

О ФАЗОВОЙ ДИАГРАММЕ СОЕДИНЕНИЙ $\text{Ln}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$

Р.О.Зайцев

Институт атомной энергии им.И.В.Курчатова
123182, Москва

Поступила в редакцию 12 декабря 1991 г.

В модели Хаббарда с бесконечным отталкиванием произведено вычисление интервала концентраций, для которых при $T = 0$ возникает эффект куперовского спаривания. Результаты расчетов, представленных в рамках однопетлевого приближения, обнаруживают качественное согласие с экспериментом.

В соответствии с кристаллохимическими расчетами предположим, что энергия одной дырки в $2p^6$ -оболочке O^{2-} имеет тот же порядок величины, что и энергия Хаббарда (U_d) $3d$ -состояния меди. Поэтому в соединениях $\text{Ln}_{2-x}^{\text{M}^+}\text{CuO}_{4-\delta}$, допированными катионами M^{4+} , где происходит заполнение нижней подзоны Хаббарда, можно не учитывать виртуальные $2p$ -дырочные и $3d^{10}(x^2 - y^2)$ -состояния верхней хаббардовской подзоны. Из условия электронейтральности определим n_d -среднее число дырок в $3d^{10}$ -оболочке меди ($n_d < 1$)

$$n_d = 1 - x - 2\delta. \quad (1)$$

Предполагая, что энергия Хаббарда есть наибольший энергетический параметр ($U_d = \infty$), запишем гамильтониан $(x^2 - y^2)$ -возбуждений, - сначала через X -операторы Хаббарда, а затем через произведения обычных операторов рождения $\hat{a}_{\vec{r}\sigma}^+$ и уничтожения $\hat{a}_{\vec{r}\sigma}$

$$\hat{H} = \sum_{\vec{r}, \vec{r}' \sigma} \hat{X}_{\vec{r}\sigma}^+ t(\vec{r} - \vec{r}') X_{\vec{r}'\sigma} = \sum_{\vec{r}, \vec{r}' \sigma} (1 - \hat{n}_{\vec{r}\sigma}) \hat{a}_{\vec{r}\sigma}^+ t(\vec{r} - \vec{r}') \hat{a}_{\vec{r}'\sigma} (1 - \hat{n}_{\vec{r}'\sigma}), \quad (2)$$

где $\hat{n}_{\vec{r}\sigma} = \hat{a}_{\vec{r}\sigma}^+ \hat{a}_{\vec{r}\sigma}$ - операторы плотности в \vec{r} -ячейке со спином $\sigma = -\sigma$.

Представление гамильтониана (2) через факторы Гютцвиллера $1 - \hat{n}_{\vec{r}\sigma}$ позволяет вычислить борновскую двухчастичную амплитуду рассеяния (см. рис.1).

$$\Gamma_B(\vec{p}_1, \vec{p}_2; \vec{p}_3, \vec{p}_4) = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{k}=1}^4 t(\vec{p}_k) - \sum_{\vec{p}} n_F(\xi_{\vec{p}}) [t(\vec{s} - \vec{p}) + t(\vec{p} + \vec{q})], \quad (3)$$

где $t_{\vec{p}} = \sum_{\vec{r}} t(\vec{r}) e^{i\vec{p}\vec{r}}$, $n_F(\xi)$ - распределение Ферми. В нулевом приближении самосогласованного поля - "Хаббард I"¹ $\xi_{\vec{p}} = f t_{\vec{p}} - \mu$, а среднее число дырок n_d через уравнение состояния связано с химпотенциалом μ

$$n_d = 2f \sum_{\vec{p}} n_F(\xi_{\vec{p}}), \quad f = 1 - \langle \hat{n}_{\vec{r}\sigma} \rangle = 1 - \frac{n_d}{2}. \quad (4)$$

Импульсы \vec{p}_1 и \vec{p}_3 отвечают падающей и рассеянной волне со спином "вверх", а импульсы \vec{p}_2 и \vec{p}_4 относятся к возбуждениям со спином "вниз"
 $\vec{s} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 = \vec{p}_3 + \vec{p}_4$ - суммарный, $\vec{q} = \vec{p}_4 - \vec{p}_1 = \vec{p}_2 - \vec{p}_3$ - передаваемый импульс.

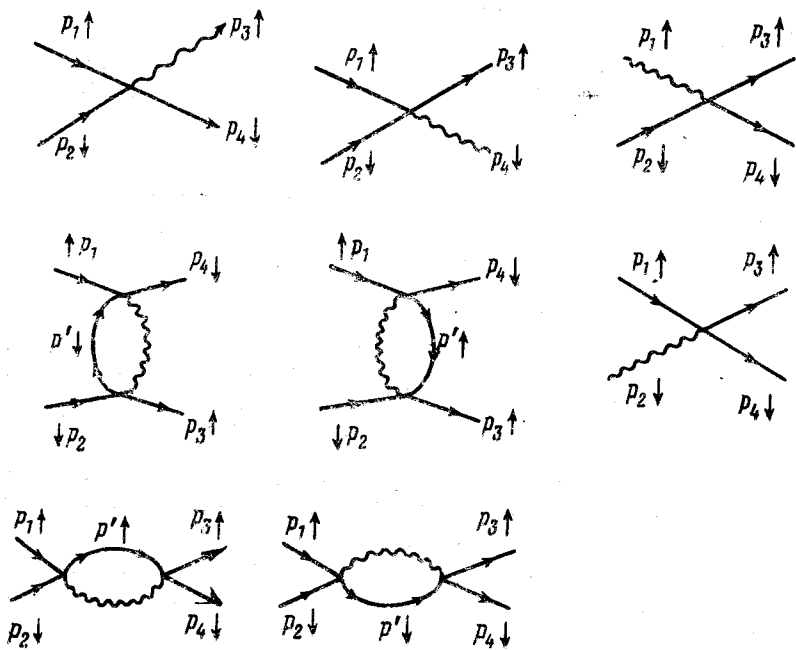


Рис. 1. Борновские амплитуды рассеяния. Волнистая линия изображает множитель t_B , сплошная линия - одночастичную функцию Грина $(i\omega_n - \xi_p)^{-1}$; каждая четырехвершинная часть дает свой вклад в амплитуду рассеяния со знаком минус единица

В логарифмическом приближении и при $T = 0$ возникновению сверхпроводимости соответствует точка изменения знака точной амплитуды рассеяния, непроводимой по двум линиям одинакового направления. До настоящего времени она была вычислена только в борновском приближении и для "пустой" решетки², что соответствует первой сумме из (3). Оставшиеся суммы следует рассматривать как слагаемые однопетлевого приближения, к которым необходимо добавить все остальные однопетлевые поправки (см. рис.2)

$$\Delta\Gamma(\vec{p}, \vec{q}) = \sum_{\vec{p}'} \{f t_{\vec{p}}^2 + [t(\vec{p}') + t(\vec{p}' + \vec{q})]t(\vec{p}) + t(\vec{p}')t(\vec{p}' + \vec{q})\} [n_F(\xi_{\vec{p}' + \vec{q}}) - n_F(\xi_{\vec{p}'})] [\xi_{\vec{p}} - \xi_{\vec{p}' + \vec{q}}]^{-1} \quad (5)$$

Можно заметить, что наибольший вклад в (5) дают флуктуации ферромагнитного типа. Соответственно этому, во всех соотношениях положим $\vec{s} = \vec{q} = 0$. В результате после перехода к пределу $T \rightarrow 0$ получаем следующее условие существования сверхпроводимости:

$$-2\epsilon_0 - 2 \int_{-w}^{\epsilon} y \rho_0(y) dy + \epsilon_0^2 (1 + 3f^{-1}) \rho_0(\epsilon_0) \leq 0. \quad (6)$$

Здесь $\rho_0(\epsilon)$ - затравочная плотность состояний, а параметр ϵ_0 определяет среднюю плотность через уравнение состояний (4)

$$\rho_0(\epsilon) = \sum_{\vec{p}} \delta(\epsilon - t_{\vec{p}}), \quad n_d = 2f \int_{-w}^{\epsilon} \rho_0(y) dy. \quad (7)$$

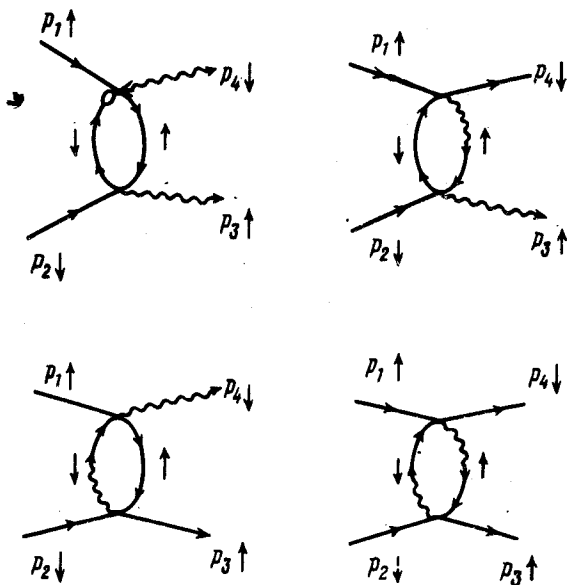


Рис. 2. Однопетлевые парамагнитные поправки. Все диаграммы имеют лишний множитель $-(-1)$, т.к. содержат замкнутую фермионную петлю. Кругок изображает усредненный фактор Гюттвиллера $1 - \langle n_{\sigma\sigma} \rangle = f$. Остальные обозначения - те же, что и на рис.1

В простейшем случае так называемой "плоской" зоны, когда $\rho_0(\epsilon) = \theta(w^2 - \epsilon^2)/2w$, $n_d = 2(1 + \epsilon_0)/(3 + \epsilon_0)$, левая сторона (6) всегда положительна и куперовская особенность не возникает.

Наибольший интерес представляет случай квадратной решетки:

$$\rho_0(\epsilon) = 2K'(\epsilon)/\pi^2, \int_{-1}^{\epsilon} y\rho_0(y)dy = -2[E'(\epsilon) - \epsilon^2K'(\epsilon)]\pi^{-2}, \quad (8)$$

где $K'(\epsilon) = K(\sqrt{1 - \epsilon^2})$, $E'(\epsilon) = E(\sqrt{1 - \epsilon^2})$ - полные эллиптические интегралы 1 и 2 рода. Условие (6) приобретает следующий вид:

$$-\epsilon\pi^2 + 2E'(\epsilon) - \epsilon^2(1 - 3f^{-1})K'(\epsilon) \leq 0. \quad (9)$$

Уравнение состояния (4) определяется численным интегрированием:

$$f = 1 - \frac{n_d}{2}; \quad n_d = 4f \int_{-1}^{\epsilon} K'(y)dy\pi^{-2}. \quad (10)$$

Исключая величины f и n_d , находим область значений параметра ϵ , для которых выполняется условие (9): $0,39 < \epsilon < 0,75$, что согласно уравнению состояния отвечает достаточно узкому интервалу концентраций $0,045 < 1 - n_d < 0,134$.

Как видно из соотношения (9), логарифмическая особенность в плотности состояний квадратной решетки при $\epsilon \rightarrow 0$ полностью компенсируется малыми значениями интеграла перескока.

Плоская модель с треугольной решеткой также имеет логарифмическую особенность, но при конечной энергии, противоположной по знаку к интегралу перескока. При $\epsilon \propto -t$, $\rho_0(\epsilon) \approx \ln |t/(\epsilon + t)|$. Исследование куперовской неустойчивости для отрицательных интегралов перескока и при $\epsilon \propto -t > 0$

сводится к решению уравнений быстрого паркета. В полной аналогии с ³ имеем:

$$-\dot{\Gamma}_1 = \Gamma_1^2 + \Gamma_2^2; \quad -\dot{\Gamma}_2 = 2\Gamma_2(\Gamma_1 - \Gamma_3); \quad \dot{\Gamma}_3 = \Gamma_2^2 + \Gamma_3^2. \quad (11)$$

Точка обозначает дифференцирование по дважды логарифмической переменной $s = |t|^{-1} \ln^2 |t/T|$. Можно заметить, что амплитуда Γ_2 , перепутывающая нуль-звуковой (Γ_3) и куперовский (Γ_1) каналы, исчезает в устойчивой особой точке:

$$\gamma_1 = 1, \quad \gamma_2 = \gamma_3 = 0, \quad \text{если } \Gamma_K = \gamma_K/s. \quad (12)$$

Таким образом, в паркетном приближении ³ треугольная решетка с энергией возбуждений

$$\epsilon_{\vec{p}} = -f|t|[\cos p_x + \cos p_y + \cos(p_x + p_y)] \quad (13)$$

приводит к сверхпроводимости для энергии Ферми порядка $f|t|$. С повышением уровня Ферми плотность состояний быстро уменьшается, так что снова можно использовать "однопетлевой" критерий (6). Подстановка максимального значения $\epsilon = 3|t|/2$ и $\epsilon\rho_0(\epsilon) = \sqrt{3}/\pi$ в (6) дает положительное значение амплитуды рассеяния. Таким образом, и в треугольной решетке для $t < 0$ сверхпроводимость осуществляется в достаточно узком интервале концентраций, соответствующих положительным энергиям Ферми, примаближающим к величине $\mu \propto f|t|$.

Треугольная решетка с положительным интегралом перескока представляет своеобразное исключение. Здесь для положительных энергий плотность состояний всегда конечна и имеет минимальное значение при $\epsilon \rightarrow 3t$. В этом же пределе $\epsilon\rho_0(\epsilon) = \sqrt{3}/2\pi$, что дает весьма малое по абсолютной величине, но отрицательное значение амплитуды (6).

Таким образом, для обеих простейших плоских решеток с отрицательным интегралом перескока существует конечный и достаточно узкий интервал концентраций, для которого уже в однопетлевом приближении (6) удастся обнаружить конечную область существования сверхпроводящего состояния.

Полученный результат только качественно согласуется с экспериментом. Согласно ⁴, сверхпроводимость в соединении $\text{Ln}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4-\delta}$ осуществляется в области концентраций $0,14 < x < 0,18$ а величина δ мала, но неизвестна. Согласно нашему рассмотрению для квадратной решетки сверхпроводимость существует в несколько более широкой и сдвинутой области $0,045 < x + 2\delta < 0,134$.

Полученный результат не противоречит машинным вычислениям Скалапино и др. ⁵, которые уже при $1 - n_d = 0,125$ обнаружили тенденцию к уменьшению отталкивательной амплитуды рассеяния.

Таким образом, сильные парамагнитные флуктуации существенно уменьшают область существования сверхпроводящего состояния. Важно заметить, что критерий (6) учитывает флуктуации в усиленном виде. Все четыре суммы (5) можно рассматривать как первое слагаемое разложения обобщенной магнитной восприимчивости. Лестничное суммирование в антиферромагнитном и нуль-звуковом канале перенормирует борновскую амплитуду (3). В этом же приближении удастся просуммировать вклад продольных и поперечных парамагнитных флуктуаций. В результате такой перенормировки соотношение (6) преобразуется к следующему виду:

$$-\frac{2\epsilon_0}{[1 + \epsilon_0(1 + \Phi_0)\rho_0(\epsilon_0)]} + (1 + \epsilon_0^2)\Phi_1(\epsilon_0) + \frac{3\epsilon_0^2\rho_0(\epsilon_0)}{2[1 - \Phi_0 + 2\epsilon_0\rho_0(\epsilon_0)]} \leq 0, \quad (14)$$

$$\text{где } \Phi_K = \int_{-w}^{\epsilon_0} y^K \rho_0(y) dy.$$

Анализ соотношения (14) дает более широкую, чем из (6), область существования сверхпроводящего состояния. Во всех трех вариантах, - для квадратной и треугольной решетки с отрицательным и с положительными интегралами перескока, критерий (14) выполняется, начиная с некоторого положительного и кончая максимально возможным $\epsilon = w$, отвечающим $n_d = 1$. Исключение представляет модель плоской зоны, для которой критерий (14) выполняется на интервале $0,1838 < \epsilon < 0,827$ или для концентраций $0,256 > 1 - n_d > 0,045$.

Таким образом, оба критерия (6) и (14) указывают на возможность существования сверхпроводимости в модели Хаббарда с $U_d = \infty$. Машинные вычисления⁵ и эксперимент⁴ качественно согласуются с этим выводом. Полученный таким образом узкий интервал по концентрации допирующей примеси находится вне области существования антиферромагнитных флуктуаций почти локализованных спинов. Согласно⁶, эта область принадлежит интервалу $|1 - n_d| < t/U_d$ и при $U_d = \infty$ находится вне нашего рассмотрения.

-
1. J.Hubbard, Proc. Roy. Soc. A. 276, 238 (1963).
 2. R.O.Zaitsev, Phys. Lett. A 134, 199 (1988).
 3. И.Е.Дзялошинский, ЖЭТФ 93, 1487 (1987).
 4. M.V.Maple et al., Phys. C 165, 469 (1990).
 5. D.J.Scalapino et al., Phys. Rev. B 39, 839 (1989).
 6. P.B.Wiegmann, Phys. Rev. Lett. 65, 2070 (1990).