

0716662-1

КАЗАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

На правах рукописи

ЛАРИОНОВ Игорь Александрович

ЗАВИСИМОСТЬ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ ЩЕЛИ В ВТСП ОТ
ВОЛНОВОГО ВЕКТОРА, ТЕМПЕРАТУРЫ И ИНДЕКСА
ДОПИРОВАНИЯ

01.04.07 - физика твёрдого тела

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Казань - 2000

Работа выполнена на кафедре квантовой электроники и радиоспектроскопии Казанского государственного университета

Научный руководитель: доктор физико–математических наук,
профессор М.В. Ерёмин

Официальные оппоненты: доктор физико–математических наук,
профессор А.С. Москвин

НАУЧНАЯ БИБЛИОТЕКА
КФУ



0000947865

кандидат физико–математических наук,
доцент Р.Г. Дёминов

Ведущая организация: Физико–технический институт РАН,
(г. Санкт–Петербург)

Защита состоится " 6 " июля 2000 г. в 14³⁰ часов на заседании диссертационного совета Д 053.29.02 при Казанском государственном университете по адресу: 420008, г. Казань, ул. Кремлёвская, 18

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке Казанского государственного университета.

Автореферат разослан " 5 " июня 2000 г.

Учёный секретарь диссертационного
совета, профессор

М.В. Ерёмин

Общая характеристика работы.

Актуальность темы исследования. Выяснение причины зависимости сверхпроводящей щели от волнового вектора, температуры и индекса допирования в высокотемпературных сверхпроводниках (ВТСП) должно приблизить к объяснению явления высокотемпературной сверхпроводимости. Анализ экспериментальных данных (например, по ядерной релаксации [1] и теплоёмкости) привёл к выводу, что энергетическая щель в купратных ВТСП соединениях зависит от волнового вектора, что указывает на отличие купратных ВТСП от нормальных сверхпроводников, чьи характеристики прекрасно описываются теорией Бардина, Купера и Шриффера (БКШ). В теории БКШ энергетическая щель не зависит от волнового вектора, что определяется электрон-фононным механизмом сверхпроводимости. Факт зависимости энергетической щели от волнового вектора говорит о том, что электрон-фононное взаимодействие, возможно, не играет определяющей роли в образовании сверхпроводящего состояния в ВТСП купратах. Это обстоятельство и привело к поиску других механизмов явления ВТСП. Вид зависимости сверхпроводящей щели $\Delta(k)$ и псевдощели от волнового вектора очень активно обсуждается в литературе. Например, для детального выяснения этого явления проводились экспериментальные исследования методом фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением [2]. Другое отличие ВТСП купратов от классических сверхпроводников это нетривиальная зависимость сверхпроводящей щели от температуры и очень большое значение величины щели по отношению к температуре сверхпроводящего перехода T_c , увеличивающееся по мере уменьшения допирования и достигающее величин порядка 10, что существенно больше 3.52 в теории БКШ. Анализ экспериментальных данных привёл к выводу, что описание свойств сверхпроводящей и нормальной фаз ВТСП купратов должно быть согласованным. Для правильного описания эволюции свойств купратов при допировании необходимо знание трансформации электронного строения зон от недопированного к допированного режимам, а для корректного описания фазовой диаграммы необходим сценарий происхождения спиновой псевдощели.

Целью настоящей работы является построение микроскопической модели ВТСП с учётом сильных корреляций для объяснения экспериментальных данных по ядерной релаксации, рассеянию нейтронов, фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением и сканирующей туннельной спектроскопии.

Научная новизна работы заключается в следующем:

1. Найдены самосогласованные решения уравнения для щели с потенциалами короткодействующего типа при различных значениях уровня Ферми ϵ_F . Для ϵ_F вблизи дна (потолка) зоны решения соответствуют s типу симметрии щели, в то время как для ϵ_F в центре зоны решения относятся к d типу. Перемешивание решений d и s типов обусловлено ромбичностью кристалла. В случае тетрагональной симметрии решения s и d типов исключают друг друга.
2. Улучшено аналитическое выражение для ширины проводящей зоны как функции спин-спиновой корреляционной функции c_1 .
3. Рассчитана скорость спин-решёточной релаксации $1/T_1$ на ядрах меди выше температуры сверхпроводящего перехода в плоскостях кристаллов $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ и $YBa_2Cu_3O_{7-y}$ как функция температуры и концентрации носителей заряда. Скорость ядерной спин-решёточной релаксации $1/T_1$ оказывается пропорциональной корреляционной длине во второй степени.
4. Составлена и решена система самосогласованных интегральных уравнений для сверхпроводящей щели с учётом нестабильности нормальной фазы бислойных купратов по отношению к пайерлсовской нестабильности. Рассчитаны зависимости критических параметров от волнового вектора, температуры и индекса допирования. Найдено, что область совместного сосуществования сверхпроводимости и пайерлсовской нестабильности с энергетическими параметрами порядка d - типа сильно зависит от индекса допирования δ . Эффективный параметр энергетической щели Δ_{eff} , определяемый как интервал между пиками плотности состояний, имеет локальный минимум при $T < T_C$. Теория позволяет правильно предсказать появление особенностей в температурной зависимости эффективной щели и вид этих особенностей в зависимости от расположения образцов на фазовой диаграмме (T, δ) .

Практическая ценность работы. Построена микроскопическая модель ВТСП с учётом сильных корреляций для объяснения экспериментальных данных по ядерной релаксации на ядрах меди в плоскостях CuO_2 и антиферромагнитной корреляционной длины. Предсказанные нами особенности в температурной зависимости эффективной щели, полученные при учёте пайерлсовской нестабильности нормальной фазы, подтверждены экспериментально методом сканирующей туннельной спектроскопии.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались и обсуждались на семинарах кафедры квантовой электроники и радиоспектроскопии; 5 -th International Conference Materials & Mechanisms of Superconductivity, High-Temperature Superconductors M2S-HTSC-V February 28-March 4, 1997, Beijing, China; Seventh International Seminar on Ferroelastic Physics, ISFP7, June 25-27, 1997, Kazan, Russia; Молодежной научной школе "Актуальные проблемы магнитного резонанса и его приложений" 'Магнитный резонанс в ВТСП соединениях', Казань, 20-22 ноября 1997; International Symposium on Spin Waves, Saint Petersburg, Russia, May 19-22, 1998; May 16-19, 2000; International Conference on Strongly Correlated Electron Systems, SCES-98, July 15-18, 1998, Paris, France; International Colloquium on Magnetic Resonance in High-Tc Superconductors, Engelberg, Switzerland, January 17-21, 1999;

Публикации. По теме диссертации опубликовано 12 работ, в том числе 6 статей и 6 тезисов докладов.

Работа выполнена при частичной поддержке Российской научно-технологической программы "Сверхпроводимость" (проект 98014) и стипендии Президента Российской Федерации для стажировки за рубежом.

Структура работы. Диссертация состоит из введения, четырёх глав и заключения. Работа изложена на 103 страницах, включая 16 рисунков, 3 таблицы и список литературы из 109 наименований.

Основное содержание работы.

Во введении обоснована актуальность проблемы, сформулированы цель и задачи исследования.

Первая глава имеет обзорный характер. Кратко изложен формализм модели Хаббарда [3] для сильно коррелированных электронов. Представлена теория [4], где было показано, что выражение для дисперсии синглетно-коррелированной зоны, формирующейся за счёт эффективных перескоков имеет вид как в t_1 - t_2 - t_3 - J модели:

$$\epsilon_k = 2t_1(\cos k_x + \cos k_y) + 4t_2 \cos k_x \cos k_y + 2t_3(\cos 2k_x + \cos 2k_y), \quad (1)$$

где $t_1=70$, $t_2=0$, $t_3=5$ (в мэВ) имеют смысл эффективных интегралов перескока между 1, 2 и 3 - ми соседями. Таким образом, возможно использование формализма Хаббарда, однако при этом не существует, как в t - J модели, ограничения на соотношения между t и J . В конце главы приведены наиболее перспективные, с нашей точки зрения, подходы к

Таблица 1.

μ (эВ)	Δ_x	Δ_y
- 0.26	5.45	5.45
- 0.25	8.48	8.48
- 0.20	11.17	11.17
- 0.15	5.38	5.38
- 0.13	2.60	2.59
- 0.12	2.63	- 2.63
- 0.10	6.28	- 6.28
- 0.05	19.76	- 19.76
0	27.88	- 27.88
0.01	28.26	- 28.26
0.02	28.20	- 28.20
0.05	24.97	- 24.97
0.10	9.05	- 9.05
0.13	1.32	- 1.32
0.14	3.05	3.05
0.15	3.44	3.44
0.20	6.22	6.22
0.25	6.80	6.80
0.30	1.56	1.56

описанию ВТСП купратов.

Во второй главе проводится численный анализ уравнения БКШ, когда щель в спектре элементарных возбуждений (1) обусловлена короткодействующими потенциалами. В дополнение к результатам работы [5] мы исследовали поведение решения при малом допировании и нашли, что уравнение для щели

$$\Delta(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k}'} V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \Delta(\mathbf{k}') / 2E_{\mathbf{k}'}, \quad (2)$$

где $E_{\mathbf{k}'} = \sqrt{(\epsilon_{\mathbf{k}'} - \mu)^2 + \Delta^2(\mathbf{k}')}$, допускает решения s типа для потенциала вида

$$- 2 |V_1| [\cos q_x + \cos q_y], \quad (3)$$

который, как часто считается, может приводить лишь к щели d типа. Параметр $V_1 \approx 125$ мэВ имеет смысл потенциала взаимодействия первых соседей. Из (2) и (3) видно, что зависимость щели от волнового вектора в общем случае должна иметь вид:

$$\Delta(k) = \Delta_x \cos k_x + \Delta_y \cos k_y + \Delta'_x \sin k_x + \Delta'_y \sin k_y, \quad (4)$$

где Δ_x , Δ_y , Δ_x' , и Δ_y' - постоянные, которые определяются самосогласованно. Так же как и в [5] мы нашли, что в процессе самосогласования Δ_x' , Δ_y' , - амплитуды синусов оказываются ничтожно малыми. В таблице 1 приведены рассчитанные значения Δ_x , и Δ_y при разных значениях химического потенциала μ . Таким образом, при значениях химического потенциала μ (уровня Ферми ϵ_F) вблизи дна (потолка) зоны решения соответствуют s -типу симметрии, в то время как для ϵ_F в центре зоны решения относятся к d -типу. В случае тетрагональной симметрии решения s и d типов исключают друг друга. Перемешивание решений d и s типов обусловлено ромбичностью кристалла.

Проведён расчёт потенциала взаимодействия носителей тока через поле фононов изгибных мод A_{1g} и B_{1g}

$$V(\mathbf{k}'-\mathbf{k}) = 2B_0^2 \frac{1 + 0.5[\cos(k_x' - k_x) + \cos(k_y' - k_y)]}{(\epsilon_{\mathbf{k}'} - \epsilon_{\mathbf{k}})^2 - (\hbar\omega_B)^2} \hbar\omega_B, \quad (5)$$

где $B_0 = 35$ мэВ. Ввиду того, что различие между $\omega_{A_{1g}} = 440$ см⁻¹ и $\omega_{B_{1g}} = 340$ см⁻¹ не столь важно, они были положены равными $\omega_B = 400$ см⁻¹. Дан численный анализ уравнений для щели при различных значениях потенциалов спаривания. В частности, найдено, что наличие d - симметрии щели невозможно описать в предположении, что электрон-фононное взаимодействие является доминирующим в образовании сверхпроводящего состояния в ВТСП керамиках $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ и $Bi_2Sr_2CaCu_2O_8$. Выводы второй главы относительно симметрии щели в сверхпроводниках можно перенести и на симметрию щели (псевдощели) из-за пайерлсовской нестабильности нормальной фазы.

В третьей главе, с целью лучшего понимания нормальной фазы, в рамках t - J модели, представлена микроскопическая теория, позволяющая объяснить зависимости антиферромагнитной корреляционной длины и скорости спин-решёточной релаксации от температуры и индекса допирования во всём интервале температур $T > T_C$. Рассчитанные значения спин-спиновых корреляционных функций s_1 , спиновой жёсткости ρ_S и ширины проводящей зоны $W = 8 t_{eff}$ как функции допирования представлены в таблице 2.

Таблица 2. Рассчитанные величины спин-спиновых корреляционных функций c_1 , корреляционных длин при $T=0$ К, ξ_0 , спиновой жёсткости ρ_S , отношения $|c_1|/g_-$ и ширины проводящей зоны W как функции концентрации носителей заряда

	La _{2-x} Sr _x CuO ₄			YBa ₂ Cu ₃ O _{7-y}
	$x = 0.075$	$x = 0.1$	$x = 0.15$	$\delta/2 \approx 0.2$
c_1	-0.0884	-0.0780	-0.0577	-0.0375
ξ_0	14	9.5	6.5	6
$2\pi\rho_S/k_B$	307 К	245 К	96 К	-
$ c_1 /g_-$	0.025	0.024	0.021	0.016
W	1.43 t	1.85 t	2.70 t	3.53 t

Улучшено по сравнению с [6,7] аналитическое выражение для ширины проводящей зоны как функции спин-спиновой корреляционной функции c_1 :

$$t_{eff} = t \left(p + \frac{2c_1}{p} - \frac{p^2}{2p-1} I^2 + \frac{J}{2t} I \right), \quad (6)$$

где $p = (1+x)/2$ и $I \approx \frac{4}{\pi} \left(1 - e^{-\pi\tilde{\delta}} \right) - 2\tilde{\delta}$, $\tilde{\delta} = \frac{x}{1+x}$. Здесь следует отметить особо, что формула (6) отличается от приближения Хаббард I [3]. Таким образом, учёт корреляций перенормирует эффективные интегралы перескока: $t_1 \rightarrow t_{eff}$, а $t_2 \rightarrow p t_2$, $t_3 \rightarrow p t_3$. В отличие от предыдущих вариантов, найденная формула позволяет рассчитывать ширину зоны не только в оптимальном и передопированном, но и в сильно недоопированном режимах и имеет правильную асимптотику, необходимую для описания перехода диэлектрик – металл: ширина зоны приблизительно линейно увеличивается с допированием, что коррелирует с интуитивным представлением Ф.Андерсона об эволюции проводящей зоны [8], а при больших концентрациях ширина проводящей зоны приближается, как и следует при отсутствии корреляций, к величине $8 t$. Следует отметить, что результаты наших расчётов c_1 и W согласуются с результатами расчётов методами квантового Монте-Карло и точной диагонализации для t-J модели.

Для скорости спин-решёточной релаксации получено выражение

$$\frac{1}{T_1} = \frac{64x(A_1 - 4B)^2}{C(\xi)\hbar(1+x)} \left(\frac{2t_{eff}}{J\rho} - 1 \right) \frac{k_B T |c_1|}{J^2 g_-^2} \xi^2, \quad (7)$$

где $C(\xi) = 7/5 + 30 \cdot \exp(-3(1/2\xi)^{1/4})$. Мы используем $A_1 - 4B \approx 190$ кЭ/μВ и 140 кЭ/μВ для $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ и $YBa_2Cu_3O_{7-y}$ соответственно [9]. Таким образом, скорость ядерной спин-решёточной релаксации $1/T_1$ оказывается пропорциональной корреляционной длине во второй степени. Это означает, что антиферромагнитные корреляции между спинами меди оказывают сильное влияние на релаксацию даже в допированных образцах. Этот результат качественно подтверждает основную идею феноменологического описания свойств ВТСП соединений в нормальной фазе моделью NAFL [1]. Однако, следует подчеркнуть, что существенное отличие полученного результата (7) от модели NAFL - это вид зависимости $1/T_1$ от антиферромагнитной корреляционной длины. В феноменологической теории [1] $1/T_1$ была пропорциональна *первой* степени ξ , в нашей микроскопической теории $1/T_1$ пропорциональна *второй* степени ξ . Мы нашли также, что влияние подсистемы дырок на $1/T_1$ не является пренебрежимо малым. Как будет показано ниже, ξ сильно уменьшается с допированием, что приводит к уменьшению скорости релаксации на ядрах меди.

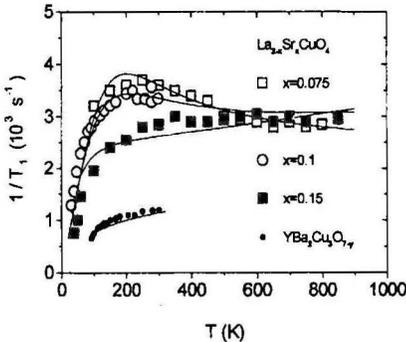


Рис. 1. Рассчитанные зависимости скорости спин-решёточной релаксации на ядрах меди (сплошные линии) и экспериментальные данные для $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ и $YBa_2Cu_3O_{7-y}$ (из работ [12,13]).

Как уже обсуждалось, в применяемой нами теории [10] существует один недостаток - это расходимость корреляционной длины ξ при $T=0$ даже в допированных соединениях, что не соответствует экспериментальным данным. Измерения методом рассеяния нейтронов в слабо допированных образцах $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ показали, что ξ насыщается при низких T [11]. Для описания

поведения корреляционной длины также при низких температурах мы предполагаем, что её эффективное значение в единицах постоянной решётки может быть определено посредством формулы

$$1/\xi_{eff} = 1/\xi_0 + 1/\xi \quad (8)$$

Таким образом, в нашем подходе ξ_0 - единственный варьируемый параметр, и его значение определяется из сравнения теории с экспериментальными данными (рис. 1). Для проверки формулы (8) мы сравнили измеренную и рассчитанную скорость спин-решёточной релаксации $1/T_1$, где

корреляционная длина при $T=0$, ξ_0 , была единственным свободным параметром, определяемым методом наименьших квадратов (Рис. 1), и затем сравнили (Рис. 2) полученную ξ_{eff} с данными для образцов $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ из экспериментов по рассеянию нейтронов и антиферромагнитную корреляционную длину в $YBa_2Cu_3O_{7-y}$, определённую из измерений скорости спин-спиновой релаксации на ядрах меди. Сравнение расчётов с экспериментом показывает хорошее согласие экспериментальной и теоретической кривых, что позволяет сделать вывод о правильности формулы (8). Полученные таким образом значения ξ_0 представлены в таблице 2. Интересно отметить, что величина ξ_0 приближённо следует соотношению $\xi_0 \sim x^{-1}$, что уже отмечалось в экспериментальной работе [14]. Таким образом, мы заменяем ξ на ξ_{eff} .

Влияние корреляционной длины на релаксацию продемонстрировано на рис. 1: скорость спин-решёточной релаксации в образцах $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ с концентрацией $x=0.075$ и 0.1 уменьшается при увеличении температуры при высоких температурах. Такое же поведение наблюдается также и в чистом Гейзенберговском антиферромагнетике, где такое поведение ассоциируется со специфической температурной зависимостью антиферромагнитной

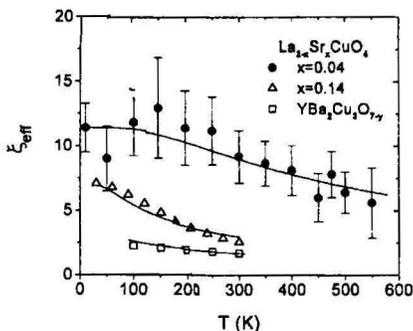


Рис. 2. Рассчитанные зависимости антиферромагнитной корреляционной длины ξ_{eff} (сплошные линии) и их сравнение с экспериментальными данными для кристаллов $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ ($x=0.04$ - залитые кружки [11], $x=0.14$ - треугольники [15]) и $YBa_2Cu_3O_{7-y}$ ($\delta \approx 0.4$ - квадраты, из работы [16]).

корреляционной длины, а именно: $\xi^{HA} \sim \exp(2\pi\rho_S / k_B T)$. Однако, в допированных соединениях, ξ^{HA} модифицируется

$$\xi^{HA} \sim \frac{J p \sqrt{g_-}}{\sqrt{T(2t_{eff} - Jp)} x} \exp\left(\frac{2\pi\rho_S}{k_B T}\right), \quad (9)$$

где спиновая жёсткость ρ_S сама по себе зависит от индекса допирования. Найденные значения спиновой жёсткости представлены в таблице 2. Следует отметить, что для оптимально допированного $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ ($x=0.15$), как видно из таблицы, спиновая жёсткость невелика, а в $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-y}$ пренебрежимо мала. Таким образом для $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ ($x=0.15$) и $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-y}$ фактор $T\xi_{eff}^2 / C(\xi_{eff})$ в формуле (8) увеличивается, определяя, таким образом, увеличение скорости спин-решёточной релаксации на ядрах меди при увеличении температуры, что и наблюдается экспериментально.

Для температурной зависимости $1/T_1$ нами предсказываются два режима, каждый из которых определяется температурной зависимостью антиферромагнитной корреляционной длины ξ_{eff} (см. рис. 1,2). При низких температурах, когда $\xi_0 \ll \xi$ и, следовательно, $\xi_{eff} \approx \xi_0$, $1/T_1$ имеет поведение, описываемое законом Корринги (Корринговская релаксация). При высоких температурах, $\xi_0 \gg \xi$, и $\xi_{eff} \approx \xi$. Таким образом, $1/T_1$ насыщается при высоких температурах:

$$\frac{1}{T_1^{sat}} \sim \frac{(A_1 - 4B)^2 |c_1|}{\hbar J g_-} - O(T\xi^3 / \xi_0). \quad (10)$$

Эти результаты согласуются с экспериментом (Рис. 1). Зависимость $1/T_1^{sat}$ от допирования определяется, в основном, отношением $|c_1|/g_-$. Рассчитанные численные значения этого отношения представлены в таблице 2. Как видно из таблицы, для кристалла $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (при $x=0.075, 0.1$ и 0.15) это отношение слабо зависит от концентрации носителей заряда. Таким образом, $1/T_1^{sat}$ почти не зависит от температуры, что и наблюдается экспериментально. В кристалле $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-y}$, $|c_1|/g_-$ существенно меньше, чем в $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, главным образом из-за того, что с увеличением

допирования спин-спиновая корреляционная функция c_1 быстро уменьшается в передопированных образцах.

В четвёртой главе анализируются эффекты связанные с образованием пайерлсовской нестабильности. Проблема существования и усиления сверхпроводимости в условиях пайерлсовской нестабильности в обычных сверхпроводниках обсуждалась накануне открытия ВТСП [17]. Отклик системы на внешнее возмущение зависит от формы поверхности Ферми. Функция отклика Линдхарда (ФОЛ)

$$\chi(\vec{q}) = \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^d} \cdot \frac{f_k - f_{k+q}}{\varepsilon_k - \varepsilon_{k+q}} \quad (11)$$

расходится при $q = 2k_F$ для одномерного свободного электронного газа [18]. Это говорит о том, что одномерный электронный газ нестабилен по отношению к состоянию с периодической модуляцией электронной зарядовой или спиновой плотности, называемыми волнами зарядовой или спиновой плотности. Для двумерного свободного электронного газа ФОЛ не имеет ярко выраженного максимума, однако в случае ВТСП спектр элементарных возбуждений, записанный через интегралы перескока между первыми (t_1), вторыми (t_2) и третьими (t_3) соседями (1) приводит к функции отклика Линдхарда, имеющей максимум при $Q=(\pi,\pi)$ при оптимальном допировании и около $Q=(\pi,\pi)$ в сильно недодопированном режиме (Рис. 3).

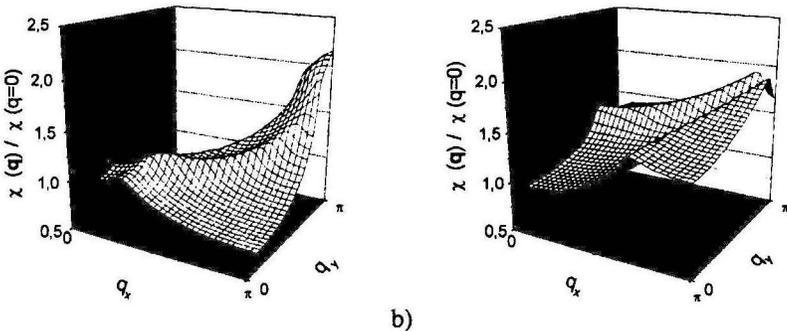


Рис. 3. Рассчитанная функция отклика Линдхарда для двумерного электронного газа с законом дисперсии (1) при оптимальном допировании а) и в сильно недодопированном режиме б) при $T \rightarrow 0$ как функция волнового вектора q .

Путем численного решения интегральных уравнений мы показываем, что при наличии сильных короткодействующих потенциалов (прежде всего это суперобмен) [19], и, как следствие, d- симметрии энергетических параметров порядка: $\Delta_k = \Delta_0(\cos k_x - \cos k_y)$ - сверхпроводимости, и пайерлсовской неустойчивости: $G_k = iG_0(\cos k_x - \cos k_y)$, соревнование пайерлсовской неустойчивости и сверхпроводимости приводит к нетривиальной, с точки зрения "классической" теории сверхпроводимости, зависимости эффективной щели от температуры. Позднее выяснилось, что наши расчёты правильно предсказали появление особенностей в температурной зависимости эффективной щели. Эти особенности были найдены методом сканирующей туннельной спектроскопии [20,21].

Как уже упоминалось в [22], волны зарядовой плотности, являющиеся частным случаем пайерлсовской неустойчивости, подавляют сверхпроводимость. Мы нашли, что температурный интервал существования сверхпроводимости существенно зависит от соотношения между константами суперобмена и кулоновского отталкивания. В качестве примера найденных

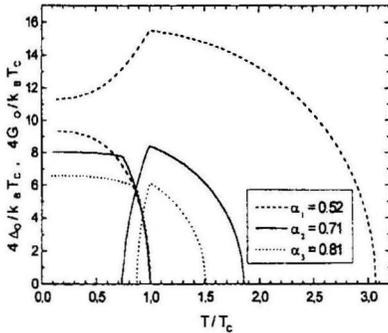


Рис. 4. Рассчитанные зависимости амплитуд параметров порядка Δ_0 и G_0 от температуры. Кривые, соответствующие параметру сверхпроводящей щели Δ_0 , начинаются с точки $T/T_c=1$. Параметр относительного допирования α определён в тексте.

температурных зависимостей амплитуд параметров порядка $\Delta_0(T)$ и $G_0(T)$ на рисунке 4 представлены три различных случая допирования: α_1 , α_2 и α_3 . Рассчитанная фазовая диаграмма зависимости критических температур для $\Delta_0(T_c)$ и $G_0(T^*)$ при $Q=(\frac{11}{12}\pi, \frac{11}{12}\pi)$ от δ близка к соответствующим диаграммам, предлагаемым в экспериментальных работах. Параметр относительного допирования α определяется отношением $\alpha(\delta) = (\delta - \delta_{\min}) / (\delta_{opt} - \delta_{\min})$. Здесь δ_{\min} - минимальное значение

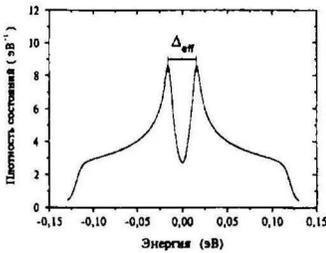


Рис. 5. Рассчитанная плотность состояний при сосуществовании сверхпроводящей и псевдощели. Эффективный параметр щели $\Delta_{\text{eff}}(T)$ определяется как энергетический интервал между пиками плотности состояний.

пированной области). Такого рода тенденция в изменении $4 \Delta_0/k_B T_C$ отмечалась уже в ряде экспериментальных работ. Рассчитанные температурные зависимости псевдощели G_0 имеют немонотонное поведение по мере уменьшения температуры, что ранее не отмечалось. Так, если в экспериментах по сканирующей туннельной спектроскопии (см. например [20,21]) измерять эффективный параметр щели $\Delta_{\text{eff}}(T)$, определяемый как энергетический интервал между пиками плотности состояний (см. Рис. 5), то из-за немонотонного поведения $G_0(T)$ в графике для $\Delta_{\text{eff}}(T)$ должны наблюдаться аномалии. 1) В образцах типа α_1 , $\Delta_{\text{eff}}(T)$ будет уменьшаться (!) при $T \rightarrow 0$. 2) При $\alpha \approx \alpha_3$ в графике $\Delta_{\text{eff}}(T)$ должен наблюдаться локальный минимум. Примеры таких графиков приведены на рисунке 6.

Указанные аномалии можно

допирования, соответствующее появлению сверхпроводящего состояния. Во всех случаях, когда $\delta < \delta_{\text{opt}}$ (т.е. существования пайерлсовской неустойчивости) температурная зависимость сверхпроводящего параметра порядка существенно отличается от случая БКШ. Рассчитанное значение $4 \Delta_0/k_B T_C = 4.2$ при сильно передопированном режиме, при δ_{opt} равно 4.5 и далее увеличивается, как видно из рис. 4, и достигает значений порядка 10 при $\delta \geq \delta_{\text{min}}$ (т.е. в сильно недодо-

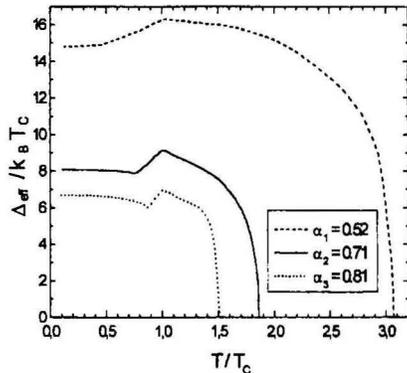


Рис.6. Предсказываемые примеры немонотонных температурных изменений эффективной щели Δ_{eff} между пиками плотности состояний энергетического спектра.

определить экспериментально, (см., например [20,21]). Следует отметить, что локальный минимум в Δ_{eff} в экспериментальной работе [20] имеет место в недодопированных образцах с относительно высокой критической температурой T_C . Этот факт позволяет сделать вывод о том, что исследуемые образцы располагаются на фазовой диаграмме в слабонедодопированной фазе, т.е. являются образцами, эффективная щель в которых в нашей теории описывается индексами относительного допирования $\alpha \approx \alpha_3$ и (или) $\alpha \approx \alpha_2$.

Другой тип нетривиального температурного поведения эффективной щели (уменьшение Δ_{eff} при уменьшении температуры) в нашей теории описывается индексом относительного допирования $\alpha \approx \alpha_1$ и был недавно замечен в работе [21]. Для идентификации положения исследованного [21] образца $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ на фазовой диаграмме (T, δ) можно также воспользоваться информацией о T_C . Образец со средней критической температурой $T_C \sim 50$ К, по величине допирования должен находиться приблизительно посередине между δ_{min} и δ_{opt} , т.е. в терминологии нашей теории с $\alpha \approx 0.5$. Следует отметить также, что учёт небольшого вклада от электрон-фононного взаимодействия позволяет объяснить слабый изотопический эффект в ВТСП соединениях $\alpha_{T_C} \sim 0.05$, согласующийся с экспериментальными данными.

Таким образом, наши расчёты позволяют правильно предсказать появление особенностей в температурной зависимости эффективной щели и вид этих особенностей в зависимости от расположения образцов на фазовой диаграмме (T, δ) . Теория имеет возможность корректного предсказания и описания вышеописанных особенностей в предположении о пайерлсовской неустойчивости нормальной фазы недодопированных купратов $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$, $YBa_2Cu_3O_{6+\delta}$, $La_{2-x}Sr_xCaCu_2O_6$ и, возможно, $La_{2-x}Sr_xCuO_4$. Эти выводы, однако, требуют более детальной экспериментальной проверки на образцах с различными индексами допирования.

В заключении сформулированы основные положения, выносимые на защиту

- 1) Найдены самосогласованные решения уравнения БКШ для щели с потенциалами короткодействующего типа при различных значениях

уровня Ферми ϵ_F . Для ϵ_F вблизи дна (потолка) зоны решения соответствуют s типу симметрии щели, в то время как для ϵ_F в центре зоны решения относятся к d типу. Перемешивание решений d и s типов обусловлено ромбичностью кристалла. В случае тетрагональной симметрии решения s и d типов исключают друг друга. Доминирующим механизмом ВТСП, по нашему мнению, является суперобмен, однако вклад фоновый потенциал спаривания не является пренебрежимо малым, что объясняет наблюдаемый слабый изотопический эффект. В качестве вклада в короткодействующий потенциал рассмотрено взаимодействие носителей тока через оптические колебания: изгибные моды атомов кислорода в плоскостях CuO_2 .

- 2) Улучшено аналитическое выражение для ширины проводящей зоны как функции спин-спиновой корреляционной функции c_1 . Результаты расчётов хорошо согласуются с имеющимися данными и дают правильные значения параметров, таких как спин-спиновая корреляционная функция c_1 , антиферромагнитная корреляционная длина ξ , ширина проводящей зоны W и их зависимость от концентрации носителей заряда.
- 3) Рассчитана скорость спин-решёточной релаксации $1/T_1$ на ядрах меди выше температуры сверхпроводящего перехода в плоскостях кристаллов $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ и $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-y}$ как функция температуры и концентрации носителей заряда. Скорость ядерной спин-решёточной релаксации $1/T_1$ оказывается пропорциональной корреляционной длине во второй степени. Показано, что антиферромагнитные корреляции между спинами меди оказывают сильное влияние на релаксацию даже в допированных образцах. Этот результат качественно подтверждает основную идею феноменологического описания свойств ВТСП соединений в нормальной фазе моделью NAFL. Существенное отличие полученного результата от модели NAFL - это вид зависимости $1/T_1$ от антиферромагнитной корреляционной длины. В феноменологической теории, NAFL, $1/T_1$ пропорциональна *первой* степени ξ , в нашей микроскопической теории $1/T_1$ пропорциональна *второй* степени ξ .

- 4) Составлена и решена система самосогласованных интегральных уравнений для сверхпроводящей щели с учётом нестабильности нормальной фазы бислойных купратов по отношению к пайерлсовской нестабильности. Рассчитаны зависимости критических параметров от волнового вектора, температуры и индекса допирования. Найдено, что область совместного сосуществования сверхпроводимости и пайерлсовской нестабильности с энергетическими параметрами порядка d - типа сильно зависит от индекса допирования. Рассчитанное значение $2\Delta_{\max}/k_B T_C = 4.2$ при сильно передопированном режиме, при оптимальном допировании равно 4.5, далее увеличивается и достигает значений порядка 10 в сильно недоопированной области. Эффективный параметр энергетической щели Δ_{eff} , определяемый как интервал между пиками плотности состояний, имеет локальный минимум при $T < T_C$ в недоопированных образцах с относительно высокой критической температурой T_C т.е. в образце располагающемся на фазовой диаграмме в слабо недоопированной фазе. Другой тип нетривиального температурного поведения эффективной щели (уменьшение Δ_{eff} при уменьшении температуры) должен находиться в сильно недоопированной фазе. Теория позволяет правильно предсказать появление особенностей в температурной зависимости эффективной щели и вид этих особенностей в зависимости от расположения образцов на фазовой диаграмме (T, δ) .

Публикации по теме диссертации

1. М.В. Ерёмин и И.А. Ларионов, "Дисперсия энергетической щели в слоистых купратах. Модель монослоя.", // Письма в ЖЭТФ, том 62, вып. 3, стр. 192-196, 10 августа 1995 г.
2. M.V. Eremin and I.A. Larionov, "Energy gap dispersion in bilayered cuprates", // Physica C (Amsterdam), vols. 282-287, pp. 1659-1660, (1997)
3. И.А. Ларионов и М.В. Ерёмин, "Влияние оптических мод на потенциал спаривания в бислойных купратах", // Известия Российской Академии Наук, серия физическая, т. 62, с.1518-1521, (1998).

4. М.В. Еремин и И.А. Ларионов, "Особенности d- спаривания в бислойных купратах при пайерлсовской нестабильности нормальной фазы", // Письма в ЖЭТФ, том 68, вып. 7, стр. 583–587, 10 октября 1998 г.
5. M.V. Eremin, I.A. Larionov and S.V. Varlamov, "CDW scenario for pseudogap in normal state of bilayer cuprates", // Physica B (Amsterdam), vols. 259–261, pp. 456–457, (1999)
6. A. Yu. Zavidonov, I. A. Larionov, and D. Brinkmann, "Theory of the plane copper nuclear spin-lattice relaxation in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ and $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-y}$ ", // Phys. Rev. B, v. 61, pp.15462-15463 (2000)
7. M. V. Eremin and I. A. Larionov, «Energy gap dispersion in Bi-layered Cuprates», 5 -th International Conference Materials & Mechanisms of Superconductivity, High-Temperature Superconductors M2S-HTSC-V February 28-March 4, 1997, Beijing, China
8. I. A. Larionov and M. V. Eremin, «In-plane oxygen vibrations contribution to the pairing potential», Seventh International Seminar on Ferroelastic Physics, ISFP7, June 25-27, 1997, Kazan, Russia
9. I. Larionov, «On the Superconducting Gap versus Doping Level Dependence in Layered Cuprates. An application of the Hubbard Model», International Symposium on Spin Waves, Saint Petersburg, Russia, May 19-22, 1998
10. M. Eremin, S. Varlamov, and I. Larionov, «CDW scenario for pseudogap in normal state of bilayer cuprates», The International Conference on Strongly Correlated Electron Systems, SCES-98, July 15-18, 1998, Paris, France
11. I. A. Larionov and M. V. Eremin, «Some Features of Coexistence of Superconductivity and CDW in Bilayered Cuprates», International Colloquium on Magnetic Resonance in High-Tc Superconductors, Engelberg, Switzerland, January 17-21, 1999
12. I. A. Larionov, A. Yu. Zavidonov, and D. Brinkmann, "Plane copper nuclear spin-lattice relaxation in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ and $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-y}$ in the framework of t-J model", International Symposium on Spin Waves, Saint Petersburg, Russia, May 16-19, 2000

Список цитируемой литературы

1. A. Millis, H. Monien, and D. Pines, "Phenomenological model of nuclear relaxation in the normal state of $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ ", // Phys. Rev. B, v. **42**, pp. 167-178, (1990).
2. H. Ding, M.R. Norman, J.C. Campuzano, M. Randeria, A.F. Bellman, T. Yokoya, T. Takahashi, T. Mochiku, K.Kadowaki, "Angle-resolved photoemission spectroscopy study of the superconducting gap anisotropy in $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$ ", Phys. Rev. B, v. **54**, pp. R9678-9681, (1996).
3. J. Hubbard, "Electron correlations in narrow energy bands", // Proc. Roy. Soc. London, Ser. A, v. **276**, pp. 238-245, (1963).
4. М.В. Ерёмин, С.Г. Соловьянов, С.В. Варламов, "К теории электронного строения и спиновой восприимчивости $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ ", ЖЭТФ, т. **112**, с. 1763-1777, (1997)
5. R.Fehrenbacher and M.R.Norman, "Phenomenological BCS theory of the high-Tc cuprates", Phys. Rev. Lett., v. **74**, pp. 3884-3887, (1995).
6. N.M.Plakida, R.Hayn and J.-L.Richard, "Two-band singlet-hole model for the copper-oxide plane", Phys. Rev. B, v.**51**, №23, pp. 16599-16607, (1995).
7. I. Eremin, M. Eremin, S. Varlamov, D. Brinkmann, M. Mali, and J. Roos, "Spin susceptibility and pseudogap in $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$: An approach via a charge-density-wave instability", // Phys. Rev. B, v. **56**, pp. 11305-11311, (1997).
8. G. Baskaran, Z. Zou, P.W. Anderson, "The resonating valence bond state and high-T_C superconductivity - a mean field theory", Solid State Comm., v. **63**, pp. 973-976, (1987)
9. Y. Zha, V. Barzykin, and D. Pines, "NMR and neutron-scattering experiments on the cuprate superconductors: A critical re-examination", // Phys. Rev. B, v. **54**, pp. 7561-7574, (1996).
10. A. Yu. Zavidonov and D. Brinkmann, "Evolution of antiferromagnetic short-range order with doping in high-Tc superconductors", // Phys. Rev. B, v. **58**, pp. 12486-12494, (1998).
11. B. Keimer, N. Belk, R.J. Birgeneau, A. Cassanho, C.Y. Chen, M. Greven, M.A. Kastner, A. Aharony, Y. Endoh, R. W. Erwin, and G. Shirane, "Magnetic excitations in pure, lightly doped, and weakly metallic La_2CuO_4 ", // Phys. Rev. B, v. **46**, pp. 14034-14053 (1992).
12. T. Imai, C. P. Slichter, K. Yoshimura, and K. Kosuge, "Low frequency spin dynamics in undoped and Sr-doped La_2CuO_4 ", // Phys. Rev. Lett., **70**, pp. 1002-1005, (1993).

13. S. Ohsugi, Y. Kitaoka, K. Ishida, G.-q. Zheng, and K. Asayama, "Cu NMR and NQR Studies of High-Tc Superconductor $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ ", // J. Phys. Soc. Jpn., **63**, pp. 700-715, (1994).
14. K. Yamada, C.H. Lee, K. Kurahashi, J. Wada, S. Wakimoto, S. Ueki, H. Kimura, Y. Endoh, S. Hosoya, G. Shirane, R.J. Birgeneau, M. Greven, M.A. Kastner, Y.J. Kim, "Doping dependence of the spatially modulated dynamical spin correlations and the superconducting-transition temperature in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ ", // Phys. Rev. **B 57**, pp. 6165-6175, (1998).
15. G. Aeppli, T.E. Mason, S.M. Hayden, H.A. Mook, and J. Kulda, "Nearly singular magnetic fluctuations in the normal state of a high-T-c cuprate superconductor", // Science, v. **278**, pp. 1432-1435, (1997).
16. T. Imai and C. P. Slichter, "Measurement of the q-Dependent Static Spin Susceptibility $\chi'(q)$ in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.9}$ ", Phys. Rev. **B**, v.**47**, pp.9158-9161, (1993).
17. Ю.В. Копаев в сб. "Проблема высокотемпературной сверхпроводимости", под ред. В.Л. Гинзбурга и Д.А. Киржница, 1977, Москва, Наука
18. George Grüner, *Density Waves in Solids* (Addison-Wesley, Reading, 1994)
19. С.В. Варламов, М.В. Ерёмин и И.М. Ерёмин, "К теории псевдощели в спектре элементарных возбуждений нормальной фазы бислойных купратов", // Письма в ЖЭТФ, т. **66**, с. 533-538, (1997).
20. T. Ekino, Y. Sezaki, and H. Fujii, "Features of the energy gap above Tc in $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ as seen by break-junction tunneling", // Phys. Rev. **B**, v. **60**, pp. 6916-6922, (1999).
21. A. Mourachkine, "The Origin of the Pseudogap from Tunneling Spectroscopy Measurements on $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$ Single Crystals", // Cond-mat / 9810161, 15 Oct 1998.
22. C.A. Balseiro, and L.M. Falicov, "Superconductivity and charge-density waves", // Phys. Rev. **B**, v. **20**, pp. 4457-4464, (1979).

