Письма в ЖЭТФ, том 62, вып.3, стр.192 - 196 © 1995г. 10 августа

ДИСПЕРСИЯ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ ЩЕЛИ В СЛОИСТЫХ КУПРАТАХ. МОДЕЛЬ МОНОСЛОЯ

М.В.Еремин[1], *И.А.Ларионов*

Казанский государственный университет

420008 Казань, Россия

Поступила в редакцию 27 июня 1995 г.

Найдены самосогласованные решения уравнения БКШ при различных значениях химического потенциала. Для уровня Ферми вблизи дна (потолка) зоны решения соответствуют s-типу спаривания, в то время как для ϵ_F в центре зоны решения относятся к d-типу. Показано, что взаимодействие синглетов Жанга–Райса через поле фононов дает значения энергетической щели, согласующиеся с экспериментальными данными.

Исследование зависимости энергетической щели от волнового вектора в купратах – одна из важнейших проблем ВТСП. Она была в центре дискуссий недавней станфордской конференции по спектроскопии новых сверхпроводников [1]. Три типа зависимостей особенно привлекали внимание:

1) $\Delta_1(k) = \Delta_0[\cos(k_x a) - \cos(k_y a)]$ – так называемый d-тип спаривания, обычно связываемый со спиновыми флуктуациями спинов меди [2, 3];

2) $\Delta_2(k) = \Delta_0|\cos(k_x a) - \cos(k_y a)|$ – анизотропный тип s спаривания, предложенный в [4] в связи с возможностью туннелирования куперовских пар из одного слоя в другой;

3) $\Delta_3(k) = \Delta_{xy}\cos(k_x a)\cos(k_y a)$ – так называемый s_{xy}-тип спаривания, введенный Норманом и др. [5] на основе недавних фотоэмиссионных данных для $Bi_2Sr_2CaCu_2O_8$ [6].

Как показали расчеты [7], последняя зависимость допускается уравнением БКШ для монослоя при странном, однако, предположении, что взаимодействие вторых соседей в плоской решетке атомов меди примерно в 1,5 раза больше (!), чем взаимодействие ближайших атомов меди, причем величина этого взаимодействия должна быть порядка $-0,15$ эВ, то есть очень велика. Для сравнения укажем, что суперобменное взаимодействие спинов меди (между первыми соседями (!)) не превышает 0,13 эВ. В настоящем сообщении мы приводим результаты наших численных решений уравнения БКШ, оставаясь, однако, в рамках разумных значений потенциала спаривания. В дополнение к результатам работы [7] для монослоя мы исследовали поведение решения при малом допировании и неожиданно нашли, что уравнение БКШ допускает решения s типа даже для потенциала спаривания типа

$$-2|V_1|[\cos(q_x a) + \cos(q_y a)], \qquad (1)$$

который, как часто считается, можно приводить лишь к щели d-типа.

Мы исследовали также характер решений на энергетическую щель в классе потенциала спаривания вида

$$V(\mathrm{q}) = -2|V_1|[(1+\alpha)\cos(\mathrm{q}_x a) + (1-\alpha)\cos(\mathrm{q}_y a)] - 4|V_2|\cos(\mathrm{q}_x a)\cos(\mathrm{q}_y a), \qquad (2)$$

[1]e-mail: eremin@open.ksu.ras.ru.

где параметры V_1 и V_2 имеют смысл потенциала взаимодействия первых и вторых соседей через поле деформаций, а α – параметр, учитывающий ромбичность. В случае достаточно сильного допирования, когда уровень Ферми оказывается уже в районе середины зоны, решения являются смешанными (s- и d-типа). Рассчитанные значения щели и T_c по порядку величины согласуются с имеющимися экспериментальными данными.

В работе [8] было показано, что элементарные возбуждения нормальной фазы купратов могут быть описаны как движение синглетно-коррелированных дырок кислорода. Результаты численных расчетов [8] были повторены в [9] методом последовательных канонических преобразований, позволившем записать энергетический спектр возбуждений в аналитическом виде:

$$\epsilon_{1k} = \frac{\epsilon_{pk} + \epsilon_{dk}}{2} + \frac{1}{2}\left\{(\epsilon_{pk} - \epsilon_{dk})^2 - (1-\delta^2)(t_k^{(12)})^2\right\}^{1/2}, \tag{3}$$

где δ – число допированных дырок в расчете на одну позицию меди,

$$\epsilon_{pk} = \epsilon_p^* + \frac{1}{2}(1+\delta)\sum_j t_{ij}^{(1)} \exp[-\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)],$$

$$\epsilon_{dk} = \epsilon_d + \frac{1}{2}(1-\delta)\sum_j t_{ij}^{(2)} \exp[-\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)], \tag{4}$$

$$t_k^{(12)} = \sum_j t_{ij}^{(12)} \exp[-\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)].$$

Значения эффективных интегралов переноса t_{ij} приведены в [9], разность $\epsilon_p^* - \epsilon_d$ составляет 0,4 эВ. Выражение (3) удовлетворительно повторяет рассчитанную в [8] картину плотности состояний, в которой имеется два пика. Один из них связан с так называемыми седловыми точками вдоль координатных осей $\mathbf{k}_x$, $\mathbf{k}_y$, а другой находится вблизи дна зоны и соответствует "крыльям" энергетической поверхности ϵ_{1k}.

В соединениях типа $La_{2-x}Sr_xCuO_2$ уровень Ферми, по нашим представлениям, находится вблизи дна зоны, в то время как в бислойных соединениях типа $YBa_2Cu_4O_8$ или $Bi_2Sr_2CaCu_2O_8$ он оказывается уже в районе середины нижней связывающей зоны. Верхнюю антисвязывающую зону в данном случае мы не учитываем, и таким образом моно- и бислойные соединения рассматриваем в рамках одной изолированной зоны с различной степенью ее заполнения.

Два важных взаимодействия не учитывались при расчете энергетического спектра нормальной фазы [8, 9]: суперобменное взаимодействие спинов меди в плоскостях CuO_2,

$$V_1^{(ij)} = J_{ij}[1/2 - 2(\mathbf{S}_i\mathbf{S}_j)], \tag{5}$$

и взаимодействие синглетов Жанга–Райса через тетрагональные деформационные моды [10]

$$V_2(ij) = -\frac{d^i d^j}{8\pi C_{44} R_{ij}^3}[4(1-2\gamma^2) - 6(3-4\gamma^2)\frac{X_{ij}^2 + Y_{ij}^2}{R_{ij}^2} + 15(1-\gamma^2)\frac{(X_{ij}^2 + Y_{ij}^2)^2}{R_{ij}^4}]. \tag{6}$$

Параметр суперобменной связи $2J_{ij} \approx 0,12$ эВ [11]. Значение упругого модуля $C_{44} = 48,3 \cdot 10^{10}$ дин/см^2 для кристалла $YBa_2Cu_3O_7$ недавно измерено Ледбеттером и др. [12]. Ими же измерено и отношение скоростей продольного и

поперечного звуков $\gamma = 0,582$. Значение параметра деформационного потенциала с тетрагональной модой ($d_i = d_j \approx 6$ эВ) было оценено ранее в [10].

Используя указанные значения, мы находим, что потенциал взаимодействия между первыми и вторыми соседями составляет $V_1 = -0,1$ эВ и $V_2 = -0,036$ эВ, соответственно.

Уравнение для энергетической щели $\Delta(\mathbf{k})$ имеет вид

$$\Delta(\mathbf{k}) = \cos^2\theta_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} V(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cos^2\theta_{\mathbf{k}'} \frac{\Delta(\mathbf{k}')}{2E_{\mathbf{k}'}} \tanh\frac{E_{\mathbf{k}'}}{2kT}, \tag{7}$$

где

$$E_{\mathbf{k}'} = \sqrt{(\epsilon_{1k}-\mu)^2 + \Delta^2(\mathbf{k}')}. \tag{8}$$

Появление множителя

$$\cos^2\theta_{\mathbf{k}} = \frac{\epsilon_{1k} - \epsilon_{kd}}{\sqrt{(\epsilon_{kp}-\epsilon_{kd})^2 + (t_k^{(12)})^2(1-\delta^2)}} \tag{9}$$

связано с гибридизацией синглетно-коррелированной зоны дырок кислорода ϵ_{pk} с нижней хаббардовской зоной дырок меди ϵ_{dk}. Из (2) и (7) видно, что зависимость щели от волнового вектора в общем случае должна иметь вид

$$\Delta(\mathbf{k}) = \{\Delta_x \cos k_x a + \Delta_y \cos k_y a + \Delta_{xy} \cos k_x a \cdot \cos k_y a +$$

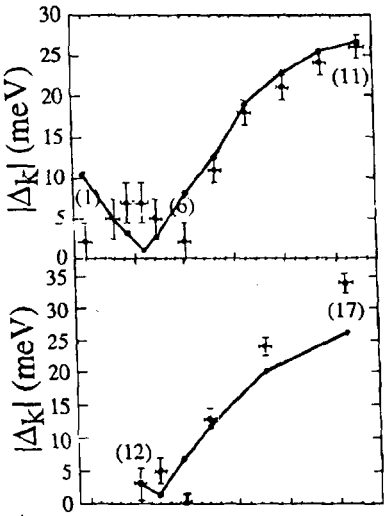
$$+\Delta'_x \sin k_x a + \Delta'_y \sin k_y a + \Delta'_{xy} \sin k_x a \cdot \sin k_y a\}\cos^2\theta_{\mathbf{k}}, \tag{10}$$

где Δ_x, Δ_y, Δ_{xy}, Δ'_x, Δ'_y, и Δ'_{xy} – постоянные, которые определяются самосогласованно.

Рассчитанные значения параметров энергетической щели при различных значениях V_2, α и μ

μ, Эв	$V_1 = -0,1$, $V_2 = 0$ $\alpha = 0$		$V_1 = -0,1$, $V_2 = -0,036$ $\alpha = 0$			$V_1 = -0,1$, $V_2 = -0,036$ $\alpha = 0,1$		
	Δ_x	Δ_y	Δ_x	Δ_y	Δ_{xy}	Δ_x	Δ_y	Δ_{xy}
−0,10	1,4	1,4	2,3	2,3	1,3	2,7	1,9	1,3
−0,12	2,2	2,2	3,2	3,2	1,7	3,9	2,7	1,7
−0,14	2,2	2,2	3,5	3,5	1,6	4,4	2,7	1,7
−0,16	3,0	3,0	4	4	1,5	6	2,5	1,6
−0,18	12	−12	12	−12	0	16	−9	0,8
−0,20	18	−18	18	−18	0	22	−15	0,5
−0,23	20	−20	20	−20	0	24	−17	0,3
−0,25	18	−18	18	−18	0	21	−16	0,2
−0,30	11	−11	11	−11	0	12	−9	0
−0,35	3,2	−3,5	3,5	−3,5	0	4,2	−3	0
−0,40	0,8	−0,8	0,8	−0,8	0	1,8	0,5	−0,2
−0,42	−3	−3	−3,8	−3,8	1,2	−4,5	−3	1,2
−0,44	−6	−6	−7,5	−7,5	3,2	−9	−6,5	3,3
−0,46	−8	−8	−9,5	−9,5	5	−11	−8	5
−0,48	−8	−8	−9	−9	5	−10	−7,5	5
−0,50	−2	−2	−4	−4	2,5	−4,5	−3,5	2,5

Так же как и в [7], мы нашли, что в процессе самосогласования Δ'_x, Δ'_y, Δ'_{xy} – амплитуды синусов оказываются ничтожно малыми. Рассчитанные значения Δ_x, Δ_y, Δ_{xy} приведены в таблице. Начало отсчета энергии совмещено с потолком зоны. Пик плотности состояний, связанный с седловыми точками, соответствует $\epsilon = -0,2$ эВ. Из приведенных данных видно, что вблизи дна зоны решение всегда s-типа, в то время как в районе центра зоны оно преимущественно d-типа. Перемешивание решений d- и s-типов обусловлено ромбичностью кристалла. В случае тетрагональной симметрии решения s- и d-типов исключают друг друга.



Найденный нами характер изменения решений на щель в зависимости от положения ϵ_F коррелирует с имеющимися экспериментальными данными. В так называемых электронных сверхпроводниках $Nd_{2-x}Ce_xCuO_4$ уровень Ферми отстоит от седлового пика на величину 0,35 эВ (то есть находится у дна зоны) [13]. Все используемые методы определения симметрии щели показывают [1], что в них реализуется s тип спаривания. В сверхпроводниках $YBa_2Cu_4O_8$, $Bi_2Sr_2CaCu_2O_8$ и др. уровень Ферми отстоит от седлового пика на величину 0,03 эВ (то есть находится в центре зоны) [13]. Эти сверхпроводники в большинстве экспериментов [1] показывают d-тип спаривания. Исключением считаются данные фотоэмиссии [6], представленные на рисунке. На оси ординат цифрами указана нумерация различных точек зоны Бриллюэна. Цена деления горизонтальных осей та же, что и в [6]. Сплошная линия – результаты нашего расчета при $\mu = -0,2$. Видно разногласие расчета и эксперимента лишь в районе точек 1–6. Этот вопрос, очевидно, требует дальнейших исследований, как теоретических, так и экспериментальных. В целом же расчетная кривая коррелирует с фотоэмиссионными данными [6]. Отметим, что рассчитанное нами значение критической температуры T_c при $\mu = -0,2$ равно 90 K, то есть соответствует реальным критическим температурам этих соединений: $T_c = 92$ K и 85 K для $YBa_2Cu_4O_8$ и $Bi_2Sr_2CaCu_2O_8$, соответственно.

Авторы благодарны М.Р.Норману за предоставленную возможность ознакомиться с препринтами статей [5, 7] до их публикации.

1. *Spectroscopies in Novel Superconductors*, Abstracts, March 15-18, 1995, Stanford Linear Accelerator Center, Stanford University.
2. D.Scalapino, E.Loh Jr., and J.E.Hirsch. Phys. Rev. **B34**, 8190 (1986); ibid **35**, 6694 (1987).
3. A.J.Millis, H.Monien, and D.Pines, Phys. Rev. **B42**, 167 (1990).
4. S.Chakravarty, A.Sudbo, P.W.Anderson, and S.Strong, Science **261**, 337 (1993).
5. M.R.Norman, M.Randeria, H.Ding, and J.C.Campuzano, Phenomenological Models for the Gap Anisotropy of Bi-2212 as Measured by ARPES, Preprint, 1995.
6. H.Ding, J.C.Campuzano, A.F.Bellman et al., Phys. Rev. Lett. **74**, 2784 (1995).
7. R.Fehrenbacher and M.R.Norman, Phenomenological BCS theory of the high-T_c cuprates. Preprint, 1995.
8. М.В.Еремин, С.Г.Соловьянов, С.В.Варламов и др., Письма в ЖЭТФ **60**, 118 (1994).
9. M.V.Eremin, S.G.Solovjanov, and S.V.Varlamov, Phys. Chem. Solids, 1995 (in print).
10. M.V.Eremin, Z.Naturforsch. **49a**, 385 (1994).
11. S.Shamoto, M.Sato, J.M.Tranquada et al., Phys. Rev. **B48**, 13817 (1993).
12. H.Ledbetter, M.Lei, A.Hermann, and Zh.Sheng, Physica **C225**, 397 (1994).
13. D.M.King, Z.-X.Shen, D.S.Dessau et al., Phys. Rev. Lett. **73**, 3298 (1994).