

## ОСОБЕННОСТИ *D*-СПАРИВАНИЯ В БИСЛОЙНЫХ КУПРАТАХ ПРИ ПАЙЕРЛСОВСКОЙ НЕСТАБИЛЬНОСТИ НОРМАЛЬНОЙ ФАЗЫ

М.В.Еремин<sup>1)</sup>, И.А.Ларионов

Казанский государственный университет  
420008 Казань, Россия

Поступила в редакцию 28 августа 1998 г.

Составлена и решена система самосогласованных интегральных уравнений для сверхпроводящей щели с учетом неустойчивости нормальной фазы бислойных купратов по отношению к волнам зарядовой плотности (ВЗП). Рассчитаны зависимости критических параметров от волнового вектора, температуры и индекса допирования. Найдено, что область совместного сосуществования сверхпроводимости и волн зарядовой плотности *d*-типа сильно зависит от индекса допирования. Эффективный параметр энергетической щели, определяемый как интервал между пиками плотности состояний, может иметь локальный минимум при  $T < T_c$ .

PACS: 74.20.-z, 74.25.-q

К настоящему времени, по-видимому, можно считать установленным экспериментальным фактом, что в большинстве слоистых купратов реализуется *d*-тип спаривания, причем определяющая компонента параметра порядка псевдощели в нормальной фазе недопированных образцов имеет также симметрию *d*-типа [1,2]. Это заключение, по крайней мере, не вызывает возражений для  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ ,  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$  и других бислойных купратов. Вопрос о природе спаривания и происхождении псевдощели в нормальной фазе все еще считается открытым. В частности, до сих пор не ясно, являются ли они взаимосвязанными или полностью независимыми. В данной работе мы показали, что эмпирические зависимости  $T_C$  и температуры закрытия псевдощели  $T^*$  от индекса допирования и зависимости их параметров порядка от волнового вектора могут быть качественно поняты в модели квазидвумерного металла с сильными электронными корреляциями, когда щель в спектре элементарных возбуждений обусловлена аномальными средними типа  $\langle \Psi_{\mathbf{k}}^{2\sigma} \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{2\sigma} \rangle$ , характерными для пайерлсовской неустойчивости нормальной фазы.

Проблема существования сверхпроводимости в условиях пайерлсовской неустойчивости относится к разряду классических и для обычных металлов обсуждалась в ряде работ (см., например, [3,4]), где аномальные средние были обусловлены фреиховским взаимодействием и не зависели от волнового вектора. В настоящей работе основным взаимодействием отвечающим за образование сверхпроводящего состояния, считается короткодействующее суперобменное взаимодействие, и нормальная фаза имеет существенно неферми-жидкостное поведение. Спектральный вес рассматриваемой зоны проводимости нелинейно зависит от индекса допирования, и ее половинное заполнение реализуется уже при числе дырок на одну элементарную ячейку бислоя  $\text{Cu}_2\text{O}_4$ , равном  $2/7$  [5] вместо 1, как это было бы в случае нормальных металлов.

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

Для описания подсистемы носителей тока в бислойных ВТСП мы используем гамильтониан вида

$$\hat{H} = \sum_{l\sigma} \epsilon_p \Psi_l^{\sigma\sigma} + \sum_{lm} t_{lm}^{pp} \Psi_l^{2\sigma} \Psi_m^{2\sigma} + \sum_{l>m} j_{lm} \left[ 2(\bar{S}_l \bar{S}_m) - \frac{n_l n_m}{2} \right] + \sum_{l>m} g_{lm} \delta_l \delta_m, \quad (1)$$

где  $\Psi_m^{2\sigma}$  ( $\Psi_m^{\sigma 2}$ ) – операторы хаббардовского типа, соответствующие рождению (уничтожению) квазичастиц в связывающей синглетно-коррелированной зоне кислорода [6],  $n_l = \Psi_l^{\uparrow\uparrow} + \Psi_l^{\downarrow\downarrow}$ ;  $\delta_l = n_l + 2\Psi_l^{2,2}$ ;  $j_{lm}$  и  $g_{lm}$  – параметры суперобменного и кулоновского взаимодействий. Закон дисперсии квазичастиц имеет вид

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = P_{pd} [2t_1 (\cos \mathbf{k}_x a + \cos \mathbf{k}_y a) + 4t_2 \cos \mathbf{k}_x a \cos \mathbf{k}_y a + 2t_3 (\cos 2\mathbf{k}_x a + \cos 2\mathbf{k}_y a)] - \mu, \quad (2)$$

где  $\mu$  – химический потенциал, который при оптимальном допировании, согласно фотоэмиссионным данным [7], расположен на 10 мэВ ниже седлового пика плотности состояний,  $P_{pd} = (2 + \delta)/4$  – среднее значение антикоммутиров  $\{\Psi_m^{2\sigma}, \Psi_m^{\sigma 2}\}$  с учетом туннелирования,  $\delta$  – число носителей тока в расчете на одну элементарную ячейку в бислое  $\text{Cu}_2\text{O}_4$ ,  $a$  – постоянная решетки,  $t_1 = t_1^{(90)} [1 + \langle S_i S_j \rangle / P_{pd}^2]$ . Мы принимаем следующий набор параметров, согласованный с поверхностью Ферми и температурным ходом спиновой восприимчивости нормальной фазы  $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ :  $t_1^{(0)} = 70$  мэВ,  $t_2^{(0)} = 0$ ,  $t_3^{(0)} = 5$  мэВ [8]. Следуя идее [9], зависимость спиновых корреляторов ближайших соседей задаем феноменологически:  $\langle S_i S_j \rangle = (-0.2 \exp(0.6 + \delta/2)^{-1} + 0.6) / 1.8356$  так, чтобы ширина зоны стремилась к нулю при  $\delta \rightarrow 0$ , что необходимо для корректного описания перехода диэлектрик – металл в этих соединениях.

В приближении среднего поля спектр элементарных возбуждений гамильтониана (1) определяется уравнением

$$\text{det} \begin{vmatrix} \epsilon_{\mathbf{k}} - E & G_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} & \Delta_{\mathbf{k}} & U_{\mathbf{k}} \\ G_{\mathbf{k}} & \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} - E & U_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} & \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} \\ \Delta_{\mathbf{k}}^* & U_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^* & -\epsilon_{\mathbf{k}} - E & -G_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^* \\ U_{\mathbf{k}}^* \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^* & \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^* & -G_{\mathbf{k}}^* & -\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} - E \end{vmatrix} = 0. \quad (3)$$

Параметр порядка сверхпроводящего перехода (СП) определяется выражением

$$\Delta_{\mathbf{k}_1} = \frac{1}{P_{pd} N} \sum_{\mathbf{k}} [2j(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}) - g(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}) + P_{pd}^2 B(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_1 - \mathbf{k})] \langle \Psi_{\mathbf{k}}^{12} \Psi_{-\mathbf{k}}^{\uparrow 2} \rangle, \quad (4)$$

где  $j(\mathbf{q})$ ,  $g(\mathbf{q})$  и  $B(\mathbf{k}_1, \mathbf{q})$  – фурье-образы потенциалов суперобменного, кулоновского и фреиховского взаимодействий, соответственно. В частности,  $j(\mathbf{q}) = j_0(1 - 6\delta^2)(\cos q_x a + \cos q_y a)$ , где  $j_0 = 125$  мэВ для  $\text{YBaCuO}$  соединений [10] и  $g(\mathbf{q}) = g_0 \exp(-7\delta)(\cos q_x a \cos q_y a)$ , где  $g_0 = 315$  мэВ. Среди всевозможных фоновых мод наиболее важный вклад в спаривание дают изгибные моды. В этом случае

$$B(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = 2B_0^2 \hbar \omega_{\mathbf{q}} \frac{1 + 1/2[\cos(q_x a) + \cos(q_y a)]}{(\hbar \omega_{\mathbf{q}})^2 - (\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})^2} \Theta(\hbar \omega_D - |\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}|) \Theta(\hbar \omega_D - |\epsilon_{\mathbf{k}}|), \quad (5)$$

$\hbar \omega_D$  – частота Дебая порядка 45 мэВ,  $\Theta(x)$  – тета-функция;  $B_0 \approx 35$ . В интересующей нас области изменения индекса допирования  $\delta$  уравнение (4) имеет решение вида  $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta_0 (\cos k_x a - \cos k_y a)$ .

Как уже указывалось в [5], параметр ВЗП  $G_k$  является суммой двух компонент с различной зависимостью от волнового вектора. Компонента, связанная с короткодействующими потенциалами

$$G_{k_1}^{ez} = \frac{1}{P_{pd}N} \sum_{\mathbf{k}} [j(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}) + g(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k})] \langle \Psi_{\mathbf{k}}^{2\uparrow} \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^{\uparrow 2} \rangle, \quad (6)$$

имеет симметрию  $d$ -типа  $G_{\mathbf{k}}^{ez} = iG_0(\cos k_x a - \cos k_y a)$ , в то время, как фононная часть

$$G_{k_1}^{ph} = \frac{P_{pd}}{N} \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k},\mathbf{Q}} \langle \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^{2\uparrow} \Psi_{\mathbf{k}}^{\uparrow 2} \rangle + V_{\mathbf{k}_1,\mathbf{Q}} \frac{P_{pd}}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^{2\uparrow} \Psi_{\mathbf{k}}^{\uparrow 2} \rangle, \quad (7)$$

имеет симметрию  $s$ -типа. Она относительно мала и ниже не учитывается.

Параметр порядка  $U_{\mathbf{k}}$ , фигурирующий в (3), связан с термодинамическим средним  $\langle \Psi_{\mathbf{k}}^{\downarrow 2} \Psi_{-\mathbf{k}-\mathbf{Q}}^{\uparrow 2} \rangle$ , которое естественно появляется в уравнениях движения при наличии сверхпроводимости и пайерлсовской неустойчивости. В общем случае он определяется выражением

$$U_{k_1} = \frac{1}{P_{pd}N} \sum_{\mathbf{k}} [j(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}) + j(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k} - \mathbf{Q}) - g(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}) + P_{pd}^2 B(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_1 - \mathbf{k})] \langle \Psi_{\mathbf{k}}^{\downarrow 2} \Psi_{-\mathbf{k}-\mathbf{Q}}^{\uparrow 2} \rangle, \quad (8)$$

Ниже мы исследуем режим примерно оптимального допирования, когда  $Q \approx (\pi, \pi)$ . Из (8) видно, что  $U_{\mathbf{k}}$  сравнительно мал и может иметь только  $s$ -симметрию, так как при  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$  сумма  $j(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}) + j(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k} - \mathbf{Q})$  обращается в нуль. Отметим, что при  $U_{\mathbf{k}} = 0$  уравнение (3) приводит к следующему спектру:

$$E_{1,2} = \sqrt{1/2(\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2) + \Delta_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}}^* + G_{\mathbf{k}} G_{\mathbf{k}}^* \pm 1/2 E_{12}^2}, \quad (9)$$

где

$$E_{12}^2 = \sqrt{(\epsilon_{\mathbf{k}}^2 - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2)^2 + 4G_{\mathbf{k}} G_{\mathbf{k}}^* (\epsilon_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}})^2 + 4\Delta_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}}^* (G_{\mathbf{k}} + G_{\mathbf{k}}^*)^2} \quad (10)$$

и  $E_4 = -E_1$ ,  $E_3 = -E_2$ .

В общем случае мы имеем следующую систему интегральных уравнений:

$$\langle \Psi_{\mathbf{k}}^{\downarrow 2} \Psi_{-\mathbf{k}}^{\uparrow 2} \rangle = \frac{P_{pd} \Delta_{\mathbf{k}}}{4} \left[ \frac{1}{E_1} \tanh \left( \frac{E_1}{2k_B T} \right) + \frac{1}{E_2} \tanh \left( \frac{E_2}{2k_B T} \right) \right] + \frac{P_{pd} N \Delta}{2E_{12}^2} \left[ \frac{1}{E_1} \tanh \left( \frac{E_1}{2k_B T} \right) - \frac{1}{E_2} \tanh \left( \frac{E_2}{2k_B T} \right) \right], \quad (11)$$

$$\langle \Psi_{\mathbf{k}}^{2\uparrow} \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^{\uparrow 2} \rangle = \frac{P_{pd} G_{\mathbf{k}}}{4} \left[ \frac{1}{E_1} \tanh \left( \frac{E_1}{2k_B T} \right) + \frac{1}{E_2} \tanh \left( \frac{E_2}{2k_B T} \right) \right] + \frac{P_{pd} N G}{2E_{12}^2} \left[ \frac{1}{E_1} \tanh \left( \frac{E_1}{2k_B T} \right) - \frac{1}{E_2} \tanh \left( \frac{E_2}{2k_B T} \right) \right], \quad (12)$$

$$\langle \Psi_{\mathbf{k}}^{\downarrow 2} \Psi_{-\mathbf{k}-\mathbf{Q}}^{\uparrow 2} \rangle = \frac{P_{pd} U_{\mathbf{k}}}{4} \left[ \frac{1}{E_1} \tanh \left( \frac{E_1}{2k_B T} \right) + \frac{1}{E_2} \tanh \left( \frac{E_2}{2k_B T} \right) \right] + \frac{P_{pd} N U}{2E_{12}^2} \left[ \frac{1}{E_1} \tanh \left( \frac{E_1}{2k_B T} \right) - \frac{1}{E_2} \tanh \left( \frac{E_2}{2k_B T} \right) \right], \quad (13)$$

где введены обозначения:

$$N_{\Delta} = 1/2\Delta_{\mathbf{k}}(\epsilon_{\mathbf{k}}^2 - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^2) + \Delta_{\mathbf{k}}G_{\mathbf{k}}^*(G_{\mathbf{k}} + G_{\mathbf{k}}^*) + U_{\mathbf{k}}(\Delta_{\mathbf{k}}U_{\mathbf{k}}^* - \Delta_{\mathbf{k}}^*U_{\mathbf{k}}) + 2\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}G_{\mathbf{k}}^*U_{\mathbf{k}},$$

$$N_G = 1/2G_{\mathbf{k}}(\epsilon_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}) + \Delta_{\mathbf{k}}\Delta_{\mathbf{k}}^*(G_{\mathbf{k}} + G_{\mathbf{k}}^*) + \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}\Delta_{\mathbf{k}}^*U_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}}\Delta_{\mathbf{k}}U_{\mathbf{k}}^*, \quad (14)$$

$$N_U = 1/2U_{\mathbf{k}}(\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}})^2 - \Delta_{\mathbf{k}}(\Delta_{\mathbf{k}}U_{\mathbf{k}}^* - \Delta_{\mathbf{k}}^*U_{\mathbf{k}}) - \epsilon_{\mathbf{k}}\Delta_{\mathbf{k}}G_{\mathbf{k}}^* + \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}\Delta_{\mathbf{k}}G_{\mathbf{k}}.$$

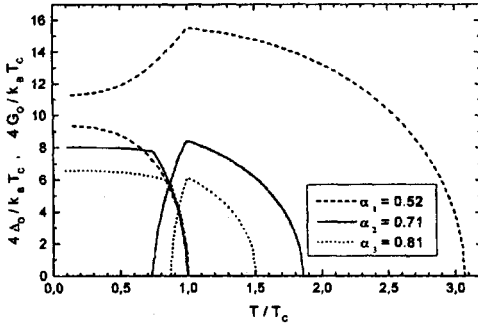


Рис.1. Рассчитанные зависимости амплитуд параметров порядка  $\Delta_0$  и  $G_0$  от температуры. Кривые, соответствующие параметру сверхпроводящей щели  $\Delta_0$ , начинаются с точки  $T/T_C = 1$ . Параметр относительного допирования  $\alpha$  определен в тексте

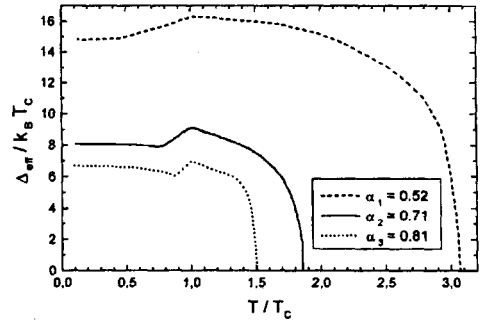


Рис.2. Предсказываемые примеры немонотонных температурных изменений эффективной щели  $\Delta_{eff}$  между пиками плотности состояний энергетического спектра

Система уравнений (11) – (13) решалась численно. Как и ожидалось, параметр,  $U_{\mathbf{k}}$  оказался пренебрежимо малым. Рассчитанная фазовая диаграмма зависимости критических температур для  $\Delta_0(T_C)$  и  $G_0(T^*)$  при  $\mathbf{Q} = (\frac{11}{12}\pi, \frac{11}{12}\pi)$  от  $\delta$  близка к соответствующим диаграммам, предлагаемым в экспериментальных работах (см., например, [11]). В качестве примера найденных температурных зависимостей амплитуд параметров порядка  $\Delta_0(T)$  и  $G_0(T)$  на рис.1 представлены три различных случая допирования:  $\alpha_1, \alpha_2$  и  $\alpha_3$ , где параметр  $\alpha$  определяется отношением  $\alpha(\delta) = (\delta - \delta_{min})/(\delta_{opt} - \delta_{min})$ . Здесь  $\delta_{min}$  – минимальное значение допирования, соответствующее появлению сверхпроводящего состояния. Во всех случаях при  $\delta < \delta_{opt} = 0.315$  (то есть существования ВЗП) температурная зависимость сверхпроводящего параметра порядка существенно отличается от случая БКШ. Отношение  $4\Delta_0/k_B T_C = 4.2$  при сильно передопированном режиме, при  $\delta_{opt}$  равно 4.5 и далее увеличивается, как видно из рис.1, и достигает значений порядка 10 при  $\delta > \delta_{min}$  (то есть в сильно недодопированной области). Такого рода тенденция в изменении  $4\Delta_0/k_B T_C$  отмечалась уже в ряде экспериментальных работ [12]. Рассчитанные температурные зависимости псевдощели  $G_0$  имеют немонотонное поведение по мере уменьшения температуры, что ранее не отмечалось. Это предсказание теории интересно было бы проверить экспериментально. Так, если в экспериментах по сканирующей туннельной спектроскопии (см., например, [12]) измерять эффективный параметр щели  $\Delta_{eff}(T)$ , определяемый как энергетический интервал между

пиками плотности состояний, то из-за немонотонного поведения  $G_0(T)$  в графике для  $\Delta_{eff}(T)$  должны наблюдаться аномалии: 1) в образцах типа  $\alpha_1$   $\Delta_{eff}(T)$  будет уменьшаться (!) при  $T \rightarrow 0$ ; 2) при  $\alpha \approx \alpha_3$  в графике  $\Delta_{eff}(T)$  должен наблюдаться локальный минимум. Примеры таких графиков, рассчитанных на основе выражений (9), (10) приведены на рис.2. Указанные аномалии, по нашему мнению, видны из экспериментальных данных [12,13]. Эти выводы, однако, требуют более детальной экспериментальной проверки на образцах с различными индексами допирования.

Данная работа выполнена при частичной поддержке Государственной научно-технологической программы "Сверхпроводимость" (проект # 98014).

- 
1. H.Ding, M.R.Norman, J.C.Campuzano et al., **B54**, R9678 (1996).
  2. J.M.Harris, Z.-X.Shen, P.J.White et al., *Phys. Rev.* **B54m** 15665 (1996); G.V.M.Williams, J.L.Tallon, E.M.Haines et al., *Phys. Rev. Lett.* **78**, 721 (1997).
  3. Ю.В.Копеев, в сб. *Проблема высокотемпературной сверхпроводимости*, под ред. В.Л.Гинзбурга и Д.А.Киржница, М.: Наука, 1977.
  4. C.A.Balseiro and L.M.Falicov, *Phys. Rev.* **B20**, 4457 (1979).
  5. С.В.Варламов, М.В.Еремин, И.М.Еремин, *Письма в ЖЭТФ* **66**, 533 (1997).
  6. М.В.Еремин, С.Г.Соловьянов, С.В.Варламов, *ЖЭТФ* **112**, 1763 (1997).
  7. Z.-X.Shen and D.S.Dessau, *Phys. Rep.* **253**, 1 (1995).
  8. I.Eremin, M.Eremin, S.Varlamov et al., *Phys. Rev.* **B56**, 11305 (1997).
  9. N.M.Plakida, R.Hayn, and J.L.Richard, *Phys. Rev.* **B51**, 16599 (1995).
  10. S.M.Hayden, G.Aeppli, T.G.Perring et al., *Phys. Rev.* **B54**, R6905 (1996).
  11. G.V.M.Williams, J.L.Tallon, and J.W.Loram, *Phys. Rev.* **B57**, 14702 (1998); G.V.M.Williams, J.L.Tallon, R.Michalak, and R.Dupree, *Phys. Rev.* **B54**, 1 (1996).
  12. Ch.Renner, B.Revaz, J.-Y.Genoud et al., *Phys. Rev. Lett.* **80**, 149 (1998); N.Miyakawa, P.Guptasarma, J.Zasadzinski et al., *Phys. Rev. Lett.* **80**, 157 (1998); Y.Sezaki, T.Ekino, and H.Fujii, in *Strongly Correlated Electron Systems, Abstracts*, July 15-18, 1998, Paris, France; T.Ekino, Y.Sezaki, and H.Fujii, *Physica B*, in press.
  13. A.G.Loesser, Z.-X.Shen, M.C.Schabel et al., *Phys. Rev.* **56**, 14185 (1997).