считаем, что  $a = b, \varepsilon_a = \varepsilon_b = \varepsilon^{\infty}, q_z = 0$  (где  $\varepsilon^{\infty}$  – диэлектрическая проницаемость, обусловленная межзонными переходами).

Результат расчета реальной части зарядовой восприимчивости приведен на рис. 1а. Видно, что при включении взаимодействия электронов между собой исчезает пик, который можно было бы сопоставить страйповым структурам. Вместе с тем следует подчеркнуть, что дисперсия плазмонных мод полностью воспроизводится этим выражением, так как фурье-образ (5) имеет правильное асимптотическое поведение при  $\mathbf{q} \rightarrow 0$ . Соотнесение расчета с экспериментальными данными [9, 10] по частоте плазмонов позволяет определить важный параметр диэлектрической проницаемости:  $c\varepsilon^{\infty} = 39 \text{ \AA}$ . Детали расчета дисперсии плазмонных мод и сопоставление с экспериментом приведены в работе [11].

Для дальнейшего уточнения выражения для зарядовой восприимчивости естественно попытаться

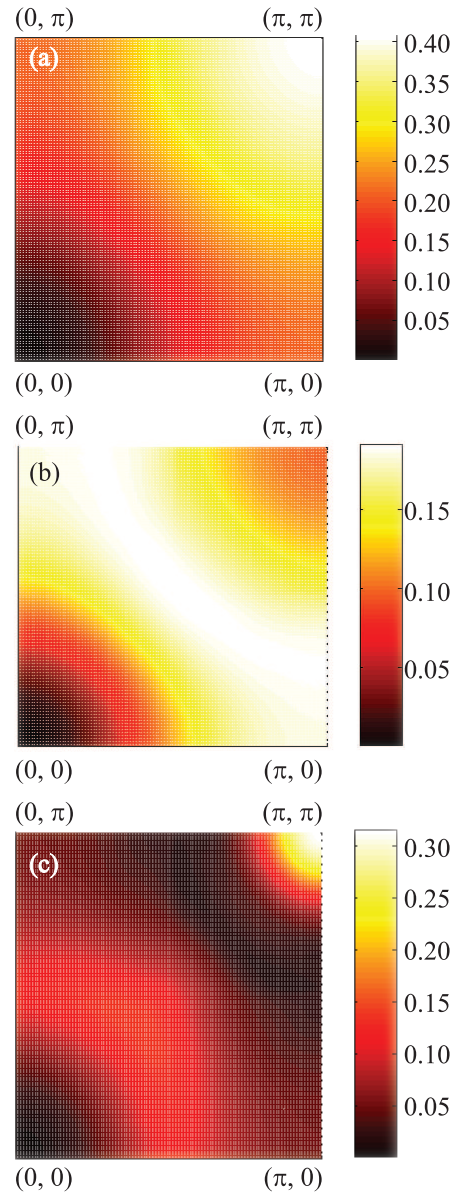


Рис. 1. Реальная часть динамической зарядовой восприимчивости в четверти зоны Бриллюэна в  $\text{эВ}^{-1}$ . Параметры зоны взяты согласно [18] (набор параметров tb1). (a) – Без учета электрон-фононного взаимодействия при  $\omega = 5 \text{ мэВ}$ . (b) – При  $\nu_1 = 27 \text{ мэВ}, \nu_2 = 0$ , на частоте полудыхательных мод  $\omega = 75 \text{ мэВ}$ . (c) – При  $\nu_1 = 14 \text{ мэВ}, \nu_2 = 20 \text{ мэВ}$ , на частоте полудыхательных мод  $\omega = 75 \text{ мэВ}$

учесть взаимодействие через поле фононов. Функция электрон-фононной связи с одной из полудыхательных мод ( $x$ - поляризация), соответствующая используемой модели, имеет вид [12, 13]:

$$|\nu_{\mathbf{k},\mathbf{q}}|^2 = \{2\nu_1 + 4\nu_2[\cos k_x + \cos k_y + \cos(k_x + q_x) + \cos(k_y + q_y)]\}^2 \sin^2\left(\frac{q_x}{2}\right). \quad (6)$$

Параметры  $\nu_1$  и  $\nu_2$  были оценены ранее в работе [14] по изменению угла наклона (кинкам) в дисперсии квазичастиц. В случае, когда  $\nu_{\mathbf{k},\mathbf{q}}^l$  зависит только от  $\mathbf{q}$  ( $\nu_2 = 0$ ), взаимодействие через поле фононов обычно учитывается путем перенормировки эффективно потенциала [15]:

$$G_{\mathbf{q}}^{\text{eff}} = G_{\mathbf{q}}^{\infty} + 2 \sum_l \frac{|\nu_{\mathbf{q}}^l|^2 \Omega_l}{\omega^2 - \Omega_l^2}. \quad (7)$$

При этом электрон-фононное взаимодействие практически не влияет на поведение высокочастотной плазменной моды, наблюдаемой в эксперименте. Однако оно важно для анализа перенормировки частоты оптических фононов.

В случае купратов формула (7) нуждается в уточнении. В работе [14] подчеркивалось, что описание кинков в законе дисперсии за счет электрон-фононного взаимодействия возможно лишь при  $\nu_2 \neq 0$ . Поэтому для оценки роли дисперсии в электрон-фононной связи можно обобщить вид потенциала (7) путем замены  $\nu_{\mathbf{q}}^l$  на  $\nu_{\mathbf{k},\mathbf{q}}^l$  с соответствующим суммированием по волновому вектору  $\mathbf{k}$ . В пользу такой формальной замены в знаменателе зарядовой восприимчивости (3):

$$\lambda_{\omega\mathbf{q}}^{\text{eff}} = \lambda_{\omega\mathbf{q}} + 2 \sum_{\mathbf{k},l} \frac{|\nu_{\mathbf{k},\mathbf{q}}^l|^2 \Omega_l}{\omega^2 - \Omega_l^2} \chi_{\omega,\mathbf{k}\mathbf{q}}^0, \quad (8)$$

свидетельствует выражение для перенормировки частоты фононов, которое получается методом канонических преобразований в модели свободных квазичастиц:

$$\tilde{\Omega}_{\mathbf{q}}^l = \Omega_{\mathbf{q}}^l - 2 \sum_{\mathbf{k}} |\nu_{\mathbf{k},\mathbf{q}}^l|^2 \chi_{\Omega_{\mathbf{q}},\mathbf{k}\mathbf{q}}^0. \quad (9)$$

Электронно-колебательное взаимодействие в медь-кислородных плоскостях купратов наиболее сильно с оптическими модами дыхательного и полудыхательного типа. Частоты последних в случае  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCuO}_8$  примерно равны 85 и 75 мэВ соответственно [16]. Отметим, что при расчете смягчения полудыхательной моды с поляризацией вдоль оси  $x$  данная мода исключается при суммировании по фононам в формуле (8). Аналогично поступаем и при расчете полудыхательной моды с поляризацией вдоль оси  $y$ . Параметр затухания берем равным  $\Gamma = 1$  мэВ. Результаты расчета реальной части зарядовой восприимчивости на частоте полудыхательных мод представлены на рис. 1. Как видно, в случае  $\nu_2 \neq 0$  возникают дополнительные пики на волновых векторах  $(0.5\pi, 0)$  и  $(0, 0.5\pi)$ . Они указывают на нестабильность системы и могут

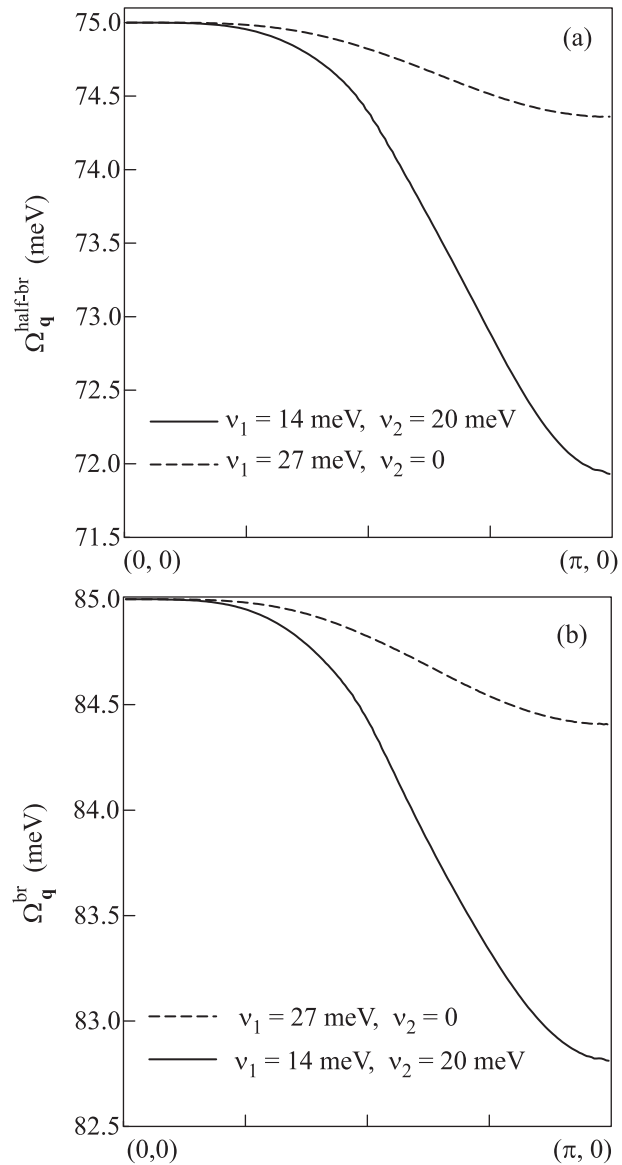


Рис. 2. Смягчение полудыхательной (half-breathing,  $\omega = 75$  мэВ) (a) и дыхательной (breathing,  $\omega = 85$  мэВ) (b) фононных мод с поляризацией вдоль оси  $x$ . Штриховая линия – расчет с параметрами  $\nu_1 = 27$  мэВ,  $\nu_2 = 0$ , сплошная – с параметрами  $\nu_1 = 14$  мэВ,  $\nu_2 = 20$  мэВ

быть связаны с ВЗП. Так как данная особенность отсутствует в зарядовой восприимчивости на нулевой частоте, логично заключить, что наблюдаемые нестабильности типа ВЗП в купратах являются динамическими. Это обстоятельство, в частности, объясняет отсутствие дополнительных сигналов ядерного квадрупольного резонанса ядер меди в  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_8$ , которые можно было бы сопоставить статическим ВЗП или страйповым структурам (ряд других аргументов против ВЗП статического типа в

купратах с индексом допирования отличным от  $1/8$ , приведен в работе [17]).

Рассчитанное смягчение фононных мод приведено на рис. 2. Оно качественно соответствует экспериментальным данным [16]. Отметим, что рассчитанное изменение частоты полносимметричной (дыхательной) моды из-за электрон-фононной связи оказывается меньше, чем для полудыхательной моды, что также согласуется с имеющимися экспериментальными данными.

Итак, в настоящем сообщении предложено выражение для динамической зарядовой восприимчивости в рамках обобщенной  $t$ - $J$ - $G$ -модели с учетом дисперсии электрон-фононной связи. Оно позволяет хорошо воспроизвести частоту высокочастотной плазменной моды, смягчение частоты оптических фононов и оценить вектора неустойчивости в подсистеме электронной плотности коллективизированных электронов. Установлено, что неустойчивость на волновых векторах, близких к значениям  $(0.5\pi, 0)$  и  $(0, 0.5\pi)$ , имеет динамический характер с частотами, близкими к значениям частот полудыхательных оптических мод в медь-кислородных плоскостях. Можно надеяться, что предложенное выражение для динамической зарядовой восприимчивости окажется полезным и для выяснения других свойств купратов.

Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФИ # 13-02-00492а и программы ППК в КФУ (решение правительства РФ от 16.06.2014 # 1053-р).

---

1. G. Ghiringhelli, M. Le Tacon, M. Minola, S. Blanco-Canosa, C. Mazzoli, N.B. Brookes, G.M. De Luca, A. Frano, D.G. Hawthorn, F. He, T. Loew, M. Moretti Sala, D.C. Peets, M. Salluzzo, E. Schierle,

- R. Sutarto, G. A. Sawatzky, E. Weschke, B. Keimer, and L. Braicovich, *Science* **337**, 821 (2012).
2. J. Chang, E. Blackburn, A.T. Holmes, N.B. Christensen, J. Larsen, J. Mesot, Ruixing Liang, D.A. Bonn, W.N. Hardy, A. Watenphul, M.v. Zimmermann, E.M. Forgan, and S.M. Hayden, *Nat. Phys.* **8**, 871 (2012).
3. R.S. Markiewicz, J. Lorenzana, G. Seibold, and A. Bansil, *J. Phys. Chem. Solids* **72**, 333 (2011).
4. M.R. Norman and A. Melikyan, *Phys. Rev. B* **89**, 024507 (2014).
5. M. Eremin, I. Eremin, and S. Varlamov, *Phys. Rev. B* **64**, 214512 (2001).
6. М.В. Еремин, А.А. Алеев, И.М. Еремин, *ЖЭТФ* **113**, 862 (2008) [*JETP* **106**, 752 (2008)].
7. M.V. Eremin, I.M. Shigapov, and I.M. Eremin, *Eur. Phys. J. B* **85**, 131 (2012).
8. F. Becca, M. Tarquini, M. Grilli, and C. Di Castro, *Phys. Rev. B* **54**, 12443 (1996).
9. N. Nucker, U. Eckern, J. Fink, and P. Muller, *Phys. Rev. B* **44**, 7155 (1991).
10. Y.-Y. Wang, G. Feng, and A.L. Ritter, *Phys. Rev. B* **42**, 420 (1990).
11. М.В. Еремин, М.А. Малахов, *Изв. РАН. Сер. Физика* **78**, 1183 (2014).
12. S. Ishihara and N. Nagaosa, *Phys. Rev. B* **69**, 144520 (2004).
13. С.Г. Овчинников, Е.И. Шнейдер, *ЖЭТФ* **128**, 974 (2005).
14. M.V. Eremin, M.A. Malakhov, and D.A. Sunyaev, *JETP Lett.* **96**, 105 (2012).
15. G.D. Mahan, *Many-Particle Physics*, Plenum Press (1990), p. 582.
16. D. Reznik, *Adv. Cond. Matt. Phys.* **2010**, 523549 (2010).
17. T.M. Rice, K.-Y. Yang, and F.C. Zhang, *Rep. Prog. Phys.* **75**, 016502 (2012).
18. M.R. Norman, *Phys. Rev. B* **63**, 092509 (2001).