

Пространственная структура сверхпроводящих корреляций $d_{x^2-y^2}$ -симметрии в высокотемпературных сверхпроводниках

© С.Г. Овчинников¹⁻³, Е.И. Шнейдер^{1,2}

¹ Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск, Россия

² Сибирский государственный аэрокосмический университет им. М.Ф. Решетнева, Красноярск, Россия

³ Сибирский федеральный университет, Красноярск, Россия

E-mail: sgo@iph.krasn.ru

(Поступила в Редакцию 25 мая 2010 г.)

В рамках t - J -модели пространственная структура корреляционной функции параметра порядка $d_{x^2-y^2}$ -симметрии исследована в обобщенном приближении среднего поля, учитывающем запрет на заполнение двухчастичных локальных состояний вследствие сильных электронных корреляций. Обнаружено медленное спадание корреляционной функции вплоть до тридцатой координационной сферы. Ограничение спариванием только ближайших соседей позволяет учесть менее 17% сверхпроводящих корреляций.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 09-02-00127, проекта СО РАН–УрО РАН № 40, грантов МК-1683.2010.2, ФЦП „Кадры“ № НК-589П.

1. Введение

Во всех численных методах исследования магнитного механизма сверхпроводимости, например квантовом методе Монте-Карло (КМК) или методе точной диагонализации гамильтониана, конечный размер рассматриваемого кластера ограничивает размер куперовской пары $B_{ij} = \langle c_{i\downarrow}^+ c_{j\uparrow}^+ \rangle$ расстоянием r_{ij} очень малым числом координационных сфер [1–5]. Как правило, парные корреляционные функции весьма малы, что вызывает противоречивые выводы авторов разных работ о возможности $d_{x^2-y^2}$ -сверхпроводимости в режиме сильных электронных корреляций (СЭК) в рамках моделей Хаббарда или t - J -модели (см. дискуссию в работе [5]). В этой ситуации возникает вопрос: насколько достоверны результаты, полученные для малых кластеров? Какой размер имеет куперовская пара и можем ли мы ограничиваться учетом спаривания только ближайших соседей?

В настоящей работе мы отвечаем на этот вопрос в рамках варианта теории среднего поля, построенной с учетом СЭК. Известны разные подходы к описанию магнитного механизма сверхпроводимости [6–11]. Мы следуем [12], где учитывается локальный запрет двух электронных состояний вследствие СЭК. Преимуществом такого подхода является формулировка t - J -модели и теории сверхпроводимости в представлении X -операторов Хаббарда вместо привычных одноэлектронных операторов рождения/уничтожения электронов. Алгебра X -операторов позволяет точно учитывать запрет на двухчастичные состояния на всех стадиях вычислений. Теория сверхпроводимости [12] недавно была обобщена учетом электрон-фононного взаимодействия (ЭФВ) наряду с магнитным [13].

2. Корреляционная функция куперовских пар в t - J -модели

В высокотемпературных сверхпроводниках типа $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ дырка со спином σ на узле \mathbf{R}_i описывается оператором Хаббарда $X_i^{2,\sigma} = |2\rangle\langle -\sigma|$ и является возбуждением между d^9p^6 -спиновым дублетом с одной дыркой $|\sigma\rangle$, ($\sigma = \pm 1/2$) и двухдырочным синглетом $d^9p^6 + d^8p^6$ Жанга–Райса $|2\rangle$. Двухэлектронные состояния $d^{10}p^6$ (нуль дырок) запрещены за счет СЭК и исключены из гильбертова пространства, так что условие полноты локального базиса $\{|+1/2\rangle, |-1/2\rangle, |2\rangle\}$ имеет вид

$$\sum_{\sigma} |\sigma\rangle\langle\sigma| + |2\rangle\langle 2| = 1.$$

в этих условиях сверхпроводящее спаривание хаббардовских фермионов описывается аномальным средним

$$B_{\mathbf{q}} = \langle X_{\mathbf{q}}^{\sigma,2} X_{-\mathbf{q}}^{-\sigma,2} \rangle. \quad (1)$$

В случае $d_{x^2-y^2}$ симметрии щель $\Delta_{\mathbf{k}}$ определена следующим образом:

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \frac{1-x}{1+x} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} (J_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + J_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}) B_{\mathbf{q}}, \quad (2)$$

где x — концентрация допирования с полным числом дырок $n_h = 1+x$ на формульную единицу $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, $J_{\mathbf{k}}$ — Фурье-образ обменного интеграла $J = 2t^2/U$. Щель зависит от волнового вектора как $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta_0 \varphi_{\mathbf{k}}$, $\varphi_{\mathbf{k}} = 0.5(\cos k_x a - \cos k_y a)$. Корреляционная

функция (1) равна

$$B_q = \frac{\Delta_q F_{0\sigma}}{2E_q} \text{th} \frac{E_q}{2k_B T}, \quad (3)$$

где $F_{0\sigma} = (1+x)/2 = \langle X^{\sigma\sigma} \rangle + \langle X^{22} \rangle$ — спектральный вес дырки, определяемый числами заполнения начального и конечного состояний, $E_q = (\xi_q^2 + \Delta_q^2)^{1/2}$, и ξ_q — дисперсия электронов в нормальной фазе. При $T = 0$ уравнение для щели принимает вид

$$A = \frac{1}{N} \sum_q \lambda_J \frac{4\varphi_q^2}{E_q}, \quad \lambda_J = \frac{1-x}{2} J. \quad (4)$$

Добавление ЭФВ с константой λ_{ph} к t - J -модели сохраняет вид уравнения для щели, но с перенормированной константой связи [13]: $\lambda_J \rightarrow \lambda_{tot}$, где

$$\lambda_{tot} = \lambda_J + \lambda_{ph} \theta(\omega_D - |\xi_q|).$$

Здесь тета-функция Хевисайда, как обычно в теории БКШ, обрезает спаривание за пределами узкой области шириной порядка дебаевской частоты ω_D около уровня Ферми. Окончательное выражение для парной корреляционной функции принимает вид

$$B(\mathbf{r}) = \frac{1}{N} \sum_q \frac{\Delta_0 \varphi_q F_{0\sigma}}{2E_q} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}. \quad (5)$$

Мы рассчитали эту функцию с параметрами t - J -модели, вычисленными из первых принципов методом LDA+GTV для $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ [14], и параметром ЭФВ, найденным из уравнения рассчитанного и экспериментального значения изотоп-эффекта по кислороду в $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ [13].

На рис. 1 приведена амплитуда корреляционной функции (5) вдоль оси x , когда \mathbf{r} ($m = 0$), до \mathbf{r} ($m = 40$).

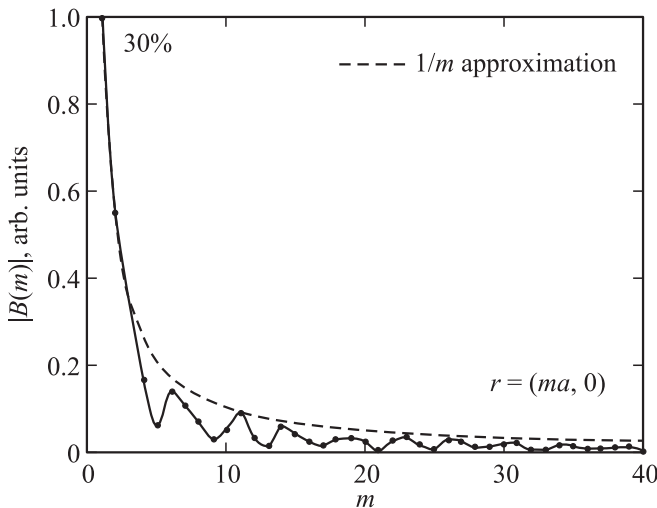


Рис. 1. Амплитуда корреляционной функции вдоль оси x при оптимальном допировании.

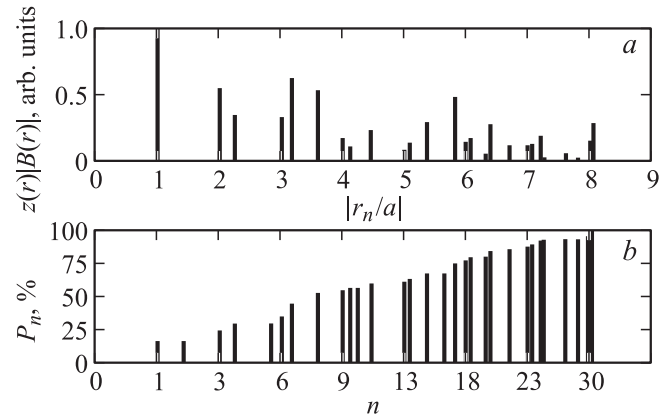


Рис. 2. Корреляционная функция (a) и процент учитываемых корреляций (b) для n -ой координационной сферы. $n \leq 30$.

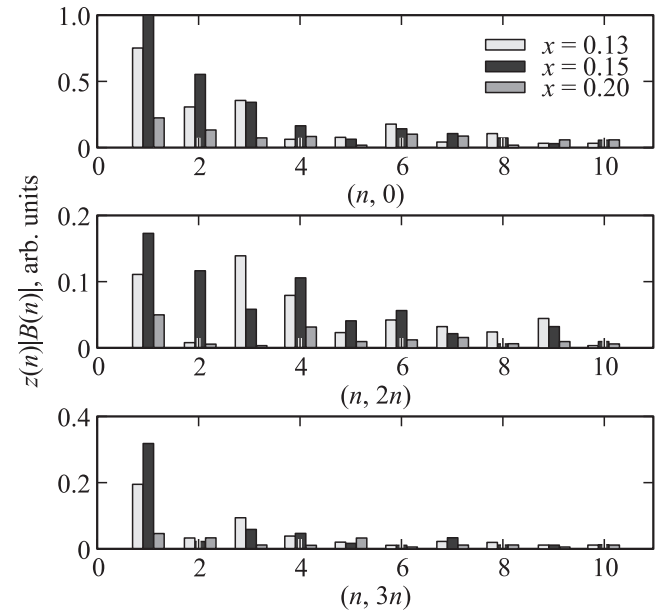


Рис. 3. Координационные функции с $r_n = (n, 0)$, $(n, 2n)$, $(n, 3n)$ для концентраций допирования $x = 0.13, 0.15, 0.20$.

Штриховой линией показана аппроксимация $1/m$, которая может быть получена аналитически из (5) при учете главного вклада в правой части от окрестности уровня Ферми, где $E_q = \Delta_q$. Значение $|B(1, 0)|$ составляет около 30% от суммы

$$\sum_{m=1}^{40} |B(m, 0)|,$$

что показывает, как много мы теряем, если ограничиваемся спариванием только ближайших соседей. Для двумерной квадратной решетки мы проанализировали не только функцию $|B(r)|$, но и произведение этой функции на координационное число z_n для n -й координационной сферы. Функция $z(r_n)|B(r_n)|$ построена на рис. 2a. Вклад от первой координационной сферы составляет

около 17% от суммарного. Чтобы оценить, какая часть корреляций учитывается при ограничении m -й координационной сферой, мы вычислили величину

$$P_m = \frac{\sum_{n=1}^m z(r_n)|B(r_n)|}{\sum_{n=1}^{30} z(r_n)|B(r_n)|}, \quad (6)$$

которая показана на рис. 2, *b*.

Корреляционная функция зависит от степени допирования x . Приведенные выше результаты были получены при $x = 0.15$ вблизи оптимального допирования. На рис. 3 мы приводим зависимости корреляционной функции вдоль трех пространственных направлений $r_n = (n, 0)$; $(n, 2n)$; $(n, 3n)$ для слабодопированных $x = 0.13$, почти оптимально допированных $x = 0.15$ и сильнодопированных $x = 0.20$ составов. Из рис. 3 видно, что концентрационная зависимость немонотонна, и в некоторых направлениях корреляции для слабодопированного состава сильнее, чем для оптимального допирования.

3. Заключение

Согласно нашим расчетам, сверхпроводящие корреляции распределены в пространстве и медленно убывают с расстоянием. Мы ограничились $|r| \leq 8a \approx 30 \text{ \AA}$, что соответствует 30 координационным сферам на квадратной решетке. Расчет до $n = 40$ показал, что более далекие корреляции близки к нулю. Полученный нами размер куперовской пары близок к экспериментальному значению корреляционной длины $\xi \approx 30 \text{ \AA}$ в высокотемпературных сверхпроводниках.

Наши результаты показывают, что численные расчеты для малых кластеров всегда очень недооценивают выигрыш в энергии сверхпроводящей фазы по сравнению с нормальной.

Настоящая работа появилась как ответ на риторический вопрос Д. Скалапино во время обсуждения противоречивых результатов КМК для теории сверхпроводимости в купратах.

Авторы благодарны Д. Скалапино за полезное обсуждение.

Список литературы

- [1] S.R. White, D.J. Scalapino, R.L. Sugar, N.E. Bickers, R.T. Scalettar. *Phys. Rev. B* **39**, 839 (1989).
- [2] Z.B. Huang, H.Q. Lin, J.E. Gubernatis. *Phys. Rev. B* **64**, 205 101 (2001).
- [3] L. Spanu, M. Lugas, F. Becca, S. Sorella. *Phys. Rev. B* **77**, 024 510 (2008).
- [4] D.J. Scalapino. *J. Supercond. Nov. Magn.* **19**, 195 (2006).
- [5] T. Aimi, M. Imada. *J. Phys. Soc. Jpn.* **76**, 084 709 (2007).
- [6] P.W. Anderson, P.A. Lee, M. Randeria, T.M. Rice, N. Trivedi, F.C. Zhang. *J. Phys.: Cond. Matter* **16**, R755 (2004).
- [7] A. Macridin, T.A. Maier, M.S. Jarrell, G.A. Sawatzky. *Phys. Rev. B* **71**, 134 527 (2005).
- [8] D. Senechal, P.L. Laverty, M.A. Marois, A.M.S. Tremblay. *Phys. Rev. Lett.* **94**, 15 640 (2005).
- [9] K. Haule, G. Kotliar. *Phys. Rev. B* **76**, 104 509 (2007).
- [10] S.S. Kancharla, B. Kyung, D. Senechal, M. Civelli, M. Capone, G. Kotliar, A.M.S. Tremblay. *Phys. Rev. B* **77**, 184 516 (2008).
- [11] P. Barone, R. Raimondi, M. Capone, C. Castellani, M. Fabrizio. *Eur. Phys. Lett.* **79**, 47 003 (2007).
- [12] N.M. Plakida, V.S. Oudovenko. *Phys. Rev. B* **59**, 11 949 (1999).
- [13] S.G. Ovchinnikov, E.I. Shneyder. *J. Supercond. Nov. Magn.* (2010). In press.
- [14] M.M. Korshunov, S.G. Ovchinnikov. *Eur. J. Phys.* **57**, 271 (2007).