

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЭЛЕКТРОНОВ ПРОВОДИМОСТИ С "СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИМИ" СМЕЩЕНИЯМИ В ВТСП И ТИТАНОВЫХ СПЛАВАХ: ПСЕВДОСПИНОНЫ

В.Ю.Ирхин, М.И.Кацнельсон, А.В.Трефилов ¹⁾

Предложена модель проводящего "псевдоспинового ферромагнетика", описывающая взаимодействие электронов с когерентными атомными смещениями. Показано, что неквазичастичные бестоковые состояния (псевдоспиноны) могут давать линейный по T вклад в электронную теплоемкость. Продемонстрирована возможность перестройки спектра вблизи E_F с формированием нового энергетического масштаба типа температуры Кондо.

В последнее время получены экспериментальные данные, указывающие на существование сегнетоэлектрической поляризации (т.е. скоррелированных искажений решетки) в больших областях в высокотемпературных сверхпроводниках (ВТСП) ^{1,2} и сплавах на основе Ti и Zr ³. Наиболее ярким результатом в этой связи является обнаружение гигантского поглощения микроволнового поля ^{1,3}. При этом дипольная поляризация сосуществует с металлической проводимостью. Как показано в данной работе, последнее может приводить к резкой перестройке электронного спектра.

"Локальный" дипольный момент возникает из-за наличия нескольких минимумов эффективного потенциала как функции смещений. Для ВТСП существование таких потенциалов следует из зонного расчета La_2CuO_4 ⁴ и модельного рассмотрения $YBa_2Cu_3O_7$ ⁵, а для сплавов Ti и Zr – из экспериментов, указывающих на наличие локальных искажений (ЯГР-спектры $Ti_{1-x}Fe_x$ ⁶), а также двухуровневых систем ⁷. Последние описываются в рамках псевдоспинового формализма, а дипольная поляризация в больших областях – как "псевдоферромагнетизм". Будем рассматривать ситуацию типа зонного эффекта Яна–Теллера ⁸, когда имеется вырождение в зоне проводимости, описываемое проекцией псевдоспина электрона $\tau = \uparrow, \downarrow (\pm)$ и снимаемое атомными смещениями, что действительно реализуется в La_2CuO_4 ⁴. Тогда гамильтониан модели с учетом процессов переворота псевдоспина, дающих интересные нас сингулярные вклады, запишется в виде

$$H = \sum_{\mathbf{k}\tau} \epsilon_{\mathbf{k}\tau} c_{\mathbf{k}\tau}^+ c_{\mathbf{k}\tau} + H_s - \sum_i [(J_{\perp} s_i^+ c_{i\downarrow}^+ c_{i\uparrow} + J_{\perp} s_i^- c_{i\uparrow}^+ c_{i\downarrow}) + \text{эрм.сопр.} + J_{\parallel} s_i^z (c_{i\uparrow}^+ c_{i\uparrow} - c_{i\downarrow}^+ c_{i\downarrow})]$$

(H_s – гамильтониан псевдоспиновой подсистемы). В дальнейшем мы не рассматриваем член c_{\perp}^{\pm} , так как он дает аддитивные вклады ($J_{\perp} \rightarrow \widetilde{J}_{\perp}$, $\tau \rightarrow -\tau$, $J_{\parallel} \rightarrow -J_{\parallel}$). Вычисление одноэлектронной запаздывающей функции Грина во втором порядке по J_{\perp} дает

$$\langle\langle c_{\mathbf{k}\tau} | c_{\mathbf{k}\tau}^+ \rangle\rangle_E = [E - \epsilon_{\mathbf{k}\tau} - \Sigma_{\mathbf{k}}^{\tau}(E)]^{-1}, \quad \epsilon_{\mathbf{k}\tau} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \tau J_{\parallel} \langle s^z \rangle,$$

$$\Sigma_{\mathbf{k}}^{\tau}(E) = J_{\perp}^2 \sum_{\mathbf{q}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega K_{\mathbf{q}}^{-\tau, \tau}(\omega) \frac{N_B(\omega) + f(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, -\tau})}{E - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, -\tau} + \omega}, \quad K_{\mathbf{q}}^{-\tau, \tau}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \langle\langle s_{\mathbf{q}}^{\tau} | s_{-\mathbf{q}}^{-\tau} \rangle\rangle_{\omega},$$

где $N_B(\omega)$ и $f(E)$ – бозевская и фермиевская функции. Вклад в спектральную плотность $\delta K_{\mathbf{q}}^{-\tau, \tau}(\omega) = 2 \langle s^z \rangle \delta(\omega - \omega_{\mathbf{q}})$, соответствующий коллективной "псевдомагнитной" моде $\omega_{\mathbf{q}}$, приводит к возникновению сингулярного вклада $\delta \text{Re} \Sigma(E) \sim \ln(E^2 + \bar{\omega}^2)$ и резко меняющегося вблизи E_F (на интервале порядка характерных $\bar{\omega}$) одностороннего "неквазичастичного"

¹⁾ Институт атомной энергии им. И.В.Курчатова

вклада в плотность состояний (ср. с рассмотрением s - d -модели ⁹)

$$\delta N_{\tau}(E) = -\frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{k}} (E - \epsilon_{\mathbf{k}\tau})^{-2} \text{Im} \Sigma_{\mathbf{k}}^{\tau}(E),$$

$$\delta N_{\tau}(E \rightarrow 0, T=0) \sim 2 \langle s^2 \rangle J_{\perp}^2 \rho_{-\tau} |E|^{1+\alpha} \theta(-\tau E),$$

где ρ_{τ} – плотность состояний на E_F в приближении Хартри–Фока, величина α определяется поведением усредненной по \mathbf{q} спектральной плотности при $\omega \rightarrow +0$, $K^{-+}(\omega) \sim \omega^{\alpha}$. Хотя $\delta N_{\tau}(0) = 0$ при $T=0$, этот вклад дает поправку к линейному члену в теплоемкости вследствие температурной зависимости функции Ферми, входящей в Σ ,

$$\delta C(T) = \frac{\partial}{\partial T} \int dE E f(E) N(E) - \frac{\pi^2}{3} N(0) T = \int dE E f(E) \frac{\partial N(E)}{\partial T}.$$

Вклад в линейный член вносят только неквазичастичные состояния с $\tau = \uparrow$, так как они заполнены. Например, при $J_{\parallel} < 0$ в "насыщенном" случае ($2|J_{\parallel}| \langle s^2 \rangle > E_F$, так что $N_{\uparrow}(0) = 0$) имеем

$$\delta C(T) = C_{\uparrow}(T) \approx \frac{2\pi^2}{3} T \rho_{\downarrow} J_{\perp}^2 \langle s^2 \rangle \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}\uparrow} - E_F)^{-2}.$$

При учете потенциального примесного рассеяния резко изменяющийся вклад $\delta N_{\tau}(E)$ дает поправки к сопротивлению и термоэдс, пропорциональные $T^{1+\alpha}$. Неквазичастичные состояния являются бестоковыми, поскольку соответствующая поправка к функции распределения $\langle c_{\mathbf{k}\tau}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\tau} \rangle$ слабо зависит от \mathbf{k} ¹⁰. Таким образом, обсуждаемые состояния, описываемые разрезом функции Грина, (в модели Хаббарда с сильными корреляциями они рассматривались в ¹¹) играют роль, во многом аналогичную роли андерсоновских спинов ¹², и могут быть названы псевдоспинами. Как можно показать, в сверхпроводящей фазе псевдоспины приводят к бесщелевой сверхпроводимости при конечных T , что позволяет объяснить данные по ядерной спин-решеточной релаксации в ВТСП (см., напр., ¹³).

При малых $\bar{\omega}$ необходим учет высших порядков по J . Суммирование "паркетной" последовательности в пренебрежении псевдоспиновой динамикой дает

$$\Sigma_{\mathbf{k}}^{\tau}(E) = \frac{2\tau \langle s^2 \rangle J_{\perp}^2 R_{\tau}(E)}{1 + J_{\parallel} R_{\tau}(E)}, \quad R_{\tau}(E) = \sum_{\mathbf{q}} \frac{f(\epsilon_{\mathbf{q}\tau - \tau}) - \delta_{\tau\downarrow}}{E - \epsilon_{\mathbf{q}\tau - \tau}}.$$

Из-за логарифмической расходимости $R_{\tau}(E \rightarrow 0)$ величина Σ расходится при

$$|E| = T_K^{\tau} \approx W \exp(1/J_{\parallel} \rho_{-\tau}), \quad J_{\parallel} < 0$$

(W – порядка ширины зоны). При $E \rightarrow \tau T_K^{\tau}$ имеем

$$\Sigma_{\mathbf{k}}^{\tau}(E) = (V_{\tau}^{ef})^2 / (E - \tau T_K^{\tau}), \quad (V_{\tau}^{ef})^2 = 2 \langle s^2 \rangle (J_{\perp} / J_{\parallel})^2 T_K^{\tau} / \rho_{-\tau},$$

так что в спектре образуется щель, соответствующая эффективному гибридационному параметру V_{τ}^{ef} . В зависимости от отношения $J_{\perp} / J_{\parallel}$ она может выходить на E_F либо располагаться вблизи E_F . Аналогично критерию подавления РККИ взаимодействия в теории решеток Кондо, условие реализации расходимости имеет вид $T_K^{\tau} > \bar{\omega}$.

Возникающие на краях щели узкие пики многоэлектронной, но немагнитной природы дают объяснение больших значений ($\sim 100 \mu\text{В/К}$) и немонотонной зависимости термоэдс $S(T)$ в $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ ($0,45 < x < 0,65$) ¹⁴ и $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ ¹⁵. Требуемый для объяснения вида $S(T)$ энергетический масштаб пика очень мал ($\sim 100 \text{ К}$ ¹⁴), а паулиевская часть магнитной восприимчивости $\chi(x)$ в $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ не обнаруживает аномалий в данной области составов ¹⁶. Поэтому пик не может иметь одноэлектронное происхождение (многоэлектронный фактор усиления $(1 - \partial \Sigma / \partial E)$ входит в S , но не в χ). В то же время перенормировка спек-

тра не связана со спиновыми флуктуациями, так как тогда χ , как и S , принимала бы гигантские значения. На немагнитную природу пика указывает также слабая зависимость S от поля ¹⁵.

Включим в рассмотрение, помимо состояний $c_{k\tau}^+$, "нормальные" электронные состояния a_k^+ и матричные элементы гибридизации между этими группами состояний V_τ . В условиях перестройки спектра функция Грина a -электронов имеет вид, характерный для обычной гибридизационной модели с заменой $V_\tau^2 \rightarrow Z_\tau V_\tau^2$, $Z_\tau \sim T_K^*/E_F \ll 1$. Таким образом, гибридизация a - и c -электронов подавлена. Наглядно это подавление можно пояснить в терминах кастраффы ортогональности Андерсона ¹⁷: переход электрона из сильно связанного с псевдо-спинами c -состояния в слабо связанное a -состояние вызывает резкую перестройку всей электронной системы. На существование практически независимых электронных подсистем в ВСПИ указывают данные по теплопроводности при $T \lesssim 1$ К ¹⁸, согласно которым часть электронов не участвует в сверхпроводящем спаривании даже в основном состоянии.

Для титановых сплавов перестройка электронного спектра вследствие перехода в "кондо-вский" режим, возможно, соответствует электронному фазовому переходу (например, при 7% Fe в $Ti_{1-x}Fe_x$) ^{19,20}, который характеризуется, в частности, резким ростом сопротивления, возникновением "псевдощели" вблизи E_F и появлением аномального магнетосопротивления $\Delta R(h)/R \sim \pm (\mu_B h/E^*)^2$, где E^* — характерный масштаб зависимости проводимости от энергии. Из экспериментальных данных ²⁰ можно оценить $E^* \sim 10^2 - 10^3$ К. Еще более важным следствием модели является подавление гибридизации, которое, по-видимому, лежит в основе "сосуществования" локализованных и дelokализованных состояний в Ti сплавах ^{20,21}.

Литература

1. Шербаков А.С. и др. Письма в ЖЭТФ, 1987, **45**, 496.
2. Kurtz K.S. et al. Ferroelectrics, 1988, **87**, 29.
3. Шербаков А.С. и др. Письма в ЖЭТФ, 1987, **46**, 367.
4. Cohen R.E. et al. Phys. Rev. Lett., 1989, **62**, 831.
5. Изюмов Ю.А., Кацнельсон М.И. ФММ, 1988, **66**, 1083.
6. Корсунский И.Л. и др. Препринт ИФМ УрО АН СССР № 7, Свердловск, 1988.
7. Lou L.F. Sol. St. Comm., 1976, **19**, 335; Валиулин Э.Г. и др. ФММ, 1985, **60**, 499.
8. Asano S., Ishida S. J. Phys. Soc. Jap., 1985, **54**, 4241.
9. Auslender M.I., Irkhin V. Yu. J. Phys. C, 1985, **18**, 3533.
10. Вонсовский С.В., Кацнельсон М.И. УФН, 1989, **158**, 723.
11. Ирхин В.Ю., Кацнельсон М.И. ФТТ, 1983, **25**, 3383.
12. Anderson P.W. Science, 1987, **235**, 1196.
13. Kitaoka Y. et al. J. Phys. Soc. Jap., 1988, **57**, 37.
14. Krylov K.R. et al. Phys. Lett. A, 1988, **131**, 203.
15. Yu R.C. et al. Phys. Rev. B, 1988, **37**, 7963.
16. Алексашин Б.И. и др. Письма в ЖЭТФ, 1988, **48**, 263.
17. Anderson P.W. Phys. Rev. Lett., 1967, **18**, 1049.
18. Cohn J.L. et al. Phys. Rev. B, 1988, **38**, 2892; Uher C., Cohn J.L. J. Phys. C., 1988, **21**, L957.
19. Шербаков А.С. и др. Письма в ЖЭТФ, 1986, **44**, 393.
20. Katsnelson M.I., Shcherbakov A.S. J. Phys. C, 1986, **19**, 5173.
21. Katsnelson M.I., Shcherbakov A.S. Phil. Mag. B, 1982, **46**, 357.