

## КОНФЕРЕНЦИИ И СИМПОЗИУМЫ

## Научная сессия Отделения общей физики и астрономии Российской академии наук

(27 октября 1999 г.)

27 октября 1999 г. в Институте физических проблем им. П.Л. Капицы РАН состоялась научная сессия Отделения общей физики и астрономии Российской академии наук. На сессии были заслушаны доклады:

1. **Гавричков В.А., Кузьмин Е.В., Овчинников С.Г.** (Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Красноярский государственный университет, Красноярск) *Электронная структура и симметрия параметра порядка высокотемпературных сверхпроводников.*

2. **Головашкин А.И., Русаков А.П.** (Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Московский институт стали и сплавов) *Экспериментальные исследования особенностей тепловых и электронных характеристик  $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{BiO}_3$  и других перовскитоподобных оксидных ВТСП-систем.*

Краткие содержания докладов публикуются ниже.

PACS numbers: 71.27 + a, 74.25Jb

### Электронная структура и симметрия параметра порядка высокотемпературных сверхпроводников

В.А. Гавричков, Е.В. Кузьмин, С.Г. Овчинников

#### 1. Введение

Электронная структура высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) на основе слоистых купратов является ключом к описанию не только их сверхпроводящих свойств, но и аномальных свойств выше  $T_c$ . В последние годы достигнут существенный прогресс в этой области (см. обзоры [1–5]). Наиболее прямую информацию о зонной структуре дают фотоэлектронные спектры с угловым разрешением (ARPES) [3], которые показали, что для оптимально и сильно допированных сверхпроводников форма поверхности Ферми близка к рассчитанной в зонной теории методом функционала плотности, хотя ширина зон в эксперименте в несколько раз меньше теоретических. С уменьшением концентрации дырок в области слабо допированных составов изменяется топология поверхности Ферми, появляется псевдощель выше  $T_c$ . При дальнейшем понижении концентрации дырок происходит переход металл–диэлектрик с образованием антиферромагнитного диэлектрика. Для адекват-

ного описания этих явлений необходим учет сильных электронных корреляций.

Настоящий доклад состоит из двух частей. В первой сообщаются результаты расчета электронной структуры оксидов меди в обобщенном методе сильной связи (ОМСС) с явным учетом сильных корреляций в рамках многозонной  $p-d$ -модели. Вторая часть посвящена анализу симметрии сверхпроводящей щели в сильно коррелированной электронной системе.

#### 2. Зонная структура оксидов меди в обобщенном методе сильной связи

Модель Хаббарда и ее обобщение для  $\text{CuO}_2$ -слоев — трехзонная  $p-d$ -модель позволяют учитывать сильные электронные корреляции в системе  $d_{x^2-y^2}$ -дырок меди и их перескок через кислород. В то же время имеется ряд указаний на немалый вклад  $d_{z^2}$ -состояний меди (спектры XAS [6] и EELS [7]). Поэтому нами давно развивается многозонная  $p-d$ -модель, учитывающая  $d_{x^2-y^2}$ - и  $d_{z^2}$ -орбитали меди и  $p$ -орбитали кислорода в  $\text{CuO}_2$ -плоскостях [8]. Недавно эта модель была обобщена с учетом апиических кислородов [9]. Для оксидов меди характерна конкуренция двух энергий: сильные внутриаомные взаимодействия  $d$ -электронов и сильная медь-кислородная гибридизация. Первая легко учитывается в локальном атомном подходе, а вторая тривиально учитывается при переходе в  $k$ -пространство в одноэлектронном подходе. Для одновременного рассмотрения этих противоположных тенденций нами был предложен ОМСС [8]. В этом методе решетка разбивается на кластеры, для которых гамильтониан модели точно диагонализуеться и строятся точные многоэлектронные молекулярные орбитали  $E_i(n)$ , а взаимодействие между кластерами учитывается по теории возмущений. В отличие от обычного метода сильной связи, где зоны возникают благодаря дисперсии одноэлектронных молекулярных орбиталей (МО), в ОМСС зоны фермиевских квазичастиц возникают вследствие дисперсии одноэлектронных резонансов  $\Omega_{ij} = E_i(n+1) - E_j(n)$ , где  $n$  — число электронов в кластере,  $i, j$  — совокупность остальных квантовых чисел (спин, орбитальный момент и т.д.). Изначально в работе [8]  $\text{CuO}_2$ -решетка разбивалась на две подрешетки из линейных кластеров  $\text{CuO}_2$ . Главное достоинство такого разбиения в том, что каждый атом принадлежит только одному кластеру, поэтому МО соседних ячеек ортогональны. В дальнейшем в работах [10–12] анало-

гичный метод был применен для расчета более простой трехзонной  $p-d$ -модели с разбиением  $\text{CuO}_2$ -плоскости на кластеры  $\text{CuO}_4$ . Такое разбиение физически предпочтительнее, так как кластер совпадает с элементарной ячейкой и имеет правильную симметрию, но технически сложнее, поскольку возникает проблема неортогональности соседних МО (каждый атом кислорода одновременно принадлежит двум ячейкам). Тем не менее эта проблема была решена с помощью явного построения функций Ванье [13]. Аналогичная процедура в многозонной  $p-d$ -модели с учетом  $d_{x^2-y^2}$ - и  $d_{z^2}$ -орбиталей меди была разработана в [14, 15], что позволило нам выполнить расчеты зонной структуры в ОМСС с использованием симметричных  $\text{CuO}_4$ -ячеек.

Гамильтониан многозонной  $p-d$ -модели запишем в виде обобщенной модели Хаббарда:

$$H = \sum_{i\sigma} \varepsilon_i n_{i\sigma} + \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} t_{ij} (c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + \text{H.c.}) + \sum_i U_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma\sigma'} V_{ij} n_{i\sigma} n_{j\sigma'}, \quad (1)$$

где  $c_i = d_{x^2-y^2}$ ,  $d_{z^2}(p_x, p_y, p_z)$ , если индекс  $i$  указывает на узел решетки, занятый атомом меди (кислорода),  $\varepsilon_i$  — энергии соответствующих атомных орбиталей с учетом кристаллического поля,  $U_i = U_d$  или  $U_p$ , соответственно. Двухцентровые матричные элементы  $t_{ij}$  и  $V_{ij}$  означают перескоки и кулоновское взаимодействие медь–кислород ( $t_{pd}$ ,  $V_{pd}$ ) и кислород–кислород ( $t_{pp}$ ,  $V_{pp}$ ),  $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma}$ .

Точная диагонализация (1) для кластера  $\text{CuO}_4$  проводится отдельно в различных секторах гильбертова пространства, отвечающих числу дырок  $n_h$  в ячейке. В вакуумном секторе  $n_h = 0$  имеем одно состояние  $|0\rangle = |d^{10}p^6\rangle$ . В секторе  $n_h = 1$  получаются обычные однодырочные МО симметрии  $a_{1g}$  и  $b_{1g}$ , причем  $b_{1g}$  МО есть следствие гибридизации состояний  $d_{x^2-y^2}$  с кислородными  $p$ -орбиталями, а  $a_{1g}$  МО возникает как результат смешивания  $d_{z^2}$ -состояний меди с кислородными  $p$ -состояниями. Апиические  $p_z$ -орбитали примешиваются к  $a_{1g}$  МО [9]. В двухдырочном секторе  $n_h = 2$  имеется совокупность спиновых синглетов и триплетов разной орбитальной симметрии, основной и ближайший возбужденный термы имеют симметрию  ${}^1A_{1g}$  и  ${}^3B_{1g}$ . Синглет Жанга–Райса [13] дает существенный, но не единственный вклад в  ${}^1A_{1g}$  МО. В то время, как в упрощенной трехзонной  $p-d$ -модели триплет Жанга–Райса имеет высокую энергию относительно синглета, в реалистичной многозонной модели триплет  ${}^3B_{1g}$  лежит достаточно близко к синглету, и даже возможен кроссовер между ними [16–18]. Эта близость сильно влияет на характер закона дисперсии вблизи потолка валентной зоны. Зонная структура недопированного  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  в антиферромагнитной фазе показана на рис. 1, где пустая зона проводимости обусловлена дисперсией  $a_{1g}$  и  $b_{1g}$  МО (резонансов между вакуумным  $n_h = 0$  и одночастичными  $n_h = 1$  термами), а заполненная валентная зона формируется за счет дисперсии резонансов между однодырочными и двухдырочными МО. Большое число возбужденных двухдырочных МО определяет сложную структуру валентной зоны. Подчеркнем, что возникающие в ОМСС зоны есть зоны квазичастиц. Эффекты сильных электронных корреляций приводят к необычным свойствам этих зон: число состояний в каждой зоне

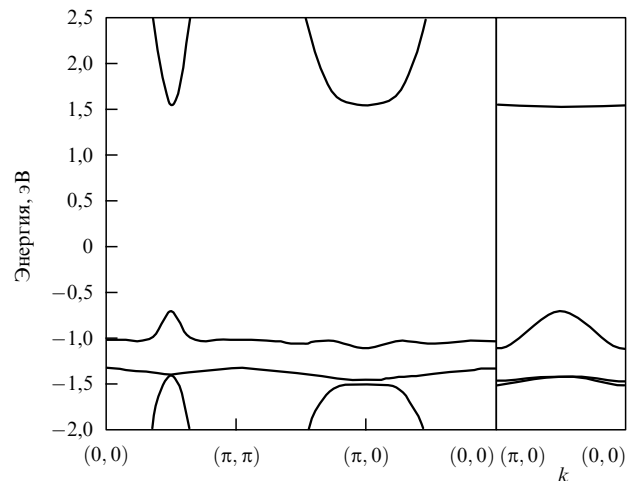


Рис. 1. Зонная структура недопированного антиферромагнитного  $\text{CuO}_2$ -слоя, соответствующего  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  или  $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ .

зависит от концентрации электронов (разумеется, с сохранением полного числа состояний), внешних полей и температуры за счет так называемых факторов заполнения  $F_{ij} = n_i + n_j$ , где  $n_i, n_j$  — числа заполнения соответствующих начальных и конечных состояний для резонанса  $\Omega_{ij}$  [19]. Отметим, что закон дисперсии вблизи потолка валентной зоны находится в хорошем согласии с данными ARPES для другого недопированного оксида  $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$  [20], являющегося, как и  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ , антиферромагнитным диэлектриком (рис. 2).

При дырочном допировании  $n_h = 1 + x$  происходит перераспределение чисел заполнения, вычисляемых из уравнения самосогласования для химического потенциала, так что основной двухдырочный терм заполняется с вероятностью  $x$ , и ненулевой спектральный вес  $\sim x$  приобретают новые резонансы внутри диэлектрической щели [21]. Дисперсия этих резонансов дает примесную зону, перекрывающуюся с потолком валентной зоны (рис. 3). Наиболее сильные изменения с допированием происходят вблизи направления  $X\bar{M}$ , т.е. линии  $(\pi, 0) - (\pi, \pi)$ , где по данным ARPES открывается щель

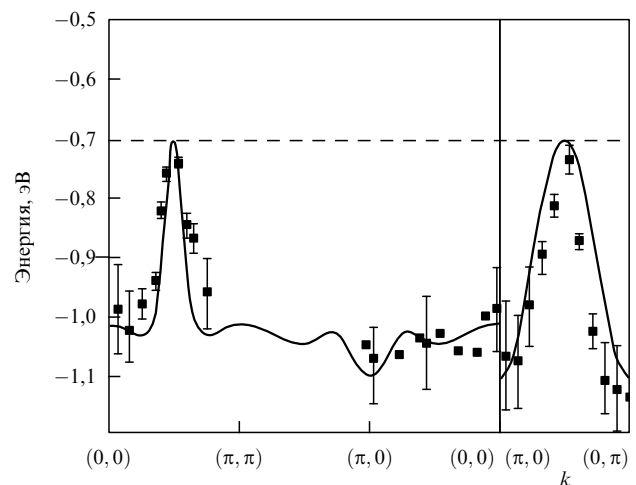


Рис. 2. Закон дисперсии вблизи потолка валентной зоны недопированного антиферромагнитного  $\text{CuO}_2$ -слоя и его сравнение с данными ARPES [20].

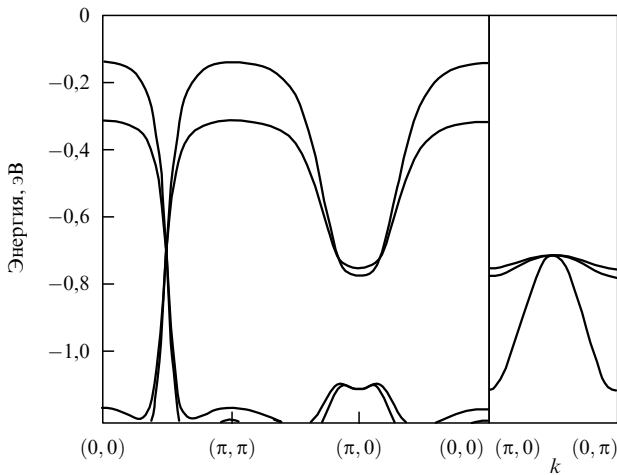


Рис. 3. Зонная структура  $\text{CuO}_2$  с концентрацией дырок  $n_h = 1 + x$ , соответствующей  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ , для  $x = 0,10$  (сплошная линия) и  $x = 0,15$  (пунктир).

на поверхности Ферми в системе  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_{1-x}\text{Dy}_x\text{Cu}_2\text{O}_{8+x}$  [22]. В рамках ОМСС были также рассчитаны концентрационные зависимости рентгеновских спектров поглощения (XAS) и спектров фотоэлектронной эмиссии (XPS), выявившие существование высокоэнергетических спутников (пик С на рис. 4) [23]. Хотя расчеты в ОМСС обладают принципиальным недостатком в том отношении, что они содержат большое число параметров гамильтониана, которые должны вычисляться отдельно, либо определяться из эксперимента, с концептуальной точки зрения этот подход позволил реализовать синтез идей Ландау и Хаббарда, а именно, ввести фермиевские квазичастицы как локальное обобщение квазичастиц в теории ферми-жидкости и вычислять их

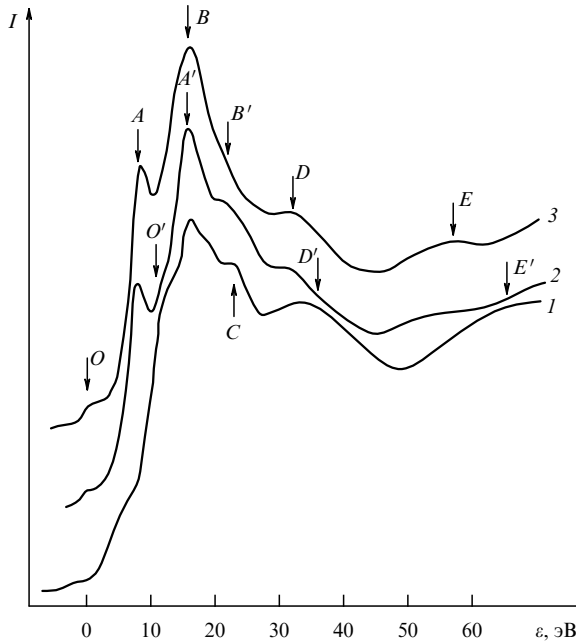


Рис. 4. Рентгеновский Cu K-спектр поглощения  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ : 1 — эксперимент, 2 — теория с учетом сильных корреляций, 3 — одноэлектронная теория [23]. Пик С есть в эксперименте, но отсутствует в одноэлектронной теории.

дисперсию с явным учетом сильных электронных корреляций.

### 3. Симметрия сверхпроводящего параметра порядка в сильно коррелированных электронных системах

Вопрос о симметрии сверхпроводящего состояния долго оставался открытым, как и вопрос о микроскопическом механизме высокотемпературной сверхпроводимости. К настоящему времени накоплен огромный экспериментальный материал, свидетельствующий в пользу d-симметрии щели для дырочных сверхпроводников (см. обзоры [24, 25]). Такая симметрия находит естественное объяснение в рамках спин-флуктуационного механизма спаривания. В то же время для электронных сверхпроводников  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$  спаривание, по-видимому, имеет симметрию s-типа [26, 27]. Наконец, единственный сверхпроводящий оксид, не содержащий меди и имеющий ту же слоистую структуру,  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ , имеет триплетную щель p-симметрии [28]. Триплетное спаривание p-симметрии возникает в зонной теории вследствие обмена спиновыми флуктуациями ферромагнитного типа [29]. Нами был проведен анализ симметрии сверхпроводящей щели в простейшей модели, учитывающей сильные электронные корреляции и обменное взаимодействие ближайших соседей антиферромагнитного (J) и ферромагнитного (I) типов. По аналогии с t-J-моделью эта модель была названа t-J-I-моделью [30]. Антиферромагнитный обмен, как обычно для оксидов, есть косвенный обмен через кислород, а ферромагнитный может возникнуть благодаря прямому катион-катионному перекрытию орбиталей. Для купратов характерна  $\sigma$ -связь  $d_{x^2-y^2}$ -p вблизи уровня Ферми, при которой  $J \gg I$ , а для рутенатов характерна  $\pi$ -связь  $d_{xy}$ -p, допускающая значительное прямое перекрытие  $d_{xy}$ -орбиталей соседних ионов  $\text{Ru}^{2+}$ , для которых выполняется условие  $I \gg J$ . В теории среднего поля для сильно коррелированных электронов, помимо обычных в теории БКШ уравнений самосогласования для щели и химического потенциала, возникает дополнительное условие "констрейна" — запрета на появление локальных двухчастичных состояний. Это условие в рамках t-J-I-модели имеет вид

$$\frac{1}{N} \sum_k \langle X_{-k}^{0\downarrow} X_k^{0\uparrow} \rangle = 0. \tag{2}$$

Этому условию, как показано в [31], не удовлетворяет спаривание s-типа. В то же время для щелей p- и d-типа условие (2) выполняется автоматически. В рамках t-J-I-модели возможные решения для щели имеют вид

$$\Delta_{kl} = \lambda_l \psi_l(k) \Delta_l,$$

где  $l = 1$  и  $l = 2$  для p- и d-спариваний,  $\lambda_p = I/t$ ,  $\lambda_d = (2J - I)/t$ ,

$$\Psi_p(k) = \frac{1}{2} (\sin k_x + \sin k_y), \quad \Psi_d(k) = \frac{1}{2} (\cos k_x - \cos k_y).$$

Уравнения на щель в p- и d-каналах спаривания имеют одинаковый вид:

$$\frac{1}{\lambda_l} = \frac{1}{N} \sum_p \frac{|\psi_l(p)|^2}{2E_{pl}} \tanh \frac{E_{pl}}{2T}, \tag{3}$$

где  $E_{pl}$  — обычный щелевой спектр возбуждений БКШ-типа. Несмотря на похожий вид уравнений (3) для p- и d-

типа спаривания, решения ведут себя неодинаково. Причина различия в угловых зависимостях  $|\psi_l(p)|^2$ . Если бы щель была изотропной, т.е.  $|\psi_l(p)| = 1$ , то основной вклад в интеграл по зоне Бриллюэна давала бы узкая область энергий вблизи особенности Ван Хофа. Для щели d-типа угловая зависимость сохраняет большой вклад особенности Ван Хофа, в то время как угловая зависимость в р-канале такова, что сингулярность Ван Хофа сокращается. По этой причине при численном решении уравнения (3)  $T_c(p) \ll T_c(d)$  даже при  $\lambda_p = \lambda_d$  (рис. 5). Так, для типичных в случае купратов и рутенатов параметров  $\lambda_p = \lambda_d = 0,5$  и  $t = 0,1$  эВ получаем при оптимальном допировании  $T_c(p) \approx 2,5$  К и  $T_c(d) \approx 70$  К.

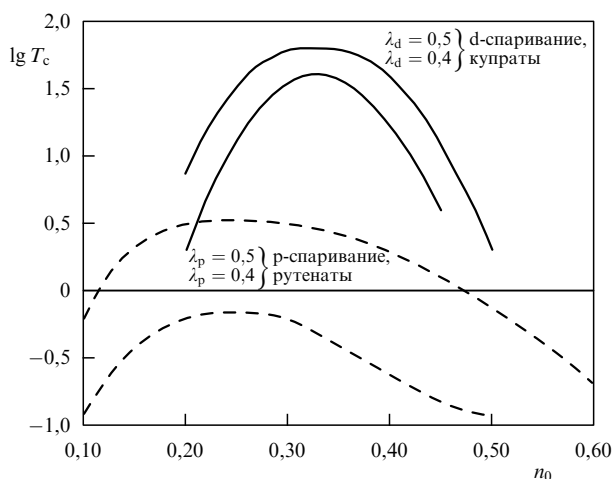


Рис. 5. Сравнение концентрационных зависимостей  $T_c$  в р- и d-каналах спаривания. Здесь  $\lambda_p = I/t$ ,  $\lambda_d = (2J-I)/t$ .

Работа выполнена при поддержке Красноярского краевого фонда науки, грант 8Ф0032.

## Список литературы

1. Гинзбург В Л, Максимов Е Г *СФХТ* **5** 1543 (1992)
2. Dagotto E et al. *Phys. Rev. Mod. Phys.* **66** 763 (1994)
3. Shen Z X, Dessau D S *Phys. Rep.* **253** 1 (1995)
4. Локтев В М *ФНТ* **22** 3 (1996)
5. Овчинников С Г *УФН* **167** 1043 (1997)
6. Bianconi A et al. *Physica C* **162–164** 209 (1990)
7. Romberg H et al. *Phys. Rev. B* **41** 2609 (1990)
8. Ovchinnikov S G, Sandalov I S *Physica C* **161** 607 (1989)
9. Гавричков В А, Овчинников С Г *ФТТ* **40** 184 (1998)
10. Hefferson J H *Physica B* **165–166** 1013 (1990)
11. Lovtsov S V, Yushankhai V Yu *Physica C* **179** 159 (1991)
12. Jefferson J H, Eshes H, Feiner L F *Phys. Rev. B* **45** 7959 (1992)
13. Zhang F C, Rice T M *Phys. Rev. B* **37** 3759 (1988)
14. Feiner L F, Jefferson J H, Raimondi R *Phys. Rev. B* **53** 8751 (1996)
15. Feiner L F, Jefferson J H, Raimondi R *Phys. Rev. B* **53** 8774 (1996)
16. Kamimura H, Eto M *Jpn. J. Phys. Soc.* **59** 3053 (1990)
17. Eskes H, Tjeng L H, Sawatzky G A *Phys. Rev. B* **41** 288 (1990)
18. Овчинников С Г *Письма в ЖЭТФ* **64** 23 (1996)
19. Зайцев Р О *ЖЭТФ* **70** 1100 (1976)
20. Wells V O et al. *Phys. Rev. Lett.* **74** 964 (1995)
21. Овчинников С Г *ЖЭТФ* **102** 534 (1992)
22. Marshall D S et al. *Phys. Rev. Lett.* **76** 4841 (1996)
23. Аврамов П В, Овчинников С Г *ЖСХ* **40** 131 (1999)
24. Scalapino D J *Phys. Rep.* **250** 329 (1995)
25. Изюмов Ю А *УФН* **169** 225 (1999)
26. Wu D H et al. *Phys. Rev. Lett.* **70** 85 (1993)
27. Stadlober B et al. *Phys. Rev. Lett.* **74** 4911 (1995)
28. Rice T M, Sirist M J. *Phys.: Condens. Matter* **7** 643 (1995)

29. Ахиезер А И, Померанчук И Я *ЖЭТФ* **36** 859 (1959)
30. Кузьмин Е В, Овчинников С Г, Бакланов И О *ЖЭТФ* **116** 655 (1999)
31. Plakida N M, Yushankhai V Yu, Stasynk I V *Physica C* **160** 80 (1989)

PACS numbers: 74.25.-q, 74.72-h

## Экспериментальные исследования особенностей тепловых и электронных характеристик $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{BiO}_3$ и других перовскитоподобных оксидных ВТСП-систем

А.И. Головашкин, А.П. Русаков

Основные свойства купратных высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) связывают с антиферромагнитным (АФ) упорядочением ионов Cu — волной спиновой плотности (ВСП). Однако в последнее время был обнаружен ряд аномальных свойств, которые не удается объяснить влиянием только такого упорядочения. С целью выяснения возможной причины этих аномалий в настоящей работе исследовались некупратные ВТСП-системы  $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{BiO}_3$  (ВКВО) и  $\text{BaPb}_x\text{Bi}_{1-x}\text{O}_3$  (ВРВО), в которых обнаружены аналогичные аномалии.

Нейтроннографические исследования показали [1], что при легировании происходит сильное смягчение высокочастотной части фоновых спектров ВКВО. Изучение дисперсионных кривых  $\omega(\mathbf{Q})$  показало [2–4], что при легировании в металлической фазе ВТСП аномально сильное смягчение испытывают продольные оптические высокочастотные фононы  $\omega_{\text{LO}}(\mathbf{Q})$ . Для волновых векторов  $\mathbf{Q}$  вблизи границы зоны Бриллюэна частоты  $\omega_{\text{LO}}(\mathbf{Q})$  становятся меньше поперечных оптических частот  $\omega_{\text{TO}}(\mathbf{Q})$  ("ω<sub>LO</sub> — аномалия"). Во всех исследованных ВТСП — ВКВО,  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  (LSCO),  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$  (YBCO) — аномальная дисперсия  $\omega_{\text{LO}}$  наблюдалась только в направлениях [100] кристалла и не наблюдалась в других направлениях, в частности, в [110]. Отметим, что необходимым следствием определяющей роли АФ упорядочения в направлении [110] были бы аномалии  $\omega_{\text{LO}}$  в этом же направлении, что не соответствует эксперименту.

Нами было показано, что коэффициент линейного расширения  $\alpha(T)$  ВТСП-систем ВКВО, ВРВО [5, 6], LSCO [7] при низких температурах  $T$  является аномальным (отрицательным). Эффект наблюдается только на качественных образцах. Подобные аномалии наблюдались также для YBCO [8] и Bi-2212 [9]. На монокристаллических образцах LSCO, YBCO и Bi-2212 обнаружена анизотропия  $\alpha(T)$ . При увеличении легирования эффект уменьшается.

Интересной особенностью ВТСП-систем является аномально сильная зависимость теплового расширения от магнитного поля  $\alpha(H)$ . В магнитных полях до 4 Тл наблюдается уменьшение области отрицательных значений  $\alpha$  и смещение ее в сторону низких температур. Эффект обнаружен нами как в купратных, так и в безмедных ВТСП [10].

Из оптических измерений следует, что при легировании ВКВО и ВРВО энергетическая щель между валент-