

УДК 538.945

© 1991

ЭЛЕКТРОН-ДЫРОЧНАЯ АСИММЕТРИЯ ФАЗОВОЙ ДИАГРАММЫ СОЕДИНЕНИЙ $Zn_{2-x}M_xCuO_4$

Р. О. Зайцев, Ю. В. Михайлова

Изучается возможность нефононного спаривания гибридных p - d -дырок в условиях сильного короткодействующего отталкивания Хаббарда. Установлена область существования сверхпроводящего состояния в зависимости от степени недозаполнения $2p^6$ - и $3d^{10}$ -оболочек для плоских комплексов CuO_2 . Выясняются причины возникновения d -электрон-дырочной асимметрии фазовой диаграммы.

Одной из особенностей ВТСП-соединений является резкая зависимость температуры сверхпроводящего перехода $T_c(x)$ от концентрации допирующего M -катиона. Существенное различие этой зависимости для электронных [1] и дырочных [2] сверхпроводников с четырех- и двухвалентными катионами не может быть объяснено на основе классической модели Хаббарда [3]. Более реалистичская модель Эмерп [4] хорошо объясняет свойства дырочных сверхпроводников [5], однако она фактически запрещает электронную сверхпроводимость в области малого числа дырочных возбуждений ($n_p < 4/7$) и для той части фазовой диаграммы, где имеется конечная концентрация n_d одновалентных катионов меди [6].

В настоящей работе представлены результаты расчета фазовой диаграммы при $T=0$ в переменных n_p, n_d — степеней недозаполнения $2p^6$ - и $3d^{10}$ -оболочек O^{2-} и Cu^+ . Изучается модель, которая учитывает конечные вероятности w_p^2 и w_d^2 для p - и d -дырочных перескоков наряду с большой вероятностью w^2 перескока между кислородом и медью ($w^2 \geq w_p w_d$),

$$\hat{H} = \sum_{r, r', \sigma, \lambda} \{ \underline{wt} [\hat{p}_{r\sigma}^+(\lambda) \hat{d}_{r'\sigma} + \text{h. c.}] + w_p t \hat{p}_{r\sigma}^+(\lambda) \hat{p}_{r'\sigma}(\lambda) \} + w_d \sum_{r, r', \sigma} t \hat{d}_{r\sigma}^+ \hat{d}_{r'\sigma} + \varepsilon_p \sum_{r, \lambda, \sigma} \hat{p}_{r\sigma}^+(\lambda) \hat{p}_{r\sigma}(\lambda) + \varepsilon_d \sum_{r, \sigma} \hat{d}_{r\sigma}^+ \hat{d}_{r\sigma}. \quad (1)$$

Предположим, что энергия Хаббарда d -электронов есть наибольший энергетический параметр ($U_d = +\infty$), и рассмотрим два предельных случая $U_p = 0$ и $U_p = +\infty$.

Уравнения состояния, связывающие энергетический сдвиг $r = \varepsilon_p - \varepsilon_d$ и химпотенциал $\mu = -(\varepsilon_p + \varepsilon_d)/2$ со средними числами заполнения n_p и n_d в нулевом приближении самосогласованного поля, имеют следующий вид:

$$n_p = f_p \left[2n_F(\varepsilon_p) + \sum_p n_p(\xi_p^{(p)}) + \sum_{p, k=\pm} a_p^{(k)} n_F(\xi_p^{(k)}) \right], \quad (2)$$

$$\sum_{p, k=\pm} a_p^{(-k)} n_p(\xi_p^{(k)}) = \begin{cases} n_d/2f_d, & n_d < 1, \\ (n_d - 1)/f_d, & 2 > n_d > 1. \end{cases} \quad (3a)$$

$$\sum_{p, k=\pm} a_p^{(k)} n_p(\xi_p^{(k)}) = \begin{cases} n_d/2f_d, & n_d < 1, \\ (n_d - 1)/f_d, & 2 > n_d > 1. \end{cases} \quad (3b)$$

Здесь

$$\varepsilon_p, \xi_p^{(\pm)} = \frac{1}{2} \left[\xi_p^{(p)} + \xi_p^{(d)} \pm \sqrt{(\xi_p^{(p)} - \xi_p^{(d)})^2 + 4f_p f_d w^2 t_p^2} \right],$$

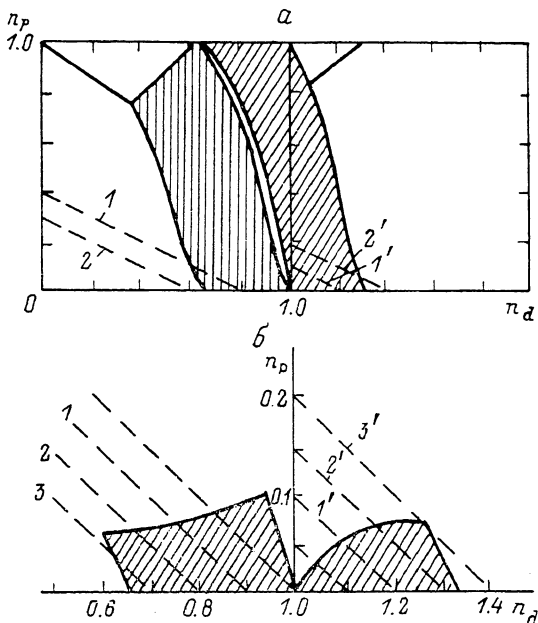
$$\xi_p^{(p)} = w_p f_p t_p + \varepsilon_p, \quad \xi_p^{(d)} = w_d f_d t_p + \varepsilon_d$$

— атомный, p - d -гибридизованный и коллективизированные спектры Ферми-возбуждений,

$$a_p^{(\pm)} = \frac{1}{2} \left[1 \pm \frac{\xi_p^{(p)} - \xi_p^{(d)}}{\sqrt{(\xi_p^{(p)} - \xi_p^{(d)})^2 + 4f_p f_d w^2 t_p^2}} \right] \quad (4)$$

— нормальные координаты; $f_{p,d}$ — так называемые концевые множители, равные единице в случае невзаимодействующих возбуждений. Для $U_p=0$ $f_p=1$, для $U_p=\infty$ $f_p=1-(3/4)n_p$, $f_d=1-n_d/2$, $f_d=n_d/2$.

Точку сверхпроводящего перехода находим из условия появления особенности двухчастичной вершинной части при нулевых суммарной частоте, импульсе и спине. Условия разрешимости соответствующей одно-



Фазовые диаграммы для одинаковых интегралов перескока $w_p = w_d = w$.

a — невзаимодействующие p -дырки, $U_p=0$, $U_d=\infty$; b — сильно взаимодействующие p - и d -возбуждения, $U_p=U_d=\infty$. Сверхпроводящие области заштрихованы. Штриховые прямые — линии электронейтральности (6). 1, 2, 3 — $\text{Ln}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$. 1', 2', 3' — $\text{Ln}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. x : 1 — 0.2, 2 — 0.4, 1' — 0.2, 2' — 0.4, (а); 1 — 0.1, 2 — 0.2, 3 — 0.3, 1' — 0.2, 2' — 0.3, 3' — 0.4 (б).

родной системы определяют температуру сверхпроводящего перехода $T_c \sim \exp(-1/\lambda)$. Сверхпроводимость существует только для положительного λ , которое в случае заполнения $\xi^{(-)}$ и $\xi^{(p)}$ подзон и для $U_p = U_d = \infty$ имеет следующий вид:

$$\lambda = \sum_p \left\{ \left[\pm \frac{2\varepsilon_d}{f_d} (a_p^{(+)})^2 - \frac{\varepsilon_p}{f_p} (a_p^{(-)})^2 \right] \delta(\xi_p^{(-)}) - \frac{\varepsilon_p}{f_p} \delta(\xi_p^{(p)}) \right\}. \quad (5)$$

нижний знак окончания — к нижней зоне Хаббарда ($n_d < 1$); для верхней зоны ($n_d > 1$) следует использовать верхний знак и во всех соотношениях произвести замену $f_d \rightarrow f_d = n_d/2$, $\varepsilon_d \rightarrow \bar{\varepsilon}_d = \varepsilon_d + U_d$. В результате интегрирования в (5) по поверхности Ферми ($\xi_p^{(-)} = 0$) условие возникновения сверхпроводящего состояния λ (ε_p/w , ε_d/w ; w_p/w ; w_d/w) = 0 задает связь между ε_p и ε_d . Подставляя ее в уравнения состояния (2), (3), получаем фазовые кривые на плоскости n_p , n_d .

Второе и третье слагаемые в (5) соответствуют рассеянию p -возбуждений, так что при $U_p=0$ их следует отбросить, а появление сверхпроводимости происходит при $\varepsilon_d=0$ и $\bar{\varepsilon}_d=0$. Из этих условий находим две фазовые

кривые $n_d = n^{(\pm)}(n_p)$, между которыми при $0 < n_p < 1$ заключена сверхпроводящая область. Обе кривые имеют положительную кривизну, начинаются в точках $n_p = 0$ и $n_d = 1 \pm 1/3$, заканчиваются при $n_p = 1$, $n_d = 1 \pm 1/3$. Внутри области $n_d < 1$ имеется несверхпроводящая часть, которая отвечает полностью заполненной $\xi_p^{(-)}$ и полностью недозаполненной $\xi_p^{(+)}$ подзонам, в то время как происходит заполнение $\xi^{(p)}$ подзоны невзаимодействующих p -возбуждений. Фазовая диаграмма для всех одинаковых интегралов перескока представлена на рисунке, *a*.

В предельном случае $U_p = U_d = \infty$ и для $n_p < 4/7$ амплитуда p - p -рассеяния положительна, что существенно ограничивает область существования сверхпроводящего состояния по сравнению со случаем невзаимодействующих p -возбуждений. Согласно (5), сверхпроводимость осуществляется только для положительных $r = \epsilon_p - \epsilon_d$, когда число d -возбуждений велико по сравнению с n_p . При $n_p = 0$ сверхпроводящая область примыкает к интервалу $|1 - n_d| < 1/3$ (см. рисунок, *b*) для особого случая $w_p = w_d = w$. В области самых малых n_p границы фаз имеют одинаковый наклон $\partial n_p / \partial n_d = -9/8$ при $n_d = 1 \pm 1/3$, все зависимости — от энергии U_p . Этот наклон в 2.25 раза больше наклона линии электронейтральности

$$2n_p + n_d - 3 = Q = -2 + (3 - W)x, \quad (6)$$

где Q — заряд комплекса CuO_2 , W — валентность допирующего M -катиона в соединении $\text{Zn}_{2-x}\text{M}_x\text{CuO}_4$. Отсюда заключаем, что при конечном $r = \epsilon_p - \epsilon_d > 0$ в электронной части фазовой диаграммы ($W = 4$, $n_d < 1$) сверхпроводимость возникает только для $x < x_c < 1/3$. В дырочной части, когда $W = 2$, $n_d > 1$, сверхпроводимость может существовать в более широком интервале, включающем критическое значение $x = 1/3$. Этот результат, обусловленный различием p - d -электронных и p - d -дырочных корреляций, качественно согласуется с экспериментом [1, 7].

Список литературы

- [1] Uchida et al. // Physica C. 1989. V. 162—164. P. 1677—1680.
- [2] Кожевников В. Л. и др. // ФММ. 1987. Т. 63. № 3. С. 625.
- [3] Hubbard J. // Proc. Roy. Soc. 1963. V. A276. N 1365. P. 328—356.
- [4] Emery V. J. // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 58. N 26. P. 2794—2797.
- [5] Зайцев Р. О. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 8. С. 233—243.
- [6] Зайцев Р. О. и др. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 11. С. 3507—3510.
- [7] Torrance J. B. // Phys. Rev. Lett. 1988. V. 61. N 9. P. 1127—1130.

Институт атомной энергии им. И. В. Курчатова
Москва

Поступило в Редакцию
27 апреля 1990 г.