

УДК 539.26

Ніколюк П.К., д. ф.-м. н., проф.,
Баран В.В., інж
Серпак Н.Ф., асп.,
Лукіяничук С.М., асп.,
Грущенко Н.Л., асп.,
Ніколайчук В.Я., асист.,
Чухно М.В., студ.

Явище дегібридизації в купратах

Проведено теоретичний аналіз впливу електрон-фононої взаємодії у високотемпературних надпровідниках з урахуванням явища дегібридизації. Показана важлива роль даного явища в сильно корельованих системах, де енергія між електронної взаємодії різко зростає. В кінцевому випадку це приводить до розщеплення (біфуркації) електронних станів валентної зони високотемпературних надпровідників (ВТНП). Показано, що для надпровідного спарювання необхідно, щоб ефективна константа зв'язку перевищувала певну величину. Записано гамільтоніан системи з урахуванням дегібридизаційних процесів у електронній системі ВТНП.

Ключові слова: дегібридизація, електронна структура, електрон-фононна взаємодія, високотемпературні надпровідники

E-mail : pknikol@planeta.vn.ua

Високотемпературні купрати володіють сукупністю конкуруючих впорядкованих станів, таких як впорядкування типу зарядової густинної хвилі та спінової густинної хвилі, спінове пайєрлісівське впорядкування, смужкове (stripes) впорядкування та впорядкування у вигляді клітинок на шахівниці (checkboard) і, нарешті, псевдощілинне та надпровідне [1]. Перераховані види впорядкування часто конкурують між собою, тому важливим є питання про основний стан високотемпературних купратів [2]. Логічно припустити, що існує фактор, який спричиняє виникнення спектру таких змін в електронній структурі ВТНП. Таким фактором, на наш погляд, є дегібридизація, детально описана в роботах [3-8]. В даному випадку можна говорити про нерівноважний стан електронної системи ВТНП або про біфуркацію електронних станів,

© Ніколюк П.К., Баран В.В., Серпак Н.Ф.,
Лукіяничук С.М., Грущенко Н.Л., Ніколайчук В.Я.,
Чухно М.В.

Nikoluyk P.K., Dr. Sci., Prof.,
Baran V. V., Eng,
Serpak N.F., PhD stud,
Lukiyanchuk S.M., PhD stud.,
Grushchenko N.L., PhD stud.,
Nikolaichuk V. Y., Ass.,
Chuhno M.V., stud.

Degibridizatin phenomenon in cuprates

The theoretical consideration of electron-phonon interaction for high-temperature superconductors has been performed by means of degibridization phenomenon/ The important role of this phenomenon in strong correlation systems, where interelectron interaction sharply growthed, is shown. One was shown that in final case this come to division (separation) of valence zone electronic states For superconducting pairing it is necessary effective relation constant was exceeded the definite value. The system Hamiltonian by means of degibridizatiom processes in electronic system of HTSC had been written.

key words: degibridization, electronic structure, electron-phonon interaction, high-temperature superconductors

спричинену впливом дегібридизаційного фактора. Іншими словами, електронні стани системи виводяться із рівноважного стану за рахунок допущення вихідних сполук. Прояв дегібридизаційних особливостей, в свою чергу, спостерігається при допущенні вихідних сполук, що являють собою моттівські діелектрики. Високотемпературні надпровідники – купрати міді – належать до класу сильно корельованих систем, в яких характерна енергія кулонівської взаємодії більше або порядку ширини зони [9]. В таких системах спостерігаються тенденції як до магнітного, так і до надпровідного впорядкування. Зв'язок магнітного і надпровідного станів найбільш детально може бути досліджений в рамках моделі Хаббарда. В представленні вторинного квантування гамільтоніан моделі записується таким чином:

Представлено: член-кор. НАН України,
д.ф.-м.н., проф. Макара В.А

$$H = -t \sum_{i,j,\sigma} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (1)$$

де $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma}$ - число електронів із спіном σ на даному вузлі. В рівняння (1) входять два параметри: t – матричний елемент переходу між найближчими вузлами і U – параметр кулонівського відштовхування електронів на одному вузлі.

Дегібридизація електронних станів спричиняє різке зростання цього параметру, так що відношення $U/t \gg 1$. Важливим наслідком електронних кореляцій при умові сильної дегібридизації теорія Хаббарда дає розщеплення вихідної електронної смуги на дві підсмуги, відстань між якими порядку U .

Таким чином, розглядається модель, в якій електрони взаємодіють не з фононами, а з електронними збудженнями, енергія яких суттєво більше енергії фононів. Факт впливу сильних ефектів локального поля на виникнення високих T_c в системах із сильною взаємодією розглядався, зокрема, в роботі [10]. Спроби застосувати для пояснення механізму надпровідності більш високоенергетичний “клей” мають давню історію. В якості такого механізму пропонувалось використати екситони, плазмони, магнони, згустки спінів – так звані “спінові мішки” та ряд інших електронних збуджень, енергії яких можуть суттєво перевищують енергії фононів.

Проте рішучої відмови від електрон-фононного механізму не відбулося. Навпаки, ряд досліджень [11-13] намагаються пояснити механізм виникнення стану високотемпературної надпровідності на основі традиційного електрон-фононного механізму. При цьому приводяться такі факти: з теорії Бардіна-Купера-Шріффера випливає, що критична температура надпровідного переходу T_c може бути представлена таким чином

$$T_c \approx \omega_{ph} \exp\left(-\frac{1}{\lambda}\right), \quad (2)$$

де ω_{ph} – середня фононна частота, λ – константа електрон-фононної взаємодії. Проте у випадку ВТНП частота фононної взаємодії може значно зростати, оскільки визначається зв'язками типу $Cu3d(x^2 - y^2) - O2p$. Зростання середньої фононної частоти в даному випадку обумовлене малою масою атомів кисню.

Взагалі, для оксидів міді характерна конкуренція двох енергій – енергії сильної внутрішньоатомної взаємодії d – електронів та енергії сильної мідь-кисневої гібридизації [14]. Перевага енергії мідь-кисневої гібридизації над енергією внутрішньоатомної взаємодії в кінцевому випадку приводить до виникнення в структурі ВТНП сегментів типу CuO_2 . Очевидно, дана обставина характерна для всіх без винятку ВТНП. На сильну гібридизацію типу $Cu3d(x^2 - y^2) - O2p$, що має місце у високотемпературних надпровідниках, звертає увагу Р.В. Anderson в своїй роботі [15]. Michael R. Norman в роботі [16] також звертає увагу на те, що енергія $Cu3d(x^2 - y^2) - O2p$ взаємодії майже рівна енергії локалізованих $Cu3d$ – електронів. Тому сильний $Cu3d(x^2 - y^2) - O2p$ зв'язок являється основою для прояву дегібридизаційних ефектів, що приводять до розділення електронних станів валентної зони ВТНП. В результаті такого розділення якраз і з'являються електронно-структурні особливості у вигляді згустків електронних станів – смужок (stripes).

Таким чином, сильні електронні кореляції у ВТНП обумовлені виключно сильною мідь-кисневою гібридизацією, спроможною спричинити розділення (біфуркацію) електронних станів ВТНП під впливом заколапсованих $Cu - O$ зв'язків.

Було доведено [17], що високі значення T_c можуть бути отримані лише в системах з сильною електрон-електронною взаємодією типу гібридизації $Cu3d(x^2 - y^2) - O2p$. Така гібридизація приводить до сильного електронного відштовхування електронів таких заколапсованих орбіталей та електронів, що формують валентну зону ВТНП.

Важливо зауважити, що пояснити високотемпературну надпровідність можна в рамках моделі із сильною електрон-фононою взаємодією. Розрахунки [17] константи електрон-фононної взаємодії λ , що фігурує в рівнянні (2), дають значення в межах $0,6 \leq \lambda \leq 2$ (для

класичних надпровідників $\lambda \ll l$). Головні причини, що сприяють відносно великим значенням λ в купратних надпровідниках, є наступні: 1) сильна мідь-киснева гібридизація; при цьому молекулярні орбіталі $Cu3d(x^2 - y^2) - O2p$ спричиняють розділення електронних станів валентних електронних станів ВТНП-сполуки, так що в результаті густина електронних станів на поверхні Фермі досягає значно більших значень, чим в нормальних металах (наприклад, густина електронних станів в сполуці $La_{1.85}Sr_{0.15}CuO_4$ на порядок вища, чим в елементарній міді [7]); 2) участь в процесах електрон-фононної взаємодії атомів кисню, що дозволяє суттєво підняти частоти коливань ω_{ph} , і, таким чином, значно підвищити T_c згідно (1); 3) значна доля іонної складової на зв'язках $Cu - O$.

Остання обставина сприяє додатковому накопиченню носіїв на площинах $Cu - O$ та послабленню екранування в напрямках, перпендикулярних до мідь-кисневих площин. Це, в свою чергу, приводить до сильної електрон-фононної взаємодії на $Cu - O$ площині через зміну потенціалу Маделунга на атомах Cu і O за рахунок фононів, що обумовлюють рух позаплощинних іонів. Константа зв'язку з такими модами досягає 4.

В роботі [18] зауважено, що врахування кулонівського відштовхування в рамках електрон-фононного механізму надпровідності показує, що для надпровідного спарювання необхідно, щоб ефективна константа зв'язку перевищувала не усереднену по зоні Бріллюена кулонівську енергію U_c , а її логарифмічно ослаблене значення, тобто

$$|V| = \frac{U_c}{1 + g_F U_c \ln(E_F / \hbar \omega_D)} \quad (3)$$

де g_F – густина станів на рівні Фермі, $\hbar \omega_D$ – дебаївська енергія, що визначає

енергетичний масштаб притягання електронів в околі поверхні Фермі. В нашому випадку ми маємо справу із зростанням величини U_c за рахунок біфуркації електронних станів, спричиненої впливом замкнутих електронних орбіталей на електронну структуру валентної зони ВТНП. В результаті такого розділення якраз і з'являються електронно-структурні особливості у вигляді згустків електронних станів – смужок (stripes).

С. Howald із співавторами [2], використавши скануючу тунельну спектроскопію, знайшли, що у високотемпературному надпровіднику $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ має місце періодичне зростання густини електронних станів саме у напрямку зв'язків $Cu - O$. Автори роботи [1] пояснюють періодичний зарядовий порядок в сполуці $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ модуляціями електронної амплітуди.

Для опису варіацій електронної структури ми пропонуємо гамільтоніан у вигляді:

$$\hat{H} = \hat{H}_{BCS} + \hat{H}_{DG},$$

$$\hat{H}_{BCS} = \sum_{\vec{k}\sigma} (E_{\vec{k}} - \mu_{DG}) C_{\vec{k}\sigma}^+ C_{\vec{k}\sigma} + \sum_{\vec{k}} A_{\vec{k}} (C_{\vec{k}}^+ C_{\vec{k}\uparrow}^+ + C_{\vec{k}} C_{\vec{k}\downarrow}^-)$$

$$\hat{H}_{DG} = V (C_{0\uparrow}^+ C_{0\uparrow} + C_{0\downarrow}^+ C_{0\downarrow}), \quad (4)$$

де μ_{DG} – хімічний потенціал, що визначається перенормованою завдяки впливу дегібридизаційного фактору густиною станів на рівні Фермі; $E_{\vec{k}}$ – закон дисперсії, що визначається типом кристалічної структури ВТНП. Саме доданок \hat{H}_{DG} загального гамільтоніану (4) є визначальним з точки зору утвердження високотемпературної надпровідності.

Розрахунок впливу такого потенціалу на електронну структуру ВТНП проведений в роботі [19].

Тому в даному випадку треба говорити не про розсіяння носіїв на дефектах структури чи домішках, як це робиться в роботі [20], а про збурюючий потенціал V , періодично розташований в межах кристалу

Метод розв'язання рівняння (4) і отримання локальної густини станів являє собою стандартне перетворення Боголюбова разом із застосуванням методики гріновських функцій.

Отриманий в роботі гамільтоніан враховує особливості електронної структури ВТНП. Виникнення δ -подібного резонансного піку електронних станів, що формується в околі рівня Фермі в результаті дії дегібридаційного фактору, підтверджено експериментально [18].

Таким чином, у ВТНП-системах пояснення основних особливостей може бути проведено на основі механізму електрон-фононної взаємодії. Проте сама по собі електрон-фононна взаємодія не може забезпечити d -зпарювання, що спостерігається в купратах. Значить повинен існувати механізм, який пояснює це зпарювання. Цим механізмом є саме дегібридація електронних станів.

ЛІТЕРАТУРА

1. Daniel Podolsky, Eugene Demler, Kedar Damle, and V.I. Halperin. Translational symmetry breaking in the superconducting state of the cuprates: Analysis of the quasiparticle density of states // Phys. Rev. B. – 2003. – V.67, №9. – P.094514.
2. Howald, H. Eisaki, N. Kaneko, M. Greven, and A. Kapitulnik. Periodic density-of-states modulations in superconducting $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$ // Phys. Rev. B. – 2003. – V.67, №1. – P.11206-11219.
3. Ніколюк П.К., Шнерко В.Н., Гринчук В.Г., Шкрабалюк П.А. Рентгеновские полосы соединения EuCu_2Si_2 // УФЖ. – 1990. – т. 35, №7. – С. 1076 – 1077.
4. Ніколюк П.К. Резонанс Абрикосова-Сула в CeCu_2Si_2 та EuCu_2Si_2 // Металлофиз. и новейшие технологии. – 2001. – Т. 23, №10. – С. 176 – 180.
5. Ніколюк П.К. Фотоелектронне та рентгеноспектральне дослідження інтерметаліду CeCu_2Si_2 // УФЖ. – 2001. – т.46, №7. – С. 752 – 754.
6. Ніколюк П.К. Явище дегібридації в сполуці CeCu_2Si_2 // Металлофиз. и новейшие технологии. – 2001. – Т. 23, №2. – С. 147 – 152.
7. P.K. Nikolyyuk, V.G. Dzis, V.D. Martynyuk, V.Ya. Nikolaichuk, A.V. Yushchenko. Dehybridization in cuprates // Ukr. Phys. J. – 2004. – V.49, №10. – P.996-999.
8. Ніколюк П.К., Дзись В.Г., Лукіяничук С.М., Бурдейна Л.І., Ніколайчук В.Я., Баран В.В. Дегібридація в сполуках RAl_2Si_2 // Вісник Київського у-ту. – 2009, сер. фіз., вип.2 – с.120-125.
9. Ю.Л. Изюмов. Магнетизм и сверхпроводимость в сильно коррелированной системе // УФН. – 1991. – т.161, №11. – с.1-46.
10. Е.Г. Максимов, О.В. Долгов О возможных механизмах высокотемпературной сверхпроводимости. – УФН. – 2007. – т.177. – с.983-987.
11. В.Л. Гинзбург Сверхпроводимость: позавчера, вчера, сегодня, завтра. – УФН – 2000. – т.170. – с.619-630.
12. Е.Г. Максимов, Д.Ю. Саврасов, С.Ю. Саврасов. Электрон-фононное взаимодействие и физические свойства металлов. – УФН. – 1997. – т.167. – с. 353-376.
13. В.А. Гавричков, Е.В. Кузьмин, С.Г. Овчинников Электронная структура и симметрия параметра порядка высокотемпературных сверхпроводников. – УФН. – 2000. – т.170. – с.189-192.
14. В.А. Гавричков, Е.В. Кузьмин, С.Г. Овчинников Электронная структура и симметрия порядка высокотемпературных сверхпроводников // Успехи физических наук. – 2000. – Т.170, №2. – С.189-192.
15. P.W. Anderson. Present status of the theory of the high T_c cuprates. -arXiv:cond-mat/0510053v2.
16. Michael R. Norman. Physics, 1, 21 (2008).
17. Е.Г. Максимов Проблема высокотемпературной сверхпроводимости. Современное состояние // УФН. – 2000. – т.170, №10. – с.1033-1061.
18. В.И. Белявский, Ю.В. Копаев Сверхпроводимость отталкивающихся частиц // УФН. – 2006. – т.176, №5. – с.457-485.
19. П.К. Ніколюк, В.Я. Ніколайчук, В.Г. Дзись, В.М. Чубатюк, А.В. Ющенко. Явище дегібридації в купратах // Доп. НАНУ. – 2007. – №5. – с.104-109.
20. Degang Zhang and C.S. Ting. Energy-dependent modulations in the local density of states of the cuprate superconductors // Phys. Rev. B. – 2003. – V.67. – P. 1000506-1 – 100506-4.