

У-313

393w7

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

17-95-416

На правах рукописи  
УДК 538.945

УДОВЕНКО  
Виктор Степанович

КВАЗИЧАСТИЦЫ И СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ  
В МОДЕЛЯХ С СИЛЬНОЙ КОРРЕЛЯЦИЕЙ

Специальность: 01.04.02 — теоретическая физика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Дубна 1995

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова Объединенного института ядерных исследований

**Научный руководитель:**

доктор физико-математических наук  
профессор

Н.М. Плакида

**Официальные оппоненты:**

член-корреспондент РАН  
доктор физико-математических наук  
профессор

Ю.А. Изюмов  
(ИФМ, г.Екатеринбург)  
А.Ф. Барабанов  
(ИФВД, г.Троицк)

доктор физико-математических наук

**Ведущая организация:**

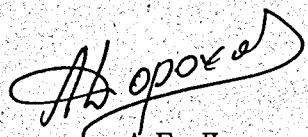
Российский Научный Центр "Курчатовский институт", г. Москва.

Защита диссертации состоится " \_\_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 1995 года на заседании Специализированного совета К047.01.01 Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований, г. Дубна Московской области.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Объединенного института ядерных исследований.

Автореферат разослан " \_\_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 1995 года.

Ученый секретарь  
Специализированного совета  
доктор физико-математических наук

  
А.Е. Дорохов

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

### Актуальность проблемы

Исследование высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП), открытых Дж. Беднорцем и К. Мюллером в 1986 г., продолжает оставаться одной из самых динамичных областей в физике твердого тела. Прежде всего это связано с рядом необычных свойств ВТСП, созданных на базе широкого класса медно-оксидных соединений. К таким свойствам ВТСП относятся их кристаллохимическое строение – слоистая структура, близость к переходу металл – диэлектрик, антиферромагнитное упорядочение с высокой температурой Нееля, высокая температура сверхпроводящего перехода, сильная анизотропия, малая длина когерентности. Медно-оксидные сверхпроводники характеризует ряд аномальных свойств в нормальной фазе: линейная зависимость проводимости от температуры, зависимость коэффициента Холла от температуры, необычная температурная зависимость ЯМР и др. Такое разнообразие физических свойств и их аномальность затрудняет разработку микроскопической теории ВТСП.

С теоретической точки зрения, наиболее важным представляется вопрос о механизме высокотемпературной сверхпроводимости: является ли он стандартным, типа БКШ, или нужны новые подходы и представления. И здесь может быть необычайное разнообразие, от стандартных электрон-фононных механизмов до нефононных механизмов, в пределе сильных и слабых корреляций, через спиновые и зарядовые возбуждения и т.д. Чтобы понять механизм ВТСП, необходимо изучить природу нормального и сверхпроводящего состояний, в частности, ответить на вопрос о типе носителей, принимающих участие в спаривании, и о взаимодействии, с помощью которого оно происходит.

Было предложено более ста различных моделей ВТСП. Большинство из них предполагает, что, несмотря на все многообразие кристаллических структур, основную роль в ВТСП играют медно-оксидные плоскости  $\text{CuO}_2$  – общий элемент этих соединений. Сейчас экспери-

Научно-техническая  
библиотека  
ОИЯИ

ментально установлено, что способностью проводить ток ВТСП обязаны движению дырок именно в этих плоскостях. Экспериментальные исследования указывают на сильную гибридизацию медных и кислородных орбиталей, а также на наличие сильного кулоновского отталкивания на узлах меди с энергией  $U$ , которая больше или порядка ширины зоны проводимости  $W$ . Системы, у которых  $U \geq W$ , являются системами с сильными электронными корреляциями. О наличии сильных корреляций в ВТСП говорят такие их свойства, как близость к антиферромагнитному переходу и переходу металл – диэлектрик, наличие локализованных магнитных моментов на меди. Сильные корреляции затрудняют или делают невозможным использование обычных зонных методов расчета электронной структуры ВТСП.

В связи с этим возникает необходимость исследования простых микроскопических моделей, которые учитывали бы наличие электронных корреляций. К таким моделям относятся многозонная  $p-d$  модель, стандартная модель Хаббарда и полученная на основе их  $t-J$  модель, в пределе сильных электронных корреляций. Однако аналитические исследования этих моделей представляют определенные трудности, в связи с чем в последние годы был развит ряд численных методов (квантовый метод Монте-Карло, метод точной диагонализации Ланкшоша), которые позволяют получать строгие решения для конечных систем. Численные методы дают возможность оценить правильность используемых в аналитических подходах приближений, а также помогают в выборе направлений дальнейших исследований. В целом, открытие ВТСП дало теоретикам огромный стимул в изучении сильно коррелированных систем.

Настоящая диссертация также посвящена этой актуальной теме – изучению влияния сильных электронных корреляций на свойства высокотемпературных сверхпроводников.

## Цель диссертации

Целью диссертационной работы являлось последовательное рассмотрение влияния сильных корреляций на электронный спектр и сверхпроводящее спаривание носителей заряда в рамках ангармонической и спин-поляронной моделей медно-оксидных сверхпроводников.

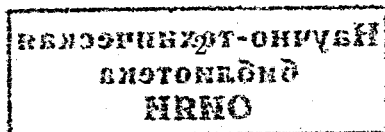
## Научная новизна

Исследовано сверхпроводящее спаривание в однозонной модели Хаббарда с сильно ангармоническим электрон-фононным взаимодействием. Показано, что учет сильных корреляций приводит к сужению зоны и к соответствующему увеличению  $T_c$ .

В рамках спин-поляронной модели в самосогласованном борновском приближении получена система уравнений Элиашберга для описания движения дырки на антиферромагнитном фоне. Показано, что квазичастичное описание для указанной модели сохраняется при умеренной концентрации дырок и высоких температурах. Обнаружена сильная перенормировка квазичастичного спектра дырок за счет спиновых флуктуаций. Впервые получено  $d$ -волновое спаривание спин-поляронов в модели с сильной корреляцией и вычислена зависимость температуры сверхпроводящего перехода от концентрации носителей, согласующаяся с экспериментом.

## Научная и практическая значимость работы

Научная ценность представляемой диссертационной работы обусловлена разработкой микроскопической теории спаривания квазичастиц в спин-поляронной модели, объясняющей механизм ВТСП в классе медно-оксидных соединений. Полученное необычное поведение  $d$ -волновой функции щели (резкая зависимость от частоты и большое затухание вблизи поверхности Ферми) позволяет объяснить некоторые аномальные свойства купратов, наблюдавшиеся в экспериментах по туннелиро-



ванию ( $v$ -образная форма щели и большая мнимая часть), инфракрасному поглощению (бесщелевая сверхпроводимость), измерению фотоэмиссионных спектров с угловым разрешением.

### Основные положения, выносимые на защиту

- электронные корреляции в ангармонической модели сверхпроводника приводят к сужению зоны проводимости и повышению  $T_c$
- симметрия параметра порядка в электрон-фононном механизме спаривания с сильным ангармоническим взаимодействием существенно зависит от типа (локальное – нелокальное) взаимодействия
- в спин-поляронной модели сверхпроводника квазичастицы являются устойчивыми образованиями при умеренных концентрациях носителей заряда и высоких температурах, но функция их распределения в импульсном пространстве  $N(k)$  существенно зависит от температуры
- учет взаимного влияния дырок и спиновых флуктуаций приводит к сильной перенормировке квазичастичного дырочного спектра, а также к разрушению дальнего антиферромагнитного порядка при некоторой критической концентрации дырок  $n_c \sim 0.1$
- сверхпроводящее спаривание спин-поляронов в модели с сильной электронной корреляцией представляет собой механизм высокотемпературной сверхпроводимости

### Апробация работы

Материалы, представленные в диссертации, докладывались на следующих конференциях и семинарах: Международная конференция "Полярны и биполярны в высокотемпературных сверхпроводниках и род-

ственных материалах", Кембридж, Великобритания, 7–9 апреля, 1994г.; конференции Немецкого физического общества, Берлин, Германия, 20–24 марта, 1995г.; Международный семинар по сильно коррелированным системам, Международный центр теоретической физики, Триест, 3 – 21 июля, 1995; научные семинары в Лаборатории теоретической физики им. Боголюбова, ОИЯИ, института Макса-Планка (Штуттгарт, Германия), Лейпцигского университета (Германия).

Основные результаты диссертации опубликованы в работах [1 - 5].

### Объем и структура диссертации

Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, приложения, заключения и списка цитируемой литературы. Общий объем диссертации – 98 страниц машинописного текста, в том числе 28 рисунков и 2 таблицы.

## ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении обсуждаются основные отличительные свойства высокотемпературных сверхпроводников, отмечаются наиболее важные вопросы теории ВТСП, дается краткое содержание и формулируется основная цель диссертации.

Первая глава посвящена описанию возможных механизмов и моделей ВТСП, обсуждению влияния сильных корреляций на свойства сверхпроводника и роли спиновых флуктуаций. Глава состоит из трех разделов.

В разделе 1.1 дается краткое описание и приводится общая схема существующих моделей ВТСП. Рассматриваются наиболее изученные модельные гамильтонианы, среди них многозонный гамильтониан Эмери и однозонный гамильтониан Хаббарда.

В 1.2 вводится ангармоническая модель сверхпроводника с локальным и нелокальным электрон-фононным взаимодействием. Приводятся качественные оценки температуры сверхпроводящего перехода в этой модели при структурном фазовом переходе.

Роль спиновых флуктуаций в объяснении свойств ВТСП в нормальной и сверхпроводящей фазах обсуждается в разделе 1.3. Здесь же указываются основные теоретические подходы к изучению сверхпроводников с антиферромагнитным (АФ) основным состоянием. Описывается движение дырки на АФ фоне и процесс образования спинового полярона. Дается качественная картина сверхпроводящего спаривания дырок в антиферромагнетике.

Во второй главе исследуется электрон-фононный механизм спаривания в ангармонической модели сверхпроводника с локальным и нелокальным взаимодействием. Глава состоит из трех разделов.

В разделе 2.1 рассматривается локальное электрон-фононное взаимодействие. Учет сильных электронных корреляций приводит к необходимости рассматривать отдельно подпространства однократно и дву-

кратно занятых состояний, которые удобно описывать операторами Хаббарда. Для исследования данной модели вводятся определенные на операторах Хаббарда двухвременные функции Грина, для которых записываются уравнения движения. В пренебрежении перенормировкой вершины, как и в известном приближении Мигдала, получаются уравнения для массового оператора одночастичной функции Грина. Аналогично вводится фононная функция Грина, построенная для операторов псевдоспина, описывающих сильные ангармонические колебания ионов в кристаллической решетке. Далее используется стандартная процедура вывода уравнений Элиашберга в приближении слабой связи для записи уравнения сверхпроводящей щели и температуры сверхпроводящего перехода. Определяется также температура структурного пайерлсовского перехода по обращению в нуль перенормированной частоты псевдоспиновых возбуждений. Получена зависимость изотопического эффекта от концентрации носителей заряда. Для сравнения были вычислены также температуры сверхпроводящего и пайерлсовского переходов и показатель изотопического эффекта в случае свободного ферми-газа. В результате было показано, что учет сильных электронных корреляций ведет к сужению электронной зоны и смещению особенности Ван-Хова в область концентраций электронов  $n = 2/3$ . Это приводит, в свою очередь, к росту сверхпроводящей температуры и смещению ее максимума, а также к соответственному смещению максимумов других вышеупомянутых функций. Показано, что в случае нелокального взаимодействия возможно  $s$ -волновое спаривание с изотропной щелью и  $d$ -волновое спаривание с симметрией  $b_{2g}$ .

В разделе 2.2 аналогичным методом получаются уравнения сверхпроводимости в случае нелокального электрон-фононного взаимодействия. Находится температура сверхпроводящего перехода в зависимости от симметрии параметра порядка.

В последнем разделе данной главы, 2.3, обсуждаются полученные результаты, преимущества и недостатки данной модели.

В третьей главе в рамках спин-поляронной модели исследуются квазичастичные спектры дырок и магнонов для конечных температур и концентраций на АФ решетке в самосогласованном борновском приближении. Глава состоит из четырех разделов.

В разделе 3.1 при помощи метода вспомогательных фермионных полей для  $t - J$  модели выводится гамильтониан спин-поляронной модели в одноподрешеточном представлении. В качестве основного состояния взят неелевский антиферромагнетик. Далее, методом уравнений движения для двухвременных функций Грина выводятся уравнения для оператора собственной энергии. В пренебрежении перенормировкой спин-волновой функции Грина получена самосогласованная система уравнений, которая далее исследовалась численным образом.

В разделе 3.2 представлены результаты вычислений для спектральной функции дырок  $A(k, \omega)$ , функции распределения их по импульсам  $N(k)$  в зависимости от концентрации  $\delta$  и температуры  $T$ .

Для исследования взаимного влияния дырок и спиновых волн в нормальном состоянии в разделе 3.3 получена самосогласованная система уравнений для спин-поляронной модели с учетом перенормировки магнонного спектра в самосогласованном борновском приближении.

Результаты вычислений обсуждаются в разделе 3.4. Помимо спектральной функции дырок  $A(k, \omega)$  и функции распределения по импульсам  $N(k)$  в зависимости от концентрации, в данном разделе вычислялись спектральная функция магнонов  $B(k, \omega)$ , спин-волновая дисперсия  $\omega_q$  и затухание  $\gamma_q$ , а также  $m(\delta)$  – магнитный момент. Наиболее важный результат проведенных расчетов – устойчивость спектральной функции  $A(k, \omega)$  в виде когерентного пика при энергиях меньше или порядка  $J$  и широкой некогерентной части при больших энергиях, который сохраняется и при умеренных концентрациях и температурах. Существование хорошо определенных квазичастиц в исследуемой модели позволяет рассмотреть их сверхпроводящее спаривание.

В четвертой главе исследуется сверхпроводящее состояние в спин-

поляронной модели. Так как энергия спиновых флуктуаций, обеспечивающих спаривание, одного порядка с шириной квазичастичного пика, то нельзя ограничиться приближением слабой связи в теории БКШ и необходимо решение полной системы уравнений Элиашберга. Исследованию данной проблемы и посвящена настоящая глава, состоящая из трех разделов.

В разделе 4.1 выводится гамильтониан двухподрешеточной поляронной модели, который получается из  $t - t' - J$  модели. Для этого используется метод вспомогательных фермионных полей и представление Гольдштейна – Примакова для операторов спина в линейном спин-волновом приближении. Необходимость изучения двухподрешеточной спин-поляронной модели обусловлена тем, что при обсуждении синглетного спаривания приходится рассматривать движение двух дырок, принадлежащих разным подрешеткам гейзенберговского антиферромагнетика. При исследовании нормальной фазы достаточно рассмотреть движение дырки лишь по одной подрешетке, как это было описано в предыдущей главе.

В разделе 4.2 получены самосогласованные уравнения для дырочных и магнонных матричных функций Грина. Оператор собственной энергии дырок и поляризационный оператор магнонов, представленные в виде неприводимых частей многочастичных функций Грина, вычислены в самосогласованном борновском приближении.

Система уравнений для мнимых частот выводится в разделе 4.3, где также обсуждаются полученные численные результаты. Запись уравнений в мнимых частотах позволяет использовать метод быстрого преобразования Фурье. Это позволяет минимум на порядок ускорить численный расчет по сравнению с вычислениями для реальных частот, которые использовались в третьей главе диссертации. Первоначально решалась самосогласованная система уравнений для нормальной функции Грина и ее массового оператора и находились спектральная плотность, дисперсионные кривые квазичастиц, их поверхность Ферми и

плотность дырочных состояний для различных концентраций дырок. Затем исследовалось линеаризованное уравнение для определения собственных векторов и максимальных собственных значений щелевой функции. Было показано, что симметрия параметра порядка – сверхпроводящей щели на поверхности Ферми – описывается  $d$ -волновой функцией. Исследовалась зависимость щели от импульса и энергии, которая имеет сложный вид и не может быть представлена в виде произведения независимых функций от импульса и энергии. Вычислена зависимость  $T_c(\delta)$ , которая имеет максимальное значение порядка  $0.01t$  в области концентраций дырок  $0.25$  и  $J = 0.4t$ . С ростом обменного взаимодействия  $J$  температура  $T_c$  растет вплоть до  $J \simeq 3$ . На основании проведенных расчетов можно сделать вывод: спаривание дырок на двухподрешеточном антиферромагнетике за счет обмена спиновыми флуктуациями представляет собой механизм высокотемпературной сверхпроводимости, что составляет основной результат данной главы.

В заключении сформулированы основные положения, выносимые на защиту.

## ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Для однозонной модели Хаббарда с сильно ангармоническим электрон-фононным взаимодействием получены зависимости температуры сверхпроводящего  $T_c$  и пайерлсовского  $T_p$  переходов и изотопического эффекта  $\alpha$  от концентрации носителей  $n$ . Показано, что учет сильных корреляций приводит к сужению зоны и сдвигу особенности Ван-Хова в область  $n = 2/3$  и соответствующему изменению зависимостей  $T_c$ ,  $T_p$  и  $\alpha$  от концентрации носителей. Максимум температур сверхпроводящего и пайерлсовского переходов определяется положением особенности Ван-Хова. Показано, что для нелокальной модели электрон-фононного взаимодействия характер зависимости  $T_c(n)$  определяется симметрией щели.

2. На основе спин-поляронного представления для  $t$ - $J$  модели методом вспомогательных фермионов вычислены спектральная функция  $A(k, \omega)$  дырочных возбуждений и их распределение  $N(k)$  в импульсном пространстве. Показаны слабая концентрационная и температурная зависимости спектральной функции квазичастичного дырочного спектра и существенное изменение распределения по импульсам  $N(k)$  с ростом температуры в интервале  $T > T_d$ , где  $T_d \simeq J\delta$ . Получены температурная и концентрационная зависимости спектра и затухания квазичастиц.
3. Показано, что распад спиновых волн на возбуждения типа "частица-дырка" приводит к сильному смягчению и затуханию длинноволновых спиновых волн. Спин-волновая скорость и магнитный порядок стремятся к нулю при некоторой критической концентрации  $\delta_c \sim 0.1$ , что указывает на фазовый переход в магнитоупорядоченную фазу. Получено значительное уширение зоны квазичастичного дырочного спектра с ростом концентрации  $\delta$ , при незначительном изменении его формы. Это указывает на нарушение приближения "жесткой зоны", ранее использовавшегося другими авторами.
4. В рамках двухподрешеточной спин-поляронной модели вычислены матричные функции Грина для допированных дырок (спин-поляронов) и магнонов. Решением самосогласованной системы уравнений с помощью быстрого преобразования Фурье показаны сильная перенормировка квазичастичного спектра дырок за счет спиновых флуктуаций и  $d$ -волновое сверхпроводящее спаривание спин-поляронов с максимальной температурой  $T_c \simeq 0,01t$  вблизи концентрации дырок  $0,25$ . Получено, что максимальное  $T_c$  соответствует концентрации дырок, когда малая поверхность Ферми в виде четырех "карманов" вдоль антиферромагнитной зоны Бриллюэна переходит в большую с центром в точке  $\mathbf{k}=(0,0)$ .

**Основные результаты диссертации опубликованы в работах:**

1. Плакида Н.М., Удовенко В.С., Электрон-фононный механизм спаривания в ангармонической модели сверхпроводника с сильными электронными корреляциями, Сверхпроводимость: ФХТ **5**, с.775-782 (1992).
2. Plakida N.M., Udovenko V.S., Electron-phonon pairing in the Hubbard model, Modern Phys. Lett. **B6**, p.541-546
3. Plakida N.M., Oudovenko V.S., Yushankhai V.Yu., Temperature and doping dependence of quasiparticle spectrum for holes in spin - polaron model of copper oxides, Phys. Rev. **B50**, p.6431-6441 (1995).
4. Plakida N.M., Oudovenko V.S., Yushankhai V.Yu., Concentration and temperature dependence of magnetic polaron spectra in the  $t - J$  model, Proc. Workshop on Polarons and Bipolarons in high- $T_c$  Superconductors and Related Materials, (7 - 9 April, 1994, Cambridge, Great Britain); in press.
5. Plakida N., Oudovenko V., Horsch P., Liechtenstein A., Superconducting pairing of spin polarons in the  $t - J$  model, Препринт ОИЯИ E17-95-287 (1995) (направлено в Phys.Rev.Lett).

Рукопись поступила в издательский отдел  
28 сентября 1995 года