

О СПЕКТРЕ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ И МЕЖПЛОСКОСТНОМ ТУННЕЛИРОВАНИИ В СЛОИСТЫХ КУПРАТАХ

*М.В.Еремин, С.Г.Соловьянов, С.В.Варламов, Д.Бринкман*¹⁾, М.Мали*¹⁾,
Р.Маркендорф*¹⁾, Дж.Роос*¹⁾*

*Казанский государственный университет
420008 Казань, Россия*

**Physik-Institute, Universität Zürich
CH-8057, Switzerland*

Поступила в редакцию 14 июня 1994 г.

Показано, что недавно полученные данные фотоэлектронной эмиссии с разрешением менее 10 мэВ хорошо описываются в рамках модели синглетнокоррелированного движения кислородных дырок по плоскостям CuO_2 . Модель предсказывает существование пика плотности состояний у дна зоны. Экспериментальные точки в области центра зоны Бриллюэна, соответствующие энергии 120 мэВ в $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$, объясняются межплоскостным туннелированием синглетнокоррелированных дырок кислорода.

Природа спектра элементарных возбуждений в слоистых купратах типа $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ и др. до сих пор не известна. Недавние исследования фотоэлектронной эмиссии с разрешением менее 10 мэВ выявили интересную особенность этого спектра – наличие так называемых протяженных седловых участков вдоль координатных осей зоны Бриллюэна. Эти протяженные участки приводят к пику в плотности состояний, позволяющему объяснить ряд особенностей ВТСП и, в частности, слабое проявление изотопического эффекта [1,2].

В данной статье мы показываем, что обнаруженные в [1,3] особенности закона дисперсии вблизи ферми-поверхности могут быть описаны в рамках модели синглетнокоррелированного движения дырок кислорода по плоскостям CuO_2 [4,5]. Кроме того, мы предсказываем новые важные особенности спектра, которые могут быть проверены экспериментально.

Рассмотрим вначале одну плоскость CuO_2 . В дырочном представлении оператор энергии имеет вид [5]

$$H = \epsilon_d \sum_{i\sigma} d_{i\sigma}^{\dagger} d_{i\sigma} + \epsilon_p \sum_{i\sigma} p_{i\sigma}^{\dagger} p_{i\sigma} + \sum_{ij} t_{ij}^{pd} (d_{ij}^{\dagger} p_{j\sigma} + p_{j\sigma}^{\dagger} d_{i\sigma}) + \sum_{jj'} t_{jj'}^{pp} p_{j\sigma}^{\dagger} p_{j'\sigma} + J_{pd} \sum_i \psi_i^{\dagger} \psi_i, \quad (1)$$

где $d_{i\sigma}^{\dagger}$ и $p_{j\sigma}^{\dagger}$ – операторы рождения дырки на узлах меди и кислорода, соответственно, ψ_i^{\dagger} – оператор рождения синглета Жанга–Райса [4,5] с центром на узле меди с номером i . Все значения параметров гамильтониана хорошо известны: $\epsilon_p - \epsilon_d \approx 2 - 3 \text{ эВ}$, $t^{pd} = 1 \text{ эВ}$, $t^{pd} = 0,6 \text{ эВ}$ и $0,4 \text{ эВ}$ для ближайших соседей и для вторых соседей, соответственно, $J_{pd} \approx -1,4 \text{ эВ}$.

Спектр элементарных возбуждений при стандартных приближениях модели Хаббарда определяется секулярным уравнением вида [5]

¹⁾D.Brinkmann, M.Mali, R.Markendorf and J.Roos

$$\begin{vmatrix} a_{11} - \epsilon & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} - \epsilon & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} - \epsilon & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} - \epsilon \end{vmatrix} = 0 \quad (2)$$

и приводит к четырем зонам. Нижняя - хаббардовская зона "меди" - полностью заполнена. Две "кислородные" зоны пусты. Зона синглетнокоррелированного движения кислородной дырки на фоне однократно занятых узлов меди является частично заполненной. Оператор рождения этого квазичастичного возбуждения приближенно может быть записан в виде

$$S_{k\sigma}^+ \approx \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i \psi_i^+ d_{i\sigma} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} \quad (3)$$

и напоминает оператор рождения квазичастицы, соответствующий верхней "медно-кислородной" хаббардовской зоне. Из-за того, что диэлектрическая щель спектра $\epsilon_p - \epsilon_d$ сравнима с t^{pd} , обычная теория возмущений не годится для расчета корней уравнения (2). Ниже для надежности, как и в [5], мы используем численные методы решения. Явный вид матричных элементов a_{ij} приведен в [5]. Здесь мы обратим внимание лишь на два уточнения в них:

$$a_{41} = \frac{t^{pd}}{4\sqrt{2}} [4n_p + n_d(2 - n_p)(\cos k_x a + \cos k_y a)], \quad (4)$$

$$a_{44} = \epsilon_p + J_{pd} + (-2t^{xy} + t^{xz}) \left(1 - \frac{n_p}{2}\right) - \frac{1}{16}(2 - n_p)n_d J_{pd}(\cos k_x a + \cos k_y a). \quad (5)$$

Последние слагаемые в (5) связаны с собственным когерентным движением синглетнокоррелированных дырок кислорода, которое в [5] не учитывалось.

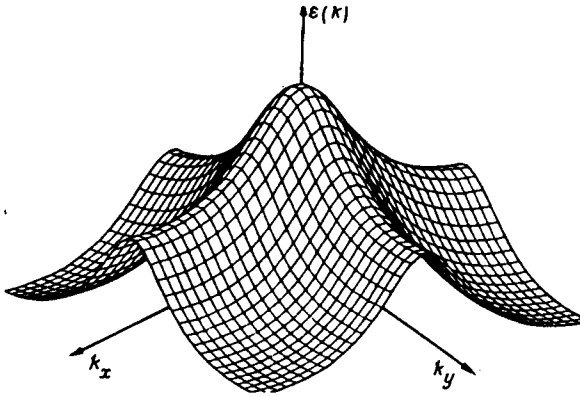


Рис.1. Рассчитанные значения $\epsilon(k)$ синглетнокоррелированной зоны дырок кислорода в плоскости CuO_2

Рассчитанная из уравнения (2) дисперсия синглетнокоррелированной зоны показана на рис.1. Обратим внимание на седловые точки вдоль координатных осей и "крылья" у дна зоны. Сопоставление с имеющимися экспериментальными точками в двух сечениях даны на рис.2а и б. Для удобства на этом рисунке мы используем электронное представление как и в [1, 3]. Как видно, рассчитанная верхняя кривая замечательно согласуется с данными фотоэлектронной эмиссии [1, 3]. Результаты наших расчетов устойчивы относительно

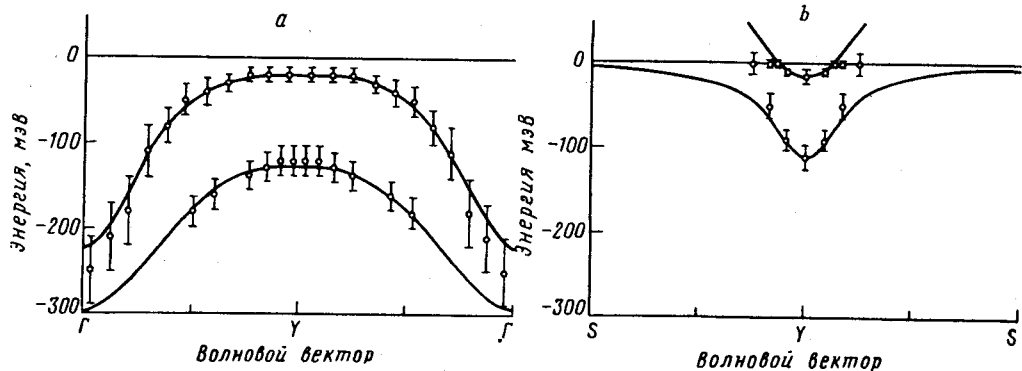


Рис.2. Измеренные в [1,3] и рассчитанные нами кривые $\epsilon(k)$ вдоль двух направлений зоны Бриллюэна: *a* - линия Г-У-Г, *b* - линия S-У-S

возможных изменений параметров гамильтониана (1). В частности, как при $\epsilon_p - \epsilon_d = 2$ эВ, так и при $\epsilon_p - \epsilon_d = 3$ эВ расчетная кривая укладывается в рамки погрешностей экспериментов. Устойчива также получаемая картина плотности состояний. Она приведена на рис.3. Малый пик соответствует седловым точкам, описанным в [1]. Большой пик, расположенный у дна зоны, соответствует "крыльям" и ранее не отмечался. Это предсказание нашей модели. Очевидно, что при малых степенях допирования энергия Ферми оказывается вблизи этого пика и, если этот пик существует, он должен быть ответственным за ряд необычных свойств купратов типа $\text{La}_2\text{CuO}_{4+\delta}$. Этот вопрос, очевидно, требует дальнейших экспериментальных исследований.

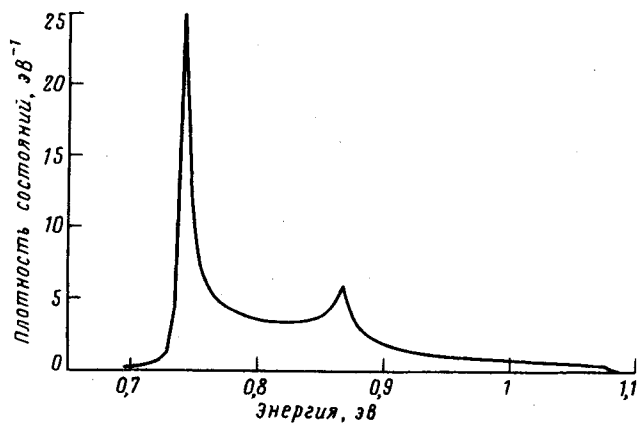


Рис.3. Плотность состояний синглетнокоррелированной зоны. Энергия отсчитывается от потолка нижней хаббардовской зоны меди

Обсудим происхождение нижней зоны на рис.2*a*, то есть экспериментальных точек в области центра зоны Бриллюэна при энергиях -120 мэВ [3]. Покажем, что они могут быть удовлетворительно описаны в предположении о существовании туннелирования синглетнокоррелированных дырок кислорода между соседними плоскостями в $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ или $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$. Мы имеем в виду здесь плоскости, отстоящие друг от друга на расстоянии порядка $3,3\text{\AA}$.

В $\text{La}_2\text{CuO}_{4+\delta}$ такие плоскости отсутствуют. Идея о возможности межплоскостного туннелирования синглетных пар уже высказывалась ранее Хсу и Андерсоном [6] и др., однако это туннелирование не связывалось с синглетами Жанга-Райса [4].

Оператор туннелирования мы получаем в третьем порядке теории возмущения по следующей схеме: дырка кислорода из плоскости 1 перескакивает в верхнюю хаббардовскую зону меди, затем она туннелирует в верхнюю хаббардовскую зону меди соседней плоскости и, наконец на одну из четырех ближайших позиций кислорода около меди в плоскости 2. Таким образом, оператор биплоскостного сэндвича, представляющего собой сумму двух операторов (1) (для первой и второй плоскостей), дополняется оператором вида

$$8 \sum_i \left[\frac{t^{pd}}{U_{dd} - (\epsilon_p - \epsilon_d) - 2V_{pd}} \right]^2 t_{i_1 i_2}^{dd} \psi_{i_1}^+ d_{i_1 \sigma} d_{i_2 \sigma}^+ \psi_{i_2}. \quad (6)$$

Интеграл перескока t_{12}^{dd} дырки между состояниями меди $|x^2 - y^2\rangle$ из разных плоскостей может быть оценен следующим образом. Известно, что он входит в оператор межплоскостной связи спинов $J_{\perp}^{dd}(S_1^d S_2^d)$, параметр которого определяется выражением вида

$$J_{\perp}^{dd} = 4 \frac{(t_{12}^{dd})^2}{U_{dd}}, \quad (7)$$

где U_{dd} — энергия отталкивания дырок на узле меди, U_{dd} надежно известна и составляет около 9 эВ. Используя экспериментальную оценку $J_{\perp}^{dd} = 15$ мэВ, как в [7], мы находим $t_{12}^{dd} \approx 0,2$ эВ, и, следовательно, параметр межплоскостного туннелирования синглетнокоррелированных дырок кислорода оказывается равным

$$\tilde{t}_{12}^{pp} = 8 \left[\frac{t^{pd}}{U_{dd} - (\epsilon_p - \epsilon_d) - 2V_{pd}} \right]^2 t_{12}^{dd} \approx 0,1 \text{ эВ}. \quad (8)$$

Для объяснения одинакового поведения дисперсионных кривых на рис.2 необходимо положить $\tilde{t}_{12}^{pp} = 0,13$ эВ. Другое важное обстоятельство, свидетельствующее в пользу нашей модели туннелирования, заключается в следующем. Из (6) легко видеть, что при переходе в k -представление параметр туннелирования не зависит от k . Иначе говоря, величина туннельного расщепления зон одинакова для всех точек зоны Бриллюэна. Дисперсионные кривые зон подобны. Это, кажется, хорошо видно по экспериментальным точкам [3], представленным на рис.2, хотя большее число экспериментальных точек, конечно, желательно для окончательного вывода. Наша модель дает еще одно важное предсказание. Из рис.2b видно, что "крылья" верхней дырочной зоны оказываются вблизи энергии Ферми и, таким образом, седловой пик в плотности состояний одной зоны усиливается пиком крыльев другой. Это обстоятельство может оказаться решающим для объяснения уже отмечавшегося в литературе усиления T_c в биплоскостных купратах [8].

Авторы глубоко благодарны проф. Теплому за обсуждение вопросов усиления T_c в биплоскостных ВТСП и за возможность ознакомления с работой [8] до ее публикации. Работа выполнена при поддержке проекта №91001 РНТП "Высокотемпературная сверхпроводимость".

1. A.A.Abrikosov, J.C.Campuzano, and K.Gofron, *Physica C* **214**, 73 (1993).
2. A.A.Abrikosov, *Physica C* **222**, 191 (1994).
3. K.Gofron, J.C.Campuzano, H.Ding, et al., Preprint (1993).
4. F.C.Zhang and T.M.Rice, *Phys. Rev. B* **37**, 3759 (1988).
5. M.V.Eremin, R.Markendorf, and S.V.Varlamov, *Solid Stat. Comm.* **88**, 15 (1993).
6. T.H.Hsu and P.W.Anderson, *Physica C* **162-164**, 1445 (1989).
7. M.J.Lercher and J.M.Wheatley, *Phys. Rev. B* **49**, 736 (1994).
8. O.N.Bakharov, A.V.Dooglav, A.V.Egorov, et al., in: "Phase separation in cuprate superconductors", ed. K.A.Müller and E.Sigmund, Springer-Verlag, 1994.