

УДК 538.945

АНТИФЕРРОМАГНИТНЫЙ ОБМЕН КАК МЕХАНИЗМ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ

Н. М. Плакида

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна
Лаборатория теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова

Обсуждается сверхпроводящее спаривание, обусловленное антиферромагнитным обменным взаимодействием электронов (дырок) в рамках двухзонной p - d -модели Хаббарда. Большая величина энергии возбуждения при антиферромагнитном обмене частиц из разных хаббардовских подзон подавляет эффекты запаздывания, что приводит к спариванию всех частиц в зоне проводимости с высокой температурой сверхпроводимости.

A superconducting pairing mediated by antiferromagnetic exchange of electrons (holes) is considered within the two-band p - d Hubbard model. Large excitation energy at antiferromagnetic exchange of particles from different Hubbard subbands suppresses retardation effects that result in the pairing of all the particles in the conduction band with high superconducting temperature.

Отличительной особенностью высокотемпературных медно-оксидных (купратных) сверхпроводников является сильное антиферромагнитное (АФМ) обменное взаимодействие (см., например, [1]). Обменная энергия связи двух дырок со спином $1/2$ на ионах меди $\text{Cu}(3d^9)$ и кислорода $\text{O}(2p^5)$ составляет величину порядка 1 эВ, а косвенное (через ионы кислорода) АФМ-обменное взаимодействие для спинов дырок на ионах меди — порядка 0,13 эВ. Если бы купраты имели трехмерную сетку связей для спинов меди, то АФМ-температура Нееля в них могла бы достигать рекордного значения $T_N \simeq 1500$ К. Ввиду же двумерного характера спиновой решетки в плоскости CuO_2 температура Нееля оказывается много меньше: $T_N \simeq 300$ – 400 К. Для сравнения отметим, что максимальная температура Нееля $T_N = 1040$ К наблюдается в сульфиде ванадия (VS).

Впервые на особую роль АФМ-обменного взаимодействия в купратах обратил внимание Андерсон [2], который предложил теорию резонирующих валентных связей в рамках однозонной t - J -модели. Однако использование приближения среднего поля (ПСР) в рамках теории вспомогательных бозонов в [2], как и дальнейшее развитие спион-холонной теории не дало убедительных доказательств в пользу АФМ-обмена как механизма высокотемпературной сверхпроводимости (см. [3]). Впоследствии сверхпроводящее

спаривание, обусловленное АФМ-обменом в рамках t - J -модели, рассматривалось в ряде работ (см. [4, 5] и цитированную там литературу). В настоящей работе мы рассмотрим более общую двухзонную p - d -модель и покажем, что, действительно, спаривание посредством АФМ-обмена имеет ряд особенностей, которые приводят к d -волновому спариванию с высокой T_c при малой чувствительности его к примесям, не разрушающим АФМ-корреляций.

Сильное АФМ-обменное взаимодействие в купратах обусловлено двумя факторами: большой величиной $pd\sigma$ -гибридизации, $t_{pd} \simeq 1,5$ эВ, для $3d$ -состояний меди и $2p$ -состояний кислорода и небольшой энергией расщепления их атомных уровней, $\Delta_{pd} \simeq 3$ эВ. В то же время сильные кулоновские корреляции для $3d$ -состояний меди, $U_d \simeq 8$ эВ, значительно увеличивают энергию двухдырочных $3d$ -состояний, за счет чего возникает диэлектрическая фаза в нелегированных купратах, а металлическая фаза появляется при легировании синглетной p - d дырочной зоны, лежащей ниже триплетной зоны. Эти особенности электронного спектра дырок в плоскости CuO_2 — основного структурного элемента купратов можно описать в рамках простой p - d -модели [6] для однодырочных d - и p -состояний с разностью энергий $\Delta_{pd} = \epsilon_p - \epsilon_d$, кулоновской одноузельной энергией ($U_d \gg \Delta_{pd}$) на узлах меди и параметром гибридизации t_{pd} . Поскольку одноузельная гибридизация достаточно велика и много больше межузельной, $V_{j=i} = V_0 \simeq 2t_{pd} \simeq \Delta_{pd} \gg |V_{j=i \pm a_{x/y}} \simeq 0,14V_0|$, необходимо сначала привести одноузельную часть гамильтониана p - d -модели к диагональному виду, а затем записать межузельную гибридизацию через операторы новых (перенормированных) одноузельных состояний. Учитывая лишь два низших уровня энергии: однодырочное d -состояние с перенормированной энергией $\tilde{\epsilon}_d$ и двухдырочное синглетное d - p -состояние, мы приходим к двухзонной модели Хаббарда [7]:

$$H = \epsilon_1 \sum_{i,\sigma} X_i^{\sigma\sigma} + \epsilon_2 \sum_i X_i^{22} + \sum_{i \neq j, \sigma} \{ t_{ij}^{11} X_i^{\sigma 0} X_j^{0\sigma} + t_{ij}^{22} X_i^{2\sigma} X_j^{\sigma 2} + 2\sigma t_{ij}^{12} (X_i^{2\bar{\sigma}} X_j^{0\sigma} + \text{h.c.}) \}. \quad (1)$$

Здесь введены операторы Хаббарда $X_i^{nm} = |in\rangle\langle im|$, описывающие переходы между одно- и двукратно заполненными дырочными состояниями $n, m = |0\rangle, |\sigma\rangle, |2\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle$, $\sigma = \pm 1/2$, $\bar{\sigma} = -\sigma$ с энергией $\epsilon_1 = \tilde{\epsilon}_d - \mu$ и $\epsilon_2 = 2\epsilon_1 + \Delta$ соответственно, где $\Delta = \tilde{\epsilon}_p - \tilde{\epsilon}_d$, μ — химический потенциал. Параметры $t_{ij}^{\alpha\beta}$ определяют эффективные интегралы переноса между узлами решетки ($i \neq j$) для однодырочной подзоны d -типа, $\alpha = 1$, и двухдырочной синглетной подзоны p - d -типа, $\alpha = 2$, и их гибридизацию. Как показывают расчеты [7], их значения невелики, так что эффективная ширина подзон W для двумерной решетки оказывается меньше энергии их расщепления $W = 8t_{\text{eff}} \simeq 2\Delta$ и гамильто-

ниан (1) соответствует пределу сильных корреляций в модели Хаббарда. Применение техники операторов Хаббарда, удовлетворяющих условиям полноты $X_i^{00} + X_i^{\sigma\sigma} + X_i^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} + X_i^{22} = 1$, позволяет строго учесть кинематическое ограничение отсутствия двукратного заполнения состояний на любом узле решетки i . В методе вспомогательных бозонов эти ограничения обычно учитываются в ПСП, что приводит к неконтролируемому нарушению статистики частиц и к потере кинематического взаимодействия между ними.

В пределе сильных корреляций межзонную гибридизацию можно исключить во втором порядке по параметру t_{ij}^{12} и свести гамильтониан (1) к эффективной однозонной t - J -модели [8] с обменным взаимодействием $J_{ij} = 4(t_{ij}^{12})^2/\Delta$. В рамках этой модели нетрудно получить систему уравнений для нормальной и аномальной компонент одночастичной функции Грина в ПСП и вывести уравнение для сверхпроводящей щели $\phi_\sigma(\mathbf{q})$ в синглетной подзоне [4]:

$$\begin{aligned} \phi_\sigma(\mathbf{q}) &= \frac{1}{N\chi_2} \sum_{\mathbf{k}} J(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \langle X_{-\mathbf{k}}^{2\bar{\sigma}} X_{\mathbf{k}}^{2\sigma} \rangle = \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} J(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \frac{\phi_\sigma(\mathbf{k})}{2E_2(\mathbf{k})} \tanh \frac{E_2(\mathbf{k})}{2T}, \quad (2) \end{aligned}$$

где квазичастичная энергия $E_2(\mathbf{k}) = [\Omega_2(\mathbf{k})^2 + |\phi_\sigma(\mathbf{k})|^2]^{1/2}$ и $\Omega_2(\mathbf{k})$ — спектр в нормальном состоянии. Параметр $\chi_2 = \langle X_i^{22} + X_i^{\sigma\sigma} \rangle = n/2$ определяет вес синглетной зоны в зависимости от концентрации дырок $n = 1 + \delta$.

Выход за рамки ПСП в [5] при учете собственно-энергетических поправок в функциях Грина позволил учесть достаточно сильное затухание квазичастичного спектра в t - J -модели и обусловленное им понижение T_c по сравнению с ПСП. При этом сверхпроводящее спаривание определялось не только мгновенным обменным взаимодействием, как в ПСП-уравнении (2), но обменом спиновыми флуктуациями, которые возникают за счет кинематического взаимодействия во втором порядке по интегралам переноса в одной подзоне. Прямое численное решение системы уравнений для щели с учетом запаздывания спин-флуктуационного взаимодействия позволило определить температуру T_c и зависимость сверхпроводящей щели от частоты и волнового вектора. Были получены достаточно высокие T_c и доказана d -волновая симметрия спаривания при стандартном в данной модели соотношении параметров.

Однако в t - J -модели АФМ-обмен играет роль мгновенного взаимодействия, как и в модели Бардина–Купера–Шриффера (БКШ). Учет эффектов запаздывания в рамках более общей теории Элиашберга показывает, что притяжение электронов, обусловленное обменом фононами, действует лишь в узком слое энергий порядка энергии фононов вблизи поверхности Ферми. Для

выяснения эффектов запаздывания в АФМ-обменном взаимодействии необходимо рассмотреть исходную двухзонную модель Хаббарда (1). Общие уравнения для матричной функции Грина от 4-компонентных операторов Хаббарда $\hat{X}_{i\sigma}^\dagger = (X_i^{2\sigma} X_i^{\bar{\sigma}0} X_i^{\bar{\sigma}2} X_i^{0\sigma})$ были выведены в работе [9], а решение их получено в [10]. Приведем здесь основные результаты этих исследований.

Используя проекционную технику в методе уравнений движения для функций Грина, нетрудно получить выражение для аномальных корреляционных функций, описывающих эффекты спаривания в ПСП. Рассматривая для определенности случай дырочного легирования $n = 1 + \delta > 1$, когда химический потенциал лежит в синглетной подзоне $\mu \simeq \Delta$ и $E_1 \simeq E_2 \simeq -\Delta$, находим уравнение для сверхпроводящей щели в виде $\chi_2 \phi_{ij,\sigma}^{22} = -2\sigma t_{ij}^{21} \langle X_i^{02} N_j \rangle$, где оператор числа частиц $N_j = \sum_{\sigma} X_j^{\sigma\sigma} + 2X_j^{22}$. Записывая здесь оператор уничтожения пары X_i^{02} в терминах стандартных ферми-операторов $c_{i\sigma} = X_i^{0\sigma} + 2\sigma X_i^{\bar{\sigma}2}$, мы получаем выражение $X_i^{02} = X_i^{0\downarrow} X_i^{1\uparrow} = c_{i\downarrow} c_{i\uparrow}$, которое показывает, что в ПСП спаривание происходит на одном узле, но в разных хаббардовских подзонах: $\langle X_i^{02} N_j \rangle = \langle c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} N_j \rangle$. Вычисление аномальной корреляционной функции с помощью соответствующей функции Грина $\langle\langle X_i^{02}(t) | N_j \rangle\rangle$ приводит к уравнению

$$\langle X_i^{02} N_j \rangle \simeq \sum_{m \neq i, \sigma} 2\sigma t_{im}^{12} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{1 - e^{-\omega/T}} \times \\ \times \frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\frac{1}{\omega - E_2 + i\varepsilon} \langle\langle X_i^{\sigma 2} X_m^{\bar{\sigma} 2} | N_j \rangle\rangle_{\omega+i\varepsilon} \right]. \quad (3)$$

При интегрировании по частоте ω здесь можно пренебречь экспоненциально малым вкладом полюса при энергии $E_2 \simeq -\Delta$, а также пренебречь эффектами запаздывания, полагая $\omega - E_2 \simeq \Delta$. В результате для аномальной корреляционной функции получаем $\langle X_i^{02} N_j \rangle \simeq -4(t_{ij}^{12}/\Delta)2\sigma \langle X_i^{\sigma 2} X_j^{\bar{\sigma} 2} \rangle$, где мы воспользовались двухузельным приближением, которое обычно применяется в t - J -модели, полагая $m = j$ в сумме в (3), и учли равенство для хаббардовских операторов $X_j^{\bar{\sigma} 2} N_j = 2X_j^{\bar{\sigma} 2}$. В этих приближениях мы приходим к уравнению для сверхпроводящей щели: $\chi_2 \phi_{ij,\sigma}^{22} = J_{ij} \langle X_i^{\sigma 2} X_j^{\bar{\sigma} 2} \rangle$, которое совпадает с уравнением (2) для t - J -модели. Аналогичные результаты получаются и в случае электронного легирования $n = 1 + \delta < 1$, когда химический потенциал лежит в однодырочной подзоне $\mu \simeq 0$.

Простейшая аналитическая оценка для максимальной температуры спаривания в уравнении (2) дает зависимость типа БКШ [11]: $T_c \simeq E_F(\delta) \times \exp(-1/\lambda)$, где $E_F(\delta)$ — энергия Ферми легированных носителей. Константа связи $\lambda \simeq JN(\delta)$ зависит от некоторой усредненной плотности дырочных состояний $N(\delta)$ при их концентрации δ .

В купратах, ввиду большой энергии обменного взаимодействия $J \simeq 0,13$ эВ, константа связи не должна быть очень малой. Полагая, например, $\lambda \simeq 0,3$, получим достаточно высокую температуру спаривания $T_c \simeq 170$ К за счет большой электронной энергии $E_F \simeq 0,35$ эВ. Численное решение самосогласованной системы уравнений при учете спин-флуктуационного спаривания, проведенное в [5] с учетом эффектов затухания в t - J -модели или в [10] в модели Хаббарда (1), подтверждает существование высоких T_c для d -волновой симметрии спаривания.

Таким образом, проведенный расчет в рамках двухзонной модели Хаббарда (1) показывает, что при спаривании двух электронов (дырок) за счет АФМ-обменного взаимодействия эффекты запаздывания не важны, и поэтому в спаривании могут участвовать все частицы в проводящей подзоне ввиду большой межзонной энергии в случае сильных корреляций: $\Delta \gg |t_{ij}^{\alpha\beta}|$. Это обстоятельство принципиально отличает обменный механизм спаривания от стандартных бозонных механизмов, при которых спаривание ограничивается узкой областью энергий порядка энергии бозона вблизи поверхности Ферми. Поскольку АФМ-обменное взаимодействие является характерной чертой мотт-хаббардовских систем с сильными электронными корреляциями и отсутствует в ферми-системах (см. обсуждение в [12]), можно утверждать, что специфический механизм спаривания в купратах обусловлен АФМ-обменом с аномально большой энергией взаимодействия.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Plakida N. M.* High-Temperature Superconductivity. Berlin: Springer, 1995.
2. *Anderson P. W.* // Science. 1987. V. 235. P. 1196.
3. *Anderson P. W.* The Theory of Superconductivity in the High- T_c Cuprates. Princeton: Princeton University Press, 1997.
4. *Plakida N. M., Yushankhai V. Yu., Stasyuk I. V.* // Physica C. 1989. V. 160. P. 80;
Yushankhai V. Yu., Plakida N. M., Kalinay P. // Physica C. 1991. V. 174. P. 401.
5. *Plakida N. M., Oudovenko V. S.* // Phys. Rev. B. 1999. V. 59. P. 16599.
6. *Emery V.* // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 58. P. 2794.
7. *Plakida N. M., Hayn R., Richard J.-L.* // Phys. Rev. B. 1995. V. 51. P. 16599.
8. *Zhang F. C., Rice T. M.* // Phys. Rev. B. 1988. V. 37. P. 3759.
9. *Plakida N. M.* // Physica C. 1997. V. 282–287. P. 1737.
10. *Plakida N. M. et al.* JINR Preprint E-17-2001-59. Dubna, 2001; Submitted to «Phys. Rev. B».
11. *Плакида Н. М.* // Письма в ЖЭТФ. 2001. Т. 74. С. 39.
12. *Anderson P. W.* // Adv. in Phys. 1997. V. 46. P. 3.