

*Н. М. Плакида*

## Спин-флуктуационный механизм высокотемпературной сверхпроводимости в купратах

Несмотря на небывалую активность в исследовании высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) в медно-оксидных соединениях (купратах) после ее открытия Беднорцем и Мюллером [1] в 1986 г., до сих пор отсутствует общепринятая теория этого явления. Было предложено несколько механизмов образования куперовских пар с зарядом  $2e$  в синглетном состоянии ( $S = 0$ ), из которых наиболее вероятными являются электрон-фононный (ЭФ) и спин-флуктуационный (СФ) механизмы [2]. Однако изотопический эффект в купратах при оптимальном легировании (максимальной температуре сверхпроводимости  $T_c$ ) необычайно мал, что ставит под сомнение чисто ЭФ-механизм [3]. Основная критика СФ-механизма основана на слабой интенсивности спиновых флуктуаций, наблюдаемых в нейтронных экспериментах при оптимальном легировании. В недавних экспериментах [4] по неупругому ре-

зонансному рассеянию рентгеновских лучей в широкой области легирования были обнаружены спиновые возбуждения с дисперсией и интенсивностью, близкими к антиферромагнитным (АФ) спиновым волнам в нелегированных купратах, что отвергает эту критику.

Главная проблема при теоретическом описании купратов обусловлена сильными электронными корреляциями, что не позволяет использовать для них приближение одночастичных возбуждений и стандартную зонную теорию. В частности, при половинном заполнении (один электрон на узел решетки) в противоречии с зонной теорией купраты — не металлы, а АФ-изоляторы с заполненной зоной одночастичных состояний и пустой зоной двухчастичных состояний. Диэлектрическая щель обусловлена сильным кулоновским взаимодействием на узлах меди  $U \sim 8$  эВ, значительно превышающим кинетическую энергию электронов  $t \sim 0,4$  эВ.

*N. M. Plakida*

## Spin-Fluctuation Mechanism of High-Temperature Superconductivity in Cuprates

Despite intensive studies of high-temperature superconductivity (HTSC) in copper-oxide compounds (cuprates) after the discovery by Bednorz and Müller [1] in 1986, a commonly accepted mechanism of this phenomenon is not still available. Several mechanisms of Cooper pair formation with charge,  $2e$  in the singlet state ( $S = 0$ ) were proposed, among which the most probable ones are the electron-phonon (EP) and spin-fluctuation (SF) mechanisms (see, e.g., [2]). However, the isotope effect in cuprates at an optimal doping (at the maximal temperature of superconductivity  $T_c$ ) is extremely small, which makes a purely EP mechanism of pairing doubtful [3]. The main argument against the SF mechanism is based on weak intensity of SF observed in neutron scattering experiments at the optimal doping. However, in recent resonance inelastic X-ray scattering experiments [4] spin excitations with the dispersion and spectral weight similar to those of antiferromagnetic (AF) spin waves in undoped cuprates were observed in a broad region of doping, which dismissed this criticism.

The main problem in the theory of cuprates is related to strong electron correlations, which precludes from using a single-particle approximation and the conventional band-structure theory. In particular, contrary to the band theory, at half-filling (one electron per lattice site) cuprates are not metals but AF insulators with the filled singly-occupied band and empty doubly-occupied band. The insulating gap is induced by a strong Coulomb interaction on the copper sites  $U \sim 8$  eV much larger than the electron kinetic energy  $t \sim 0.4$  eV. Therefore, in the theory of cuprates the two-subband Hubbard model should be considered with the singly-occupied and doubly-occupied bands described by composite Hubbard operators. The Hubbard operators obey complicated commutation relations resulting in a specific *kinematic interaction* of electrons. To elucidate the mechanism of HTSC in cuprates, we consider in [5] the extended Hubbard model in the limit of strong correlations ( $U \gg t$ ) where intersite Coulomb repulsion  $V_{ij}$  and sufficiently strong EP interaction  $g_{ij} \sim 2$  eV are also taken into account. In the case of *d*-wave pairing, EP interaction is

Поэтому для описания купратов необходимо рассмотреть двухзонную модель Хаббарда для одночастичных и двухчастичных состояний, используя технику составных операторов — операторов Хаббарда. Эти операторы имеют сложные коммутационные соотношения, приводящие к специфическому *кинематическому взаимодействию* электронов. Чтобы прояснить механизм ВТСП в купратах, в нашей работе [5] мы рассмотрели расширенную модель Хаббарда в пределе сильных корреляций ( $U \gg t$ ), учитывающую также межзольное кулоновское отталкивание  $V_{ij}$  и достаточно сильное ЭФ-взаимодействие  $g_{ij} \sim 2$  эВ. В случае  $d$ -волнового спаривания ЭФ-взаимодействие оказывается подавленным, в то время как достаточно сильное *кинематическое взаимодействие* со спин-флуктуационным механизмом приводит к высокотемпературной сверхпроводимости.

Расширенная модель Хаббарда имеет вид

$$H = \sum_{t \neq j, \sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} + \left(\frac{U}{2}\right) \sum_{i, \sigma} N_{i\sigma} N_{i\bar{\sigma}} + \left(\frac{1}{2}\right) \sum_{i \neq j} V_{ij} N_i N_j + \sum_{i, j} g_{ij} N_i u_j, \quad (1)$$

где матрица  $t_{ij}$  описывает перескоки электронов со спином  $\sigma = \pm(1/2)$  между ближайшими ( $t_{ij} = t$ ) и следующими ( $t_{ij} = t'$ ) узлами решетки ( $i, j$ ). Взаимодействие электронов определяется одноузельным  $U \gg t$  и между-

зельным  $V_{ij}$  кулоновским взаимодействием и ЭФ-взаимодействием  $g_{ij}$  с колебаниями решетки  $u_j$ . Учитывая две хаббардовские подзоны, операторы электронов  $a_{i\sigma}$  записываем через операторы Хаббарда  $X_i^{\alpha\beta}$  для одночастичных ( $N_{i\sigma} = 0$ ) и двухчастичных ( $N_{i\sigma} = 1$ ) состояний:

$$a_{i\sigma} = a_{i\sigma}(1 - N_{i\bar{\sigma}}) + a_{i\sigma} N_{i\bar{\sigma}} \equiv X_i^{0\sigma} + X_i^{\bar{\sigma}2}, \quad (2)$$

$$N_{i\sigma} = a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma}, \quad \bar{\sigma} = -\sigma.$$

Подставляя (2) в (1), составим уравнения движения для операторов Хаббарда

$$i \frac{d}{dt} X_i^{\sigma 2} = [a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma} a_{i\bar{\sigma}}, H] =$$

$$= U X_i^{\sigma 2} - \sum_m (V_{im} N_m + g_{im} u_m) X_i^{\sigma 2} +$$

$$+ \sum_m t_{im} \left\{ \sum_{\sigma'} (B_{i\sigma\sigma'}^{22} X_m^{\sigma' 2} - 2\sigma B_{i\sigma\sigma'}^{21} X_m^{0\sigma'}) - \right.$$

$$\left. - X_i^{02} (X_m^{0\sigma} + 2\sigma X_m^{2\bar{\sigma}}) \right\}, \quad (3)$$

где коммутационные соотношения для операторов Хаббарда приводят к появлению операторов бозевского типа — числа частиц  $N_i$  и спина  $S_i^z, S_i^\pm$ :

$$B_{i\sigma\sigma'}^{22} = \left(\frac{N_i}{2} + S_i^z\right) \delta_{\sigma'\sigma} + S_i^\sigma \delta_{\sigma'\bar{\sigma}},$$

$$B_{i\sigma\sigma'}^{21} = \left(\frac{N_i}{2} + S_i^z\right) \delta_{\sigma'\sigma} - S_i^\sigma \delta_{\sigma'\bar{\sigma}},$$

$$N_i = \sum_{\sigma} X_i^{\sigma\sigma} + 2X_i^{22}, \quad S_i^z = \sigma [X_i^{\sigma\sigma} - X_i^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}], \quad S_i^\sigma = X_i^{\sigma\bar{\sigma}},$$

suppressed, while strong *kinematic interaction* with SF results in high-temperature superconductivity.

The extended Hubbard model reads:

$$H = \sum_{t \neq j, \sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} + \left(\frac{U}{2}\right) \sum_{i, \sigma} N_{i\sigma} N_{i\bar{\sigma}} + \left(\frac{1}{2}\right) \sum_{i \neq j} V_{ij} N_i N_j + \sum_{i, j} g_{ij} N_i u_j, \quad (1)$$

where the matrix  $t_{ij}$  describes hopping of electrons with spin  $\sigma = \pm(1/2)$  between the nearest ( $t_{ij} = t$ ) and next ( $t_{ij} = t'$ ) lattice sites ( $i, j$ ). Interaction between electrons is defined by the single-site  $U \gg t$  and intersite  $V_{ij}$  Coulomb repulsion and EP interaction  $g_{ij}$  with lattice displacements  $u_j$ . By taking into account two Hubbard subbands the electron operators  $a_{i\sigma}$  are written in terms of the Hubbard operators  $X_i^{\alpha\beta}$  for the singly-occupied ( $N_{i\sigma} = 0$ ) and the doubly-occupied ( $N_{i\sigma} = 1$ ) states:

$$a_{i\sigma} = a_{i\sigma}(1 - N_{i\bar{\sigma}}) + a_{i\sigma} N_{i\bar{\sigma}} \equiv X_i^{0\sigma} + X_i^{\bar{\sigma}2}, \quad (2)$$

$$N_{i\sigma} = a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma}, \quad \bar{\sigma} = -\sigma.$$

Introducing (2) into (1), we write down the equation of motion for the Hubbard operators

$$i \frac{d}{dt} X_i^{\sigma 2} = [a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma} a_{i\bar{\sigma}}, H] =$$

$$= U X_i^{\sigma 2} - \sum_m (V_{im} N_m + g_{im} u_m) X_i^{\sigma 2} +$$

$$+ \sum_m t_{im} \left\{ \sum_{\sigma'} (B_{i\sigma\sigma'}^{22} X_m^{\sigma' 2} - 2\sigma B_{i\sigma\sigma'}^{21} X_m^{0\sigma'}) - \right.$$

$$\left. - X_i^{02} (X_m^{0\sigma} + 2\sigma X_m^{2\bar{\sigma}}) \right\}, \quad (3)$$

where the commutation relations for the Hubbard composite operators result in emerging of the Bose-like particle number  $N_i$  and spin  $S_i^z, S_i^\pm$  operators:

$$B_{i\sigma\sigma'}^{22} = \left(\frac{N_i}{2} + S_i^z\right) \delta_{\sigma'\sigma} + S_i^\sigma \delta_{\sigma'\bar{\sigma}},$$

$$B_{i\sigma\sigma'}^{21} = \left(\frac{N_i}{2} + S_i^z\right) \delta_{\sigma'\sigma} - S_i^\sigma \delta_{\sigma'\bar{\sigma}},$$

$$N_i = \sum_{\sigma} X_i^{\sigma\sigma} + 2X_i^{22}, \quad S_i^z = \sigma [X_i^{\sigma\sigma} - X_i^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}], \quad S_i^\sigma = X_i^{\sigma\bar{\sigma}},$$

which determines the *kinematic interaction* proportional to the kinetic energy  $t_{ij}$  with a characteristic value  $t \sim 0.4$  eV.

Using equations of motion similar to (3), we obtain a self-consistent system of equations for the normal Green function (GF) and the anomalous GF for Cooper pairs. Within the strong coupling Eliashberg theory an equation for the superconducting gap function  $\varphi(\mathbf{k}, \omega_n)$  and  $T_c$  can be written in the form:

определяющих кинематическое взаимодействие, пропорциональное кинетической энергии  $t_{ij}$  с характерной величиной  $t \sim 0,4$  эВ.

Пользуясь далее уравнениями движения типа (3), получаем самосогласованную систему уравнений для функций Грина (ФГ) в нормальном состоянии и аномальных ФГ куперовских пар. В рамках теории сильной связи Элиашберга находим уравнение для сверхпроводящей щели  $\varphi(\mathbf{k}, \omega_n)$  и  $T_c$ :

$$\varphi(\mathbf{k}, \omega_n) = \frac{T_c}{N} \sum_q \sum_m \frac{\varphi(\mathbf{q}, \omega_m)}{[\omega_m Z(\mathbf{q}, \omega_m)]^2 + [\varepsilon(\mathbf{q}) + X(\mathbf{q}, \omega_m)]^2} \times \left\{ J(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - V(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - |t(\mathbf{q})|^2 \chi_{\text{sf}}(\mathbf{k}-\mathbf{q}, \omega_n - \omega_m) + |g(\mathbf{k}-\mathbf{q})|^2 \chi_{\text{ph}}(\mathbf{k}-\mathbf{q}, \omega_n - \omega_m) \right\}, \quad (4)$$

где  $J(\mathbf{q})$  и  $V(\mathbf{q})$  — АФ обменное взаимодействие и межузельное кулоновское отталкивание, не зависящие от энергии рассеяния, в то время как взаимодействие электронов со спиновыми возбуждениями  $\sim |t(\mathbf{q})|^2$  и фононами  $\sim |g(\mathbf{q})|^2$  определяется частотно-зависящими функциями, спиновой и фононной восприимчивостями:

$$\chi_{\text{sf}}(\mathbf{q}, \omega) = -\langle\langle \mathbf{S}_{\mathbf{q}} | \mathbf{S}_{-\mathbf{q}} \rangle\rangle_{\omega}, \quad (5)$$

$$\chi_{\text{ph}}(\mathbf{q}, \omega) = -\langle\langle u_{\mathbf{q}} | u_{-\mathbf{q}} \rangle\rangle_{\omega}.$$

Функции  $Z(\mathbf{q}, \omega_n)$  и  $X(\mathbf{q}, \omega_n)$  определяют перенормировку спектра электронов  $\varepsilon(\mathbf{q})$  в нормальном состоянии, где  $1/Z(\mathbf{q}, \omega_n)$  — квазичастичный вес.

Для выяснения роли различных взаимодействий в сверхпроводящем спаривании рассмотрим приближение слабой связи в уравнении (4), когда можно пренебречь перенормировкой спектра в нормальном состоянии,  $Z(\mathbf{q}, \omega_n) = 0$ ,  $X(\mathbf{q}, \omega_n) = 0$ , а восприимчивости (5) берутся в статическом пределе,  $\omega_n = 0$ . В этом приближении уравнение для щели с  $d$ -волновой симметрией  $\varphi(\mathbf{k}) \propto \eta(\mathbf{k}) = (\cos k_x - \cos k_y)$  принимает вид

$$1 = \sum_q [\eta(\mathbf{q})]^2 \frac{1}{2\varepsilon(\mathbf{q})} \tanh\left(\frac{\varepsilon(\mathbf{q})}{2T_c}\right) \times \left\{ J - \hat{V}_c - |t(\mathbf{q})|^2 \hat{\chi}_{\text{sf}} + \hat{V}_{\text{ep}} \right\}. \quad (6)$$

Здесь константы определяются  $L = 2$  гармониками взаимодействий в (4):

$$\hat{V}_c = \sum_k V_k \cos k_x, \quad \hat{\chi}_{\text{sf}} = \sum_k \chi_{\text{sf}}(\mathbf{k}) \cos k_x, \quad (7)$$

$$\hat{V}_{\text{ep}} = \sum_k |g_k|^2 \chi_{\text{ph}}(\mathbf{k}) \cos k_x.$$

Вычисление этих параметров для определенных моделей взаимодействия [5] дает следующие оценки:  $J \approx 0,15$  эВ,  $\hat{V}_c \approx 0,2$  эВ,  $\hat{V}_{\text{ep}} \approx 0,8$  эВ. Отметим, что в часто используемом приближении среднего поля  $J - \hat{V}_c < 0$  и сверхпроводимость подавлена (нет решенный типа резонирующих валентных связей [6]). Спин-флуктуационный вклад в (6) оказывается положительным, так как  $\chi_{\text{sf}}(\mathbf{k})$  имеет острый максимум при АФ

$$\varphi(\mathbf{k}, \omega_n) = \frac{T_c}{N} \sum_q \sum_m \frac{\varphi(\mathbf{q}, \omega_m)}{[\omega_m Z(\mathbf{q}, \omega_m)]^2 + [\varepsilon(\mathbf{q}) + X(\mathbf{q}, \omega_m)]^2} \times \left\{ J(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - V(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - |t(\mathbf{q})|^2 \chi_{\text{sf}}(\mathbf{k}-\mathbf{q}, \omega_n - \omega_m) + |g(\mathbf{k}-\mathbf{q})|^2 \chi_{\text{ph}}(\mathbf{k}-\mathbf{q}, \omega_n - \omega_m) \right\}, \quad (4)$$

where  $J(\mathbf{q})$  and  $V(\mathbf{q})$  are the AF exchange interaction and intersite Coulomb repulsion which do not depend on the scattering energy, while electron interactions with spin fluctuations  $\sim |t(\mathbf{q})|^2$  and phonons  $\sim |g(\mathbf{q})|^2$  are determined by the frequency-dependent functions, the spin and phonon susceptibility, respectively:

$$\chi_{\text{sf}}(\mathbf{q}, \omega) = -\langle\langle \mathbf{S}_{\mathbf{q}} | \mathbf{S}_{-\mathbf{q}} \rangle\rangle_{\omega}, \quad (5)$$

$$\chi_{\text{ph}}(\mathbf{q}, \omega) = -\langle\langle u_{\mathbf{q}} | u_{-\mathbf{q}} \rangle\rangle_{\omega}.$$

The functions  $Z(\mathbf{q}, \omega_n)$  and  $X(\mathbf{q}, \omega_n)$  determine the renormalization of the electron spectrum  $\varepsilon(\mathbf{q})$  in the normal state where  $1/Z(\mathbf{q}, \omega_n)$  is the quasiparticle weight.

To elucidate a role of various interactions in the superconducting pairing, we consider a weak-coupling approximation in Eq. (4) when the spectrum renormalization in the normal state is neglected,  $Z(\mathbf{q}, \omega_n) = 0$ ,  $X(\mathbf{q}, \omega_n) = 0$ , and the susceptibilities (5) are taken in the static limit,  $\omega_n = 0$ . In this approximation Eq. (4) for the gap function with the

$d$ -wave symmetry,  $\varphi(\mathbf{k}) \propto \eta(\mathbf{k}) = (\cos k_x - \cos k_y)$  takes the form:

$$1 = \sum_q [\eta(\mathbf{q})]^2 \frac{1}{2\varepsilon(\mathbf{q})} \tanh\left(\frac{\varepsilon(\mathbf{q})}{2T_c}\right) \times \left\{ J - \hat{V}_c - |t(\mathbf{q})|^2 \hat{\chi}_{\text{sf}} + \hat{V}_{\text{ep}} \right\}. \quad (6)$$

Here the coupling constants are defined by the  $L = 2$  harmonics of the interaction in Eq. (4):

$$\hat{V}_c = \sum_k V_k \cos k_x, \quad \hat{\chi}_{\text{sf}} = \sum_k \chi_{\text{sf}}(\mathbf{k}) \cos k_x, \quad (7)$$

$$\hat{V}_{\text{ep}} = \sum_k |g_k|^2 \chi_{\text{ph}}(\mathbf{k}) \cos k_x.$$

Calculation of these parameters for particular models of interactions (see Ref. [5]) gives the following estimations:  $J \approx 0.15$  eV,  $\hat{V}_c \approx 0.2$  eV,  $\hat{V}_{\text{ep}} \approx 0.8$  eV. Note that in the frequently used mean-field approximation  $J - \hat{V}_c < 0$ , and superconductivity is suppressed (in particular, there is no resonating valence bond solution [6]). Spin-fluctuation contribution in (6) appears to be positive since  $\chi_{\text{sf}}(\mathbf{k})$  has a sharp maximum at the AF wave vector  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ , and integration over  $\mathbf{k}$  in Eq. (7) gives  $\hat{\chi}_{\text{sf}} < 0$ . This results in attraction in the spin-wave channel with a large coupling constant  $\hat{V}_{\text{sf}} \approx -4t\hat{\chi}_{\text{sf}} \approx 2$  eV for  $t = 0.4$  eV.

волновом векторе  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ , и интегрирование по  $\mathbf{k}$  в (7) дает  $\hat{\chi}_{sf} < 0$ . В результате в спин-волновом канале возникает притяжение с большой константой связи  $\hat{V}_{sf} \approx -4t\hat{\chi}_{sf} \approx 2$  эВ для  $t = 0,4$  эВ.

На рис.1 сравниваются  $T_c$ , вычисленные в приближении слабой связи (6) и сильной связи (4), где сплошная линия определяет  $T_c$  при учете всех вкладов, штриховая — при учете только СФ-вклада и штрихпунктирная на левой панели — ЭФ-вклада. Уменьшение  $T_c$  в случае сильной связи (4) на порядок до значений  $T_c \approx 0,02t \approx 100$  К обусловлено сильной перенормировкой квазичастичного веса за счет  $Z(\mathbf{q}) \approx 3$  для  $\delta < 0,25$  (рис. 2), в результате чего только ЭФ-взаимодействие дает низкую  $T_c$ , не показанную на правой панели рис. 1.

Рис. 1. Зависимость  $T_c$  от концентрации дырок  $\delta$ : в приближении (6) (слева) и (4) (справа)

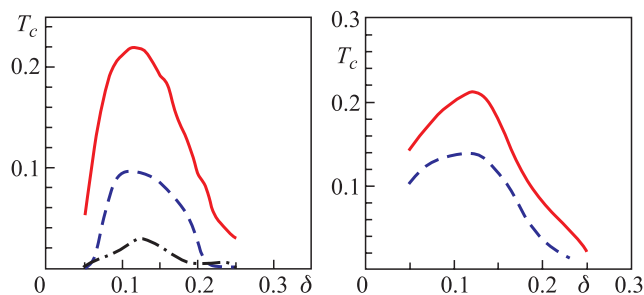


Fig. 1.  $T_c$  dependence on the hole concentration  $\delta$ : by Eq. (6) (left panel) and Eq. (4) (right panel)

In Fig. 1, we compare  $T_c$  computed in the weak-coupling approximation (6) and in the strong-coupling theory (4). The bold line shows  $T_c$  when all contributions are taken into account, the dashed line refers for the SF contribution only and the dash-dotted line in the left panel refers to the EP contribution only. The reduction of  $T_c$  in the strong-coupling theory (4) by an order of magnitude down to  $T_c \approx 0,02t \approx 100$  K is related to strong renormalization of the quasiparticle weight,  $Z(\mathbf{q}) \approx 3$  for  $\delta < 0,25$  (see Fig. 2). This results in a low  $T_c$  not shown in the right panel of Fig. 1.

The wave-vector dependence of the superconducting gap in the Brillouin zone is close to the conventional  $d$ -wave symmetry and its energy dependence reveals an important role of high-energy spin-fluctuation excitations in the superconducting pairing in agreement with experiments [5].

In summary, within the developed microscopic theory we propose a *new mechanism of HTSC* in cuprates induced by *kinematic interaction* of the Hubbard operators in the limit of strong correlations, which results in electron pairing mediated by spin fluctuations with a large coupling constant.

Зависимость сверхпроводящей щели от волнового вектора в зоне Бриллюэна близка к стандартной  $d$ -волновой симметрии, а энергетическая зависимость щели показывает существенную роль высокоэнергетических спиновых флуктуаций в сверхпроводящем спаривании в согласии с экспериментом [5].

Таким образом, в рамках развитой нами микроскопической теории предложен *новый механизм ВТСП* в купратах, обусловленный *кинематическим взаимодействием* операторов Хаббарда в пределе сильных корреляций и спариванием электронов за счет спиновых флуктуаций с большой константой связи.

Рис. 2. Зависимость  $Z(\mathbf{q}, 0)$  для  $\delta = 0,05-0,35$

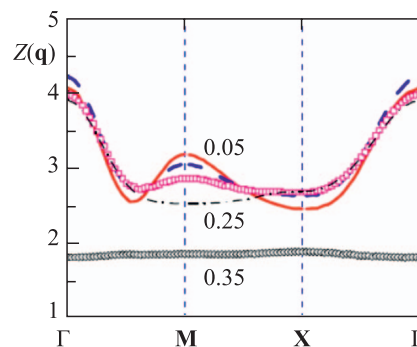


Fig. 2.  $Z(\mathbf{q}, 0)$  for hole concentrations  $\delta = 0,05-0,35$

## Список литературы / References

1. Bednorz J.G., Müller K.A. // Zs. Phys. B. 1986. V.64. P.189.
2. Plakida N.M. High-Temperature Cuprate Superconductors. Springer Series in Solid-State Sciences. V.166. Chap.7. Berlin: Springer-Verlag, 2010.
3. Maksimov E.G., Kulić M.L., Dolgov O.V. // Adv. in Cond. Mat. Phys. Article ID. 2010. P.423725. DOI: 10.1155/2010/423725.
4. Le Tacon M. et al. // Nature Phys. 2011. V.7. P.725.
5. Plakida N.M., Oudovenko V.S. // Eur. Phys. J. B. 2013. V.86. P.115.
6. Anderson P.W. // Science. 1987. V.235. P.1196.