

Е. И. Шнейдер, С. Г. Овчинников

Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН
Академгородок, 50, Красноярск, 660036, Россия
E-mail: shneyder@iph.krasn.ru

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА АНИЗОТРОПНЫЙ СВЕРХПРОВОДЯЩИЙ ПАРАМЕТР ПОРЯДКА *

В работе рассмотрено влияние электрон-фононного взаимодействия на анизотропный сверхпроводящий параметр порядка $d_{x^2-y^2}$ -симметрии в системах с сильными электронными корреляциями. Показано, что в d -канале фононный вклад может как увеличивать, так и уменьшать полную константу связи, определяемую магнитным и фононным вкладами.

Введение

Интерес к исследованию высокотемпературной сверхпроводимости в купратах с одновременным учетом как магнитного, так и электрон-фононного механизмов (ЭФВ) спаривания объясняется следующим образом: с одной стороны, сильные электронные корреляции, связанное с ними антиферромагнитное обменное взаимодействие и d -тип симметрии параметра порядка указывают на возможность магнитных механизмов спаривания. С другой – электрон-фононное взаимодействие, помимо того, что оно присутствует во всех веществах, в слоистых купратах может оказаться достаточно сильным из-за особенностей их кристаллохимического строения [1]. Отметим, что внимание к традиционному механизму сверхпроводимости усилилось в последнее время благодаря обнаружению в данных соединениях сильных изотопических сдвигов [2] и изломов [3] в законах дисперсии электронов, наблюдаемых методами фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением.

Основное содержание

В работах [4; 5] было показано, что в режиме сильных электронных корреляций эффективный низкоэнергетический гамильтониан купратов с учетом электрон-фононного

взаимодействия может быть представлен следующим образом:

$$H = H_{t-J^*} + H_{el-ph-el}, \quad (1)$$

где H_{t-J^*} – гамильтониан t - J^* -модели [6; 7], включающий трехцентровые коррелированные перескоки, и $H_{el-ph-el}$ описывает взаимодействие электронов посредством испускания и поглощения фононов:

$$H_{el-ph-el} = \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} \sum_{\sigma\sigma'} V^{eff}(\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}) X_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\sigma 0} X_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^{\sigma' 0} X_{\mathbf{k}'}^{0\sigma'} X_{\mathbf{k}}^{0\sigma}.$$

Здесь $X_{\mathbf{k}}^{0\sigma}$ – оператор уничтожения дырки со спином σ и импульсом \mathbf{k} ; $V^{eff}(\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q})$ – матричный элемент эффективного электрон-фононного взаимодействия типа Фрелиха [8], который, в отличие от теории слабокоррелированных электронов, зависит от чисел заполнения зоны F :

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}}^{eff} = \sum_{\nu} \frac{g^{(\nu)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) g^{(\nu)}(\mathbf{k}', -\mathbf{q}) \omega_{\mathbf{q}, \nu}}{(t_{\mathbf{k}} - t_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})^2 F^2 - \omega_{\mathbf{q}, \nu}^2}. \quad (2)$$

$g^{(\nu)}(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ – матричный элемент ЭФВ электрона с исходным импульсом \mathbf{k} и фонона с импульсом \mathbf{q} , $\omega_{\mathbf{q}, \nu}$ – частота колебаний моды ν , $t_{\mathbf{k}}$ – Фурье-образ интеграла перескока.

* Работа выполнена при финансовой поддержке Программы Президиума РАН «Квантовая макрофизика», Комплексного интеграционного проекта СО РАН № 3.4 и Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 06-02-16100 и 06-02-90537-БНТЦ).

Е. И. Шнейдер благодарит за финансовую поддержку Фонд некоммерческих программ «Династия» и Международный центр фундаментальной физики в Москве, а также грант СО РАН «Лаврентьевский конкурс молодежных проектов».

Рассмотрим сверхпроводящее состояние типа Бардина-Купера-Шриффера [9] для системы с гамильтонианом (1). В обобщенном приближении Хартри-Фока [11] для параметра порядка в случае синглетных спариваний (*s*-, *d*-типы) получаем следующее выражение [5]:

$$\Delta_{\mathbf{k}}^{tot} = \Delta_{\mathbf{k}}^{tJ^*} + \Delta_{\mathbf{k}}^{el-ph}, \quad (3)$$

где $\Delta_{\mathbf{k}}^{tJ^*}$ имеет стандартный вид для параметра порядка в *tJ*-модели и описывает обменный механизм спаривания [10], и

$$\Delta_{\mathbf{k}}^{el-ph} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1+x}{4} (V_{-\mathbf{q},\mathbf{q},\mathbf{q}+\mathbf{k}}^{eff} + V_{-\mathbf{q},\mathbf{q},\mathbf{q}-\mathbf{k}}^{eff}) B_{\mathbf{q}} - \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{q},\mathbf{p}} \frac{3}{2(1+x)} (V_{-\mathbf{q},\mathbf{q},\mathbf{p}+\mathbf{k}}^{eff} + V_{-\mathbf{q},\mathbf{q},\mathbf{p}-\mathbf{k}}^{eff}) B_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{q},\mathbf{p}}. \quad (4)$$

Здесь $B_{\mathbf{q}} = \langle X_{-\mathbf{q}}^{0,-\sigma} X_{\mathbf{q}}^{0,\sigma} \rangle$ – аномальные средние, $c_{\mathbf{q},\mathbf{p}}$ – Фурье-образ спиновой корреляционной функции. Неожиданным результатом является то, что помимо фононного механизма спаривания в теории среднего поля появляется также спин-жидкостный вклад, обусловленный интерференцией магнитного и фононного механизмов. Иначе говоря, учет ближнего магнитного порядка приводит к тому, что в уравнении (4) возникает слагаемое, пропорциональное произведению константы ЭФВ $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}}^{eff}$ и спиновой корреляционной функции.

Уравнение (3) имеет сложную импульсную зависимость, и его дальнейший анализ в общем виде затруднителен. Для начала покажем, каким образом отразится на структуре данного уравнения предположение о том, что матричные элементы ЭФВ не зависят от исходного и переданного импульсов. Во-первых, в силу четности аномальных средних и спиновой корреляционной функции пропадет спин-жидкостный вклад. Во-вторых, будет потеряна важная информация о влиянии симметрии колебаний различных мод на сверхпроводящий потенциал спаривания. Дело в том, что для анизотропной щели *d*-типа взаимодействие электрона с фононами при больших переданных импульсах \mathbf{q} меняет знак параметра порядка на Ферми-поверхности и, таким образом, разрушает сверхпроводящую пару (рис. 1, б). Иначе говоря, ситуация принципиально отличается от изотропного *s*-спаривания, при котором взаимодействие элект-

трона с фононом не меняет знак параметра порядка на Ферми-поверхности при любом переданном импульсе (рис. 1, а).

Принимая сказанное выше во внимание, будем рассматривать зависимость матричных элементов ЭФВ от переданного импульса \mathbf{q} в явном виде. Заметим, что полный матричный элемент ЭФВ может быть представлен в виде суммы диагональной и недиагональной в узельном представлении компонент, при этом зависимость матричных элементов ЭФВ от входящего импульса \mathbf{k} возникает после Фурье-преобразования лишь для недиагональной компоненты ЭФВ. С целью упрощения дальнейшего изложения мы не учитываем недиагональный вклад в ЭФВ.

Согласно экспериментальным и теоретическим исследованиям купратов [12–18], в данных соединениях можно выделить следующие моды, наиболее сильно взаимодействующие с электронами: дыхательную, изгибную и апическую дыхательную (рис. 2). Указанные моды являются оптическими, поэтому мы пренебрегаем дисперсией $\omega_{\mathbf{q},\nu}$. Кроме того, учитывая, что ЭФВ пропорционально $M^{-1/2}$, где M – масса колеблющегося иона, пренебрегаем смещениями тяжелых атомов меди. Анализируя смещения атомов в каждой моде, находим соот-

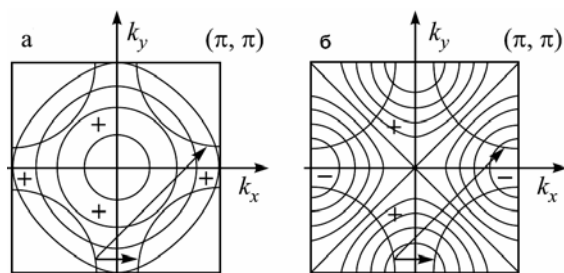


Рис. 1. Взаимодействие электронов с фононами не меняет знак параметра порядка для *s*-спаривания (а) и меняет для $d_{x^2-y^2}$ -спаривания (б)

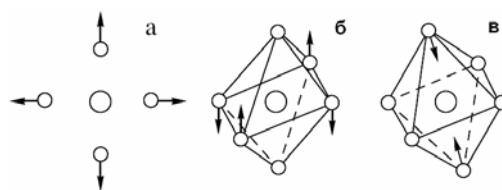


Рис. 2. Смещение атомов кислорода в CuO_6 -октаэдре для дыхательной (а), изгибной (б) и апической дыхательной мод (в)

ветствующие матричные элементы ЭФВ $g_{dia}^{(v)}(\mathbf{q})$ [4] для дыхательной моды:

$$g_{dia}^{(1)}(\mathbf{q}) = \frac{2iv_{dia}^{(1)}}{\sqrt{2M_o\omega_1}} \left[\varepsilon_x(O_x) \sin \frac{q_x a}{2} + \varepsilon_y(O_y) \sin \frac{q_y a}{2} \right]; \quad (5)$$

для изгибной:

$$g_{dia}^{(2)}(\mathbf{q}) = \frac{2v_{dia}^{(2)}}{\sqrt{2M_o\omega_2}} \left[\varepsilon_z(O_x) \cos \frac{q_x a}{2} + \varepsilon_z(O_y) \cos \frac{q_y a}{2} \right]; \quad (6)$$

для апической дыхательной:

$$g_{dia}^{(3)}(\mathbf{q}) = \frac{v_{dia}^{(3)}}{\sqrt{2M_o\omega_3}} \varepsilon_z(O_{ap}). \quad (7)$$

Здесь $v_{dia}^{(v)}$ – феноменологический параметр диагонального ЭФВ и ε_i – вектор поляризации.

Теперь можно записать уравнение (4) в случае $d_{x^2-y^2}$ -симметрии параметра порядка. Для этого матричные элементы (5–7) подставим в выражение (4) и распишем $V_{kk'q}^{eff}$ с учетом (2). При этом, полагая, что взаимодействие электронов с фононами ограничено узким слоем порядка дебаевской частоты ω_D вблизи поверхности Ферми, примем, что $V_{kk'q}^{eff} \approx -\sum_v g^{(v)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) g^{(v)}(\mathbf{k}', -\mathbf{q}) / \omega_{q,v}$.

Наконец, учтем, что для $d_{x^2-y^2}$ -симметрии параметра порядка аномальные

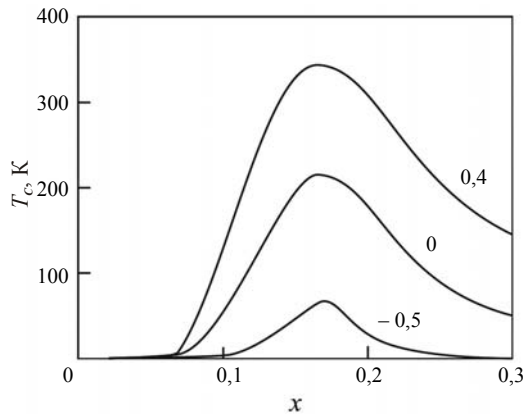


Рис. 3. Концентрационная зависимость критической температуры при различных значениях эффективного параметра ЭФВ G . Около кривых указано значение параметра G/J

средние удовлетворяют следующему условию: $\sum_p \cos p_x B_p = -\sum_p \cos p_y B_p$.

Тогда уравнение на параметр порядка примет вид:

$$\Delta_k^{tot,(d)} = -\frac{1}{N} \varphi_k \sum_q B_q \varphi_q \left(J \frac{1-x}{1+x} + G \frac{3(-c_{01}) + 0.5(1+x)^2}{(1+x)} \theta(|\xi_q - \mu| - \omega_D) \right), \quad (8)$$

где $\varphi_q = (\cos(\mathbf{q}_x) - \cos(\mathbf{q}_y))$, $\theta(z) = 0$, если $z > 0$, и $\theta(z) = 1$, если $z \leq 0$, c_{01} – спиновая корреляционная функция ближайших соседей, x – концентрация допированных носителей. Матричные элементы ЭФВ входят в уравнение (8) в виде комбинированного параметра G , знак которого определяет, подавляет или увеличивает ЭФВ полную константу связи: $G = (v_{dia}^{(2)})^2 / \omega_2 - (v_{dia}^{(1)})^2 / \omega_1$.

Как видно из приведенного выражения, изгибная мода способствует спариванию электронов, дыхательная мода понижает потенциал спаривания. Вклад апической дыхательной моды в d -канале пропадает, так как $g_{dia}^{(3)}(\mathbf{q}) = Const$, и правая часть уравнения (4) после суммирования по импульсу обращается в нуль в силу четности выражения. Происхождение вкладов различных колебаний очевидно после приведенного выше анализа. Так, например, матричный элемент для дыхательной моды пропорционален синусам и, следовательно, максимален при больших переданных импульсах таким образом, дыхательная мода в d -канале подавляет сверхпроводимость. Напротив, изгибная мода, для которой матричный элемент $g_{dia}^{(2)}(\mathbf{q})$ максимален при малых импульсах, способствует сверхпроводимости. Подчеркнем, что в случае изотропного s -спаривания константа связи, стоящая в круглых скобках уравнения (8), содержит сумму матричных элементов всех колебательных мод.

Выводы

Итак, полная константа связи λ_{tot} , описывающая сверхпроводящее спаривание в системах с сильными электронными корреляциями, определяется магнитным и фононным вкладами. При этом импульсная зависимость матричных элементов ЭФВ

приводит к тому, что в d -канале фононный вклад может как увеличивать, так и уменьшать λ_{tot} . В то время как в s -канале фононный и магнитный вклады суммируются. Чтобы наиболее ярко продемонстрировать полученный результат, приведем расчеты (рис. 3) концентрационной зависимости критической температуры сверхпроводящего перехода для трех различных значений эффективного параметра G .

Список литературы

1. Максимов Е. Г. Проблема высокотемпературной сверхпроводимости. Современное состояние // УФН. 2000. Т. 170, вып. 10. С. 1033–1061.
2. Gweon G.-H., Sasagawa T., Zhou S. Y. et al. An unusual isotope effect in a high-temperature superconductor // Letters to nature. 2004. Vol. 430. P. 187–190.
3. Zhou X. Z., Junren Shi., Yoshida T. et al. Multiple bosonic mode coupling in electron self-energy of $(\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x)\text{CuO}_4$ // Phys. Rev. Lett. 2005. Vol. 95. P. 117001–117004.
4. Овчинников С. Г., Шнейдер Е. И. Эффективный гамильтониан для ВТСП купратов с учетом ЭФВ взаимодействия в режиме сильных корреляций // ЖЭТФ. 2005. Т. 128. С. 974–986.
5. Шнейдер Е. И., Овчинников С. Г. Фононный и магнитный механизмы спаривания в высокотемпературных сверхпроводниках в режиме сильных корреляций // Письма в ЖЭТФ. 2006. Т. 128, вып. 5. С. 974–986.
6. Chao K. A., Spalek J., Oleś A. M. Kinetic exchange interaction in a narrow S-band // J. Phys. C: Sol. State Phys. 1977. Vol. 10. P. L271–L276.
7. Булаевский Л. Н., Нагаев Э. Л., Холмский Д. И. Новый тип автолокализованного состояния электрона проводимости в антиферромагнитном полупроводнике // ЖЭТФ. 1968. Т. 54, вып. 5. С. 1562–1567.
8. Fröhlich H. Theory of the Superconductivity State. I. The Ground state at the absolute zero of temperature // Phys. Rev. 1950. Vol. 79. No. 4. P. 845–856.
9. Bardeen J., Cooper L. N., Schrieffer J. R. Theory of superconductivity // Phys. Rev. B. 1957. Vol. 108. No. 5. P. 1175–1204.
10. Yushankhai V. Yu., Vujicic, Zankula R. B. Singlet pairing in the single-band Hubbard model: contributions of second order in t/U // Phys. Lett. A. 1990. Vol. 151. P. 254–258.
11. Тябликов С. В. Методы квантовой теории магнетизма. М.: Наука, 1975. С. 368–405.
12. Pintschovius L. Electron-phonon coupling effects explored by inelastic neutron scattering // Phys. Stat. Sol. B. 2005. Vol. 242. P. 30–50.
13. Shunji Sugai. Phonon raman scattering in $(\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x)\text{CuO}_4$ single crystals // Phys. Rev. B. 1988. Vol. 39. P. 4306–4315.
14. McQueeney R. J., Egami T., Shirane G. et al. Wide and asymmetric oxygen bond-stretching phonons in $\text{La}_{1.85}\text{Sr}_{0.15}\text{CuO}_4$ // Phys. Rev. B. 1996. Vol. 54. P. R9689–R9692.
15. Mihailovic D., Foster M. C., Voss K. F. et al. Anomalous shifts of oxygen mode frequencies in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ and $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{Ca}_{1-x}\text{Gd}_x\text{Cu}_2\text{O}_8$ studied by photo-induced infrared absorption and Raman spectroscopy // Phys. Rev. B. 1991. Vol. 44. P. 237–241.
16. Pyka N., Reichardt W., Pintschovius L. et al. Superconductivity-induced phonon softening in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ observed by inelastic neutron scattering // Phys. Rev. Lett. 1993. Vol. 70. P. 1457–1460.
17. Song J., Annett J. F. Electron-phonon coupling and d-wave superconductivity in the cuprates // Phys. Rev. B. 1995. Vol. 51. P. 3840–3849.
18. Nunner T. S., Schmailian J., Bennemann K. N. Influence of electron-phonon interaction on spin-fluctuation-induced superconductivity // Phys. Rev. B. 1999. Vol. 59. P. 8859–8868.