

УДК 537.312

ЭФФЕКТИВНОЕ КУЛОНОВСКОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЭЛЕКТРОНОВ В КУПРАТАХ

© 2014 г. М. В. Еремин, М. А. Малахов

Федеральное государственное автономное учреждение высшего профессионального образования
“Казанский (Приволжский) федеральный университет”

E-mail: meremin@kpfu.ru

В рамках модели синглетно-коррелированной зоны проводимости купратов получены аналитические выражения для зарядовой восприимчивости и диэлектрической проницаемости. По экспериментальным данным о частоте плазмонов уточнено значение параметра экранирования, обусловленного межзонными переходами. Предсказано наличие новой ветви плазмонов акустического типа. Определены области значений волновых векторов в зоне Бриллюэна, в которых акустические плазмоны не подвержены затуханию Ландау. Рассчитан фурье-образ эффективного кулоновского взаимодействия носителей тока при различных волновых векторах.

DOI: 10.7868/S0367676514090051

ВВЕДЕНИЕ

Несмотря на повышенное внимание к плазмонному механизму спаривания носителей тока [1, 2], как уже подчеркивалось в ряде работ (см., например, обзоры [3, 4]), роль кулоновского взаимодействия в слоистых купратах остается невыясненной. Фурье-образ кулоновского взаимодействия в приближении непрерывной среды (т.е. вида $4\pi e^2/q$) не подходит для описания слоистых купратов, особенно на больших волновых векторах. Кроме того, обычно используемое приближение случайных фаз (ПСФ) нуждается в уточнениях, так как оно не учитывает в полной мере наличие сильных электронных корреляций, присущих купратам. Наша цель — определить вид экранированного кулоновского взаимодействия электронов в купратах с учетом трансляционной симметрии решетки исходя из гамильтониана t – J – G -модели. Для этой цели мы используем технику композитных (хаббардовских) операторов в сочетании с методами проектирования, которые считаются наиболее перспективными при описании электронного строения купратов [5].

СХЕМА РАСЧЕТА

В рамках диэлектрического формализма фурье-образ эффективного взаимодействия электронов проводимости определяется формулой [1–4]

$$V_{\vec{q}}^{ef} = G_{\vec{q}}^{ef} \left[1 - G_{\vec{q}}^{ef} \chi_{ch}^{tot}(\vec{q}, \omega = 0) \right], \quad (1)$$

где $G_{\vec{q}}^{ef} = G_{\vec{q}}^{\infty} + G_{\vec{q}}^{ph}$, где $G_{\vec{q}}^{ph}$ — косвенное (фрелиховское) взаимодействие через поле фононов. $G_{\vec{q}}^{\infty}$ — фурье-образ затравочного кулоновского взаимодействия. Он найден путем решения уравнения

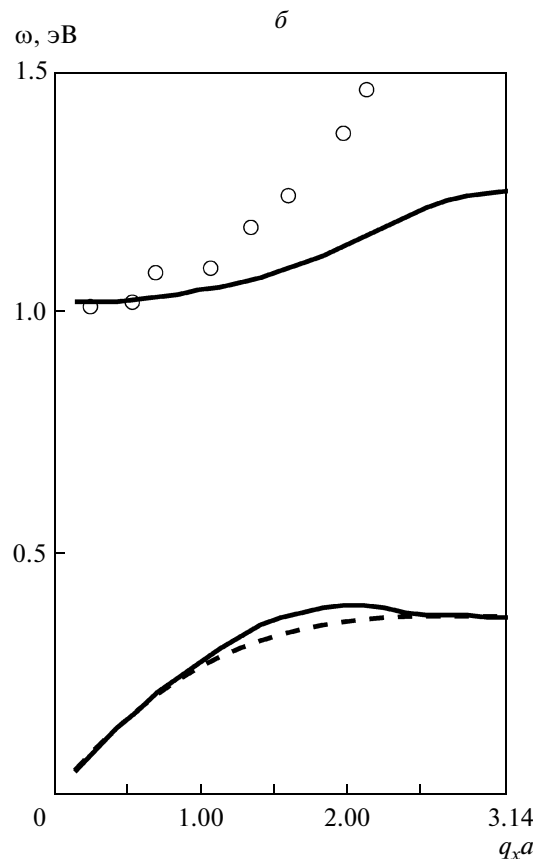
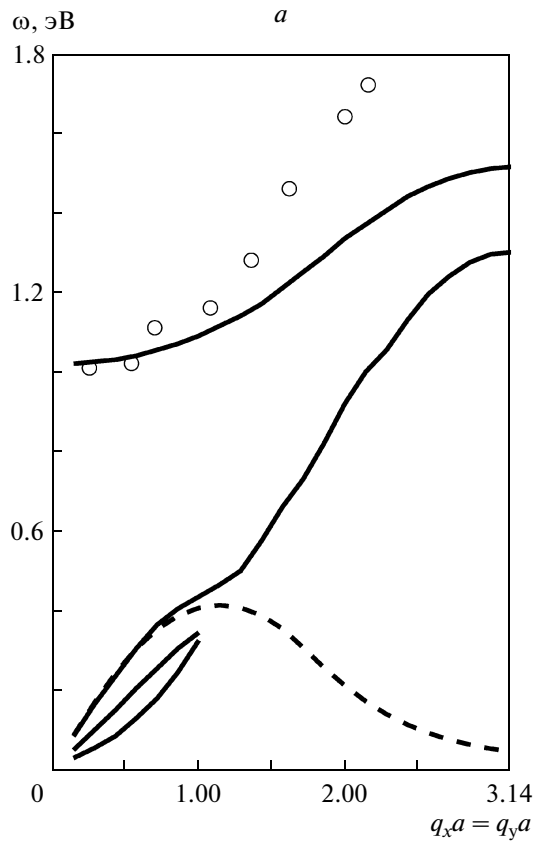
Пуассона методом конечных разностей и имеет вид [6]

$$G_{\vec{q}}^{\infty} = \frac{\pi e^2}{abc} \times \left[\varepsilon_a \frac{\sin^2(q_x a/2)}{a^2} + \varepsilon_b \frac{\sin^2(q_y b/2)}{b^2} + \varepsilon_c \frac{\sin^2(q_z c/2)}{c^2} \right]^{-1}, \quad (2)$$

где a, b, c — постоянные решетки. Ниже считаем, что $\varepsilon_a = \varepsilon_b = \varepsilon_{\infty}$, где ε_{∞} — высокочастотная диэлектрическая постоянная, обусловленная межзонными переходами [4]. В (1) $\chi_{ch}^{tot}(\vec{q}, \omega)$ — зарядовая восприимчивость. Она в общем случае зависит от частоты и определяется через корреляционную функцию типа плотность–плотность, которую мы находим методом функций Грина, используя однозонную модель с гамильтонианом вида [7, 8]

$$H_h = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} \psi_i^{pd,\sigma} \psi_j^{\sigma,pd} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \left[\bar{S}_i \bar{S}_j - \frac{n_i n_j}{4} \right] + \frac{1}{2} \sum_{i,j} G_{ij}^{\infty} \psi_i^{pd,pd} \psi_j^{pd,pd}. \quad (3)$$

Здесь $\psi_i^{pd,\sigma}(\psi_j^{\sigma,pd})$ — композитные операторы рождения (уничтожения) квазичастиц в зоне проводимости. Считается, что внедряемые дырки распределены по позициям кислорода в плоскости CuO_2 . При этом внутри каждой элементарной ячейки учитывается сильное обменное взаимодействие дырок меди и кислорода, способствующее образованию медь-кислородных синглетных состояний $|pd\rangle$. В математическом аспекте данная модель аналогична модели Хаббарда для верхней подзоны. Рассматриваются три возможных состояния дырок в элементарной ячейке номером i :



$\psi_i^{\uparrow,\uparrow}$, $\psi_i^{\downarrow,\downarrow}$ и $\psi_i^{pd,pd}$. $\psi_i^{pd,pd}$ — оператор числа медь-кислородных синглетных состояний. Второе слагаемое в (3) описывает суперобменное взаимодействие спинов меди. $n_i = \psi_i^{\uparrow,\uparrow} + \psi_i^{\downarrow,\downarrow}$ — оператор числа некомпенсированных спинов меди. Последнее слагаемое — кулоновское взаимодействие допированных дырок.

Фурье-образ оператора числа синглетных состояний $\psi_j^{pd,pd}$ определяется, как в [9]:

$$\psi_{\vec{q}} = \sum_j \psi_j^{pd,pd} \exp(-i\vec{q}\vec{R}_j) = N\delta_0\delta_{\vec{q},0} + e_{\vec{q}}, \quad (4)$$

где $e_{\vec{q}} = \sum_j e_j \exp(-i\vec{q}\vec{R}_j)$ соответствует модуляции плотности (неоднородная часть), N — число элементарных ячеек, $\delta_{\vec{q},0}$ — символ Кронекера. Модуляция плотности e_j на узле j входит в антикоммутатор композитных квазичастичных операторов следующим образом:

$$\{\psi_j^{pd,\uparrow}, \psi_j^{\uparrow,pd}\} = \psi_j^{\uparrow,\uparrow} + \psi_j^{pd,pd} = \frac{1+\delta_0}{2} + \frac{e_j}{2} + s_j^z. \quad (5)$$

Здесь и в (4) δ_0 — однородная часть концентрации дырок. Способ расщепления цепочек уравнений движения для квазичастичных операторов и функций Грина аналогичен тому, который использован при расчете динамической спиновой восприимчивости [10, 11]. В итоге получена следующая формула:

$$\chi_{ch}^{tot}(\vec{q}, \omega) = \frac{\chi_{\omega\vec{q}} \zeta_{t\omega\vec{q}} - \chi_{t\omega\vec{q}} \zeta_{\omega\vec{q}}}{(1 + \lambda_{\omega\vec{q}}) \zeta_{t\omega\vec{q}} - (\omega + \lambda_{k\vec{q}}) \zeta_{\omega\vec{q}}}. \quad (6)$$

Здесь для краткости записи используются обозначения

$$\begin{aligned} \chi_{\vec{k}\vec{q}} &= \frac{n_{\vec{k}+\vec{q}} - n_{\vec{k}}}{\omega + \varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}}}, \\ \lambda_{\vec{k}\vec{q}} &= \frac{M_{\vec{k}+\vec{q}} n_{\vec{k}+\vec{q}} - M_{\vec{k}} n_{\vec{k}} - \omega}{\omega + \varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}}}, \quad \zeta_{\vec{k}\vec{q}} = \frac{1}{\omega + \varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}}}, \\ \chi_{\omega\vec{q}} &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \chi_{\vec{k}\vec{q}}, \quad \lambda_{\omega\vec{q}} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \lambda_{\vec{k}\vec{q}}, \quad \zeta_{\omega\vec{q}} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \zeta_{\vec{k}\vec{q}}, \\ \chi_{t\omega\vec{q}} &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} (t_{\vec{k}+\vec{q}} - t_{\vec{k}}) \chi_{\vec{k}\vec{q}}, \quad \lambda_{t\omega\vec{q}} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} (t_{\vec{k}+\vec{q}} - t_{\vec{k}}) \lambda_{\vec{k}\vec{q}}, \\ \zeta_{t\omega\vec{q}} &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} (t_{\vec{k}+\vec{q}} - t_{\vec{k}}) \zeta_{\vec{k}\vec{q}}, \end{aligned}$$

Рис. 1. Рассчитанные графики плазмонных мод в двух направлениях зоны Бриллюэна при $q_z = 0$: *a* — вдоль диагонали, *b* — вдоль q_x , $q_y = 0$. Пунктирная линия соответствует границе континуума электронно-дырочных возбуждений. Символы соответствуют экспериментальным данным из [13].

$n_{\vec{k}} = (1 + \delta_0)f(\varepsilon_{\vec{k}})/2$ — числа заполнения, $f(\varepsilon_{\vec{k}})$ — функция Ферми, $\varepsilon_{\vec{k}}$ — энергия квазичастиц, $V_{\vec{q}} = G_{\vec{q}}^{\infty} - J_{\vec{q}}/4$, $M_{\vec{k}} = V_{\vec{q}} + t_{\vec{k}}'/2$ и $M_{\vec{k}+\vec{q}} = V_{\vec{q}} + t_{\vec{k}+\vec{q}}'/2$ — соответствуют эффективному потенциальному полю, в котором движутся квазичастицы, $J_{\vec{q}}$ — фурье-образ обменного взаимодействия. $t_{\vec{k}}' = \sum_j t_{ij}(1 - F_j^t)\exp(i\vec{k}\vec{R}_j)$ — редуцированный интеграл перескока. Параметр проектирования F_j^t определяется самосогласованно через δ_0 и спин-спиновые корреляционные функции $\langle S_0^z S_j^z \rangle$ следующим соотношением:

$$F_j^t = \frac{-4\langle S_0^z S_j^z \rangle}{[(1 + \delta_0) + 4\langle S_0^z S_j^z \rangle](1 + \delta_0)}. \quad (7)$$

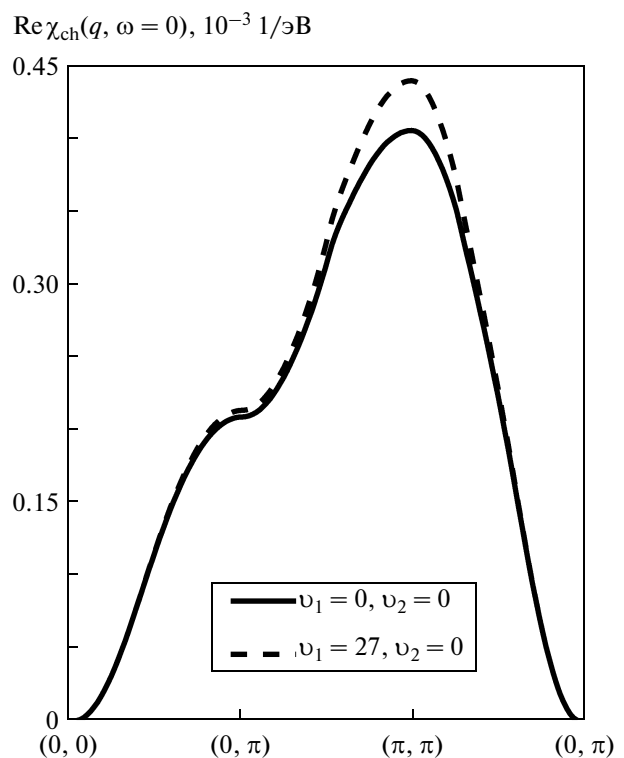
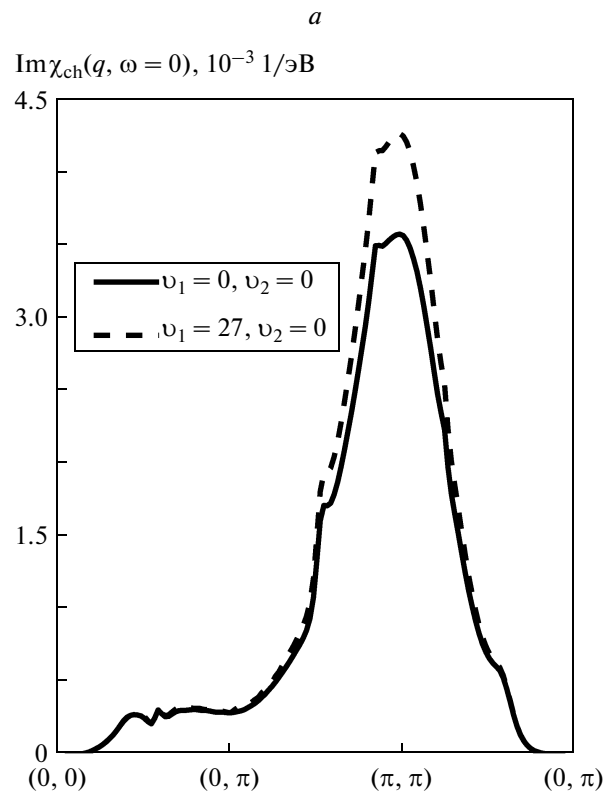
Интересно отметить, что это соотношение получилось точно таким же, как и при расчете спиновой восприимчивости [11, 12].

Закон дисперсии коллективных зарядовых возбуждений (плазмонов), рассчитанный из условия равенства нулю знаменателя зарядовой восприимчивости (6), приведен на рис. 1. Согласно с экспериментальными данными [13] получается, если принять (подстроить) значение параметра $c\varepsilon_x = c\varepsilon_y = 39 \text{ \AA}$. Наличие акустической плазменной моды с $q_z = 0$ — предсказание нашего расчета. Интересно отметить, что в рамках схемы ПСФ такая ветвь не получалась [14]. Важно подчеркнуть, что имеются области волновых векторов в зоне Бриллюэна, в которых эта акустическая ветвь располагается вне континуума электронно-дырочных возбуждений, поэтому такие возбуждения не подвержены затуханию Ландау.

Часть результатов расчета реальной и мнимых частей зарядовой восприимчивости по формуле (6) приведена на рис. 2. $G_{\vec{q}}^{\text{эф}}$ задавалось формулой (как в [15])

$$G_{\vec{q}}^{\text{эф}} = G_{\vec{q}}^{\infty} + 2 \sum_{ph} \frac{\Omega_{ph}}{\omega^2 - \Omega_{ph}^2} |v_{\vec{q},k}^{ph}|^2, \quad (8)$$

Рис. 2. Графики реальной и мнимой частей зарядовой восприимчивости при $q_z = 0$, $\omega = 0$ и $v_1 = 27 \text{ мэВ}$, $v_2 = 0$. Энергия квазичастиц $\varepsilon_{\vec{k}}$ и значение химического потенциала взяты в соответствии с данными ARPES ([17], набор параметров tb1), параметр обменного взаимодействия и значения спиновых корреляторов те же, что и при расчете спиновой восприимчивости [12], т.е. согласованы с данными по неупругому рассеянию нейтронов. Сплошные линии соответствуют расчетам без учета взаимодействия через поле фононов, пунктирные — с учетом его. Частоты дыхательной и полудыхательных фононных мод приняты равными 85 и 75 мэВ соответственно [18]. Роль изгибной моды оказалась незначительной.



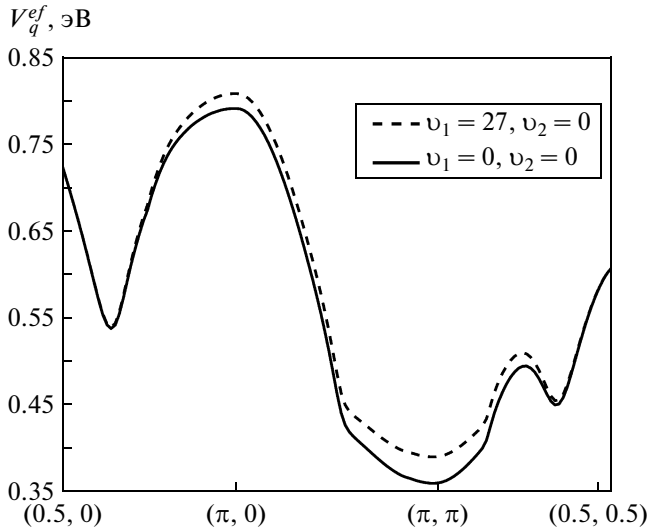


Рис. 3. График $V_q^{\text{эф}}$. Параметры те же, как на рис. 2.

где Ω_{ph} — частоты оптических фононных мод, $|v_{q,k}^{ph}|^2$ — соответствующие функции, описывающие связь колебаний ионов решетки с электронами проводимости. В частности, для наиболее важной полносимметричной кислородной моды (*breathing mode*):

$$|v_{\vec{k},\vec{q}}^{\text{breath}}|^2 = 4[v_1 + 2v_2\{\cos k_x + \cos k_y + \cos(k_x + q_x) + \cos(k_y + q_y)\}]^2 \left[\sin^2\left(\frac{q_x}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{q_y}{2}\right) \right]. \quad (9)$$

Значения параметров v_1 и v_2 были оценены ранее в [16] по изломам (кинкам) в дисперсии квазичастиц вблизи поверхности Ферми. Отметим, что учет взаимодействия через поле фононов при $v_2 = 0$ может быть проведен по формуле (6) путем замены $V_{\vec{q}} = G_{\vec{q}}^{\text{эф}} - J_{\vec{q}}/4$. Случай $v_2 \neq 0$ будет описан в отдельной работе. Однако из общих соображений ясно, что учет v_2 не приведет к существенным изменениям в рассчитанной дисперсии плазмонных мод. Высоочастотная плазмонная мода, представленная на рис. 1, связана, как и в приближении ПСФ, с дальнедействующим характером кулоновского взаимодействия. Акустические моды в области малых $\vec{q}$ напоминают поведение магнанных мод. Так как последние связаны с короткодействующими взаимодействиями, логично заключить, что рассчитанные нами акустические моды главным образом связаны с короткодействующими корреляциями. В пользу такой

интерпретации свидетельствует сопоставление наших результатов с полученными в [9] без учета дальнедействующего кулоновского взаимодействия. На графике эффективного взаимодействия на рис. 3, рассчитанного по формуле (1), области малых значений $\vec{q}$ не показаны. Асимптотическое поведение в этой области легко получают аналитически путем разложения функций (2) и (6) в ряды. Зависимость потенциала от волнового вектора и дисперсия плазмонных мод очень важны для выяснения анизотропии сверхпроводящей щели в купратах. В этой связи можно надеяться, что наши результаты окажутся полезными при обсуждении этой сложной проблемы.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ, гранта № 13-02-00492 а.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гинзбург В.Л., Киржниц Д.А. Проблема высокотемпературной сверхпроводимости. М.: Наука, 1977.
2. Leggett A.J. // Proc. Nat. Acad. Sci. USA. 1999. V. 96. P. 8365; Phys. Rev. Lett. 1999. V. 83. P. 392.
3. Максимов Е.Г., Долгов О.В. // УФН. 2007. Т. 177. С. 983–988; Maksimov E.G.; Kulic M.L., Dolgov O.V. // Adv. Condens. Matter. Phys. 2010. Article ID 423725.
4. Pashitskii E.A., Pentegov V.I. // Low Temperature Phys. 2008. V. 34. P. 113.
5. Plakida N.M. High-Temperature Cuprate Superconductors. Berlin: Springer, 2011.
6. Becca F., Tarquini M., Grilli M., Di Castro C. // Phys. Rev. B. 1996. V. 54. P. 12443.
7. Zhang F.C., Rice T.M. // Phys. Rev. B. 1988. V. 37. P. R3759.
8. Еремин М.В., Соловьянов С.Г., Варламов С.В. // ЖЭТФ. 1997. Т. 112. С. 1763.
9. Eremin M., Eremin I., Varlamov S. // Phys. Rev. B. 2001. V. 64. P. 214512.
10. Еремин М.В., Алеев А.А., Еремин И.М. // ЖЭТФ. 2008. Т. 133. С. 862.
11. Eremin M.V., Shigapov I.M., Eremin I.M. // Eur. Phys. J. B. 2012. V. 85. P. 131.
12. Eremin M.V., Shigapov I.M., Ho Thi Duyen Thuy // J. Phys.: Condens. Matter. 2013. V. 25. 345701.
13. Nucker N. et al. // Phys. Rev. B. 1991. V. 44. P. 7155.
14. Bill A., Morawitz H., Kresin V.Z. // Phys. Rev. B. 2003. V. 68. 144519.
15. Mahan G.D. // Many-Particle Physics. New York and London: Plenum Press, 1990. P. 561.
16. Еремин М.В., Малахов М.А., Сюняев Д.А. // Письма в ЖЭТФ. 2012. Т. 96. С. 110.
17. Norman M.R. // Phys. Rev. B. 2007. V. 75. P. 184514.
18. Reznik D. // Adv. Condens. Matter. Phys. 2010. Article ID 523549.