

На правах рукописи

Макаров Илья Анатольевич

**ВЛИЯНИЕ МЕЖСЛОЙНЫХ ПЕРЕСКОКОВ НА СВОЙСТВА
НОРМАЛЬНОЙ И СВЕРХПРОВОДЯЩЕЙ ФАЗ ДВУХСЛОЙНЫХ
ВТСП КУПРАТОВ**

01.04.07 – физика конденсированного состояния

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Красноярск – 2011

Работа выполнена в Учреждении Российской академии наук Институте физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения РАН

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
профессор Овчинников Сергей Геннадьевич

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук
Дзедзисашвили Дмитрий Михайлович
кандидат физико-математических наук
Кучинский Эдуард Зямович

Ведущая организация: Казанский (Приволжский) федеральный
университет, г. Казань

Защита состоится «_23_» _____ марта _____ 2012 г. в 14.30 на заседании диссертационного совета при Учреждении Российской академии наук Институте физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения РАН по адресу: 660036 Красноярск, Академгородок, 50, стр. 38

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке Учреждения Российской академии наук Института физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения РАН

Автореферат разослан «26» _января_____ 2012 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,
доктор физико-математических наук

Втюрин А.Н.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы: Несмотря на интенсивное изучение ВТСП купратов механизмы процессов, происходящих в их нормальной и сверхпроводящей фазах, до сих пор остаются неясными. Трудности с описанием данных соединений связаны с присутствием в них сильных электронных корреляций, из-за чего хорошо развитые методы зонной теории оказываются бесполезными. Сейчас почти нет никаких сомнений, что основной элемент купратов – CuO_2 -слой – создает все необходимые условия для реализации сверхпроводимости, наступление которой становится возможным с добавлением свободных носителей. Однако с самого открытия купратов известна зависимость температуры перехода в сверхпроводящее состояние от количества CuO_2 -слоев в элементарной ячейке. Наличие этой зависимости говорит о влиянии изменений, сопровождающих увеличение числа медно-кислородных слоев, на механизм(ы) сверхпроводимости. Существует, по крайней мере, два способа такого влияния. Первый связан с появлением взаимодействий между частицами из соседних слоев, например перескоков или обменных взаимодействий. В этом случае возможно как появление дополнительного механизма сверхпроводимости на основе межслойного взаимодействия, так и трансформация уже существующего механизма внутри CuO_2 -плоскости. Второй обусловлен изменением распределения примесей и неоднородностей, степени беспорядка, типа допирования. Более естественным кажется первый способ, поэтому представляет интерес его исследование.

Ранее на роль механизма увеличения T_c с ростом числа слоев были выдвинуты межслойные перескоки пар частиц [1]. На основе работы [1]

было объяснено не только увеличение T_c в многослойных купратах, но и высказана гипотеза о том, что причиной столь высоких T_c также являются межслойные парные перескоки. Однако эти выводы строились в предположении большой величины сверхпроводящей щели и ее s-симметрии. Позже было исследовано влияние межслойных одночастичных перескоков, не зависящих от волнового вектора, на концентрационную зависимость T_c в приближении среднего поля и в рамках $t-J$ -модели [2].

К настоящему времени, в том числе и благодаря успехам экспериментальной техники, прояснились некоторые свойства купратов. Стала понятна форма Ферми поверхности в недодопированных соединениях. Оценена роль ближнего антиферромагнитного порядка в формировании электронной структуры. Установлена d-симметрия сверхпроводящей щели в купратах, наличие зависимости расщепления зон в двухслойных купратах от волнового вектора [3]. Из теоретических расчетов выяснено, что минимальной низкоэнергетической моделью для многозонной $p-d$ -модели является $t-t'-t''-J^*$ -модель [4]. Поэтому необходимо принять во внимание все эти факты для построения теории сверхпроводимости.

Цель работы: исследовать влияние межслойных перескоков на свойства нормальной и сверхпроводящей фазы двухслойных ВТСП купратов. Для достижения этой цели необходимо решить следующие задачи:

1. Обобщить метод LDA+GTV на случай двухслойных купратов
2. Исследовать влияние межслойных перескоков t_{\perp} на электронную структуру нормальной фазы двухслойных купратов, а именно, на зонную структуру, поверхность Ферми и квантовые фазовые переходы.

3. Исследовать влияние межслойных перескоков и спиновых корреляций на концентрационную зависимость T_c . Выяснить, является ли наличие межслойных перескоков причиной увеличения T_c в двухслойных купратах по сравнению с однослойными купратами.

Научная новизна работы:

- 1) Для двухслойных купратов получено выражение для бислойного расщепления с учетом одночастичных перескоков и внутриячеечного межслойного статического спинового коррелятора;
- 2) В рамках обобщенного приближения среднего поля показано, что внутриячеечные межслойные спиновые корреляционные функции подавляют бислойное расщепление;
- 3) Получен ряд квантовых фазовых переходов двухслойных купратов при изменении допирования, проявляющихся в виде перестройки поверхности Ферми;
- 4) Показано, что в рамках $t-t'-t''-J^*$ -модели в обобщенном приближении среднего поля для реалистичных значений бислойного расщепления наличие одночастичных перескоков не повышает T_c , а даже слегка понижает ее; форма концентрационной зависимости в двухслойных купратах при реалистичных значениях бислойного расщепления остается такой же, как в однослойных купратах (форма однопикового купола).

Научная и практическая ценность. Отсутствие эффекта увеличения T_c при учете межслойных одночастичных перескоков в рамках сделанных приближений указывает на возможную важность примесных механизмов увеличения T_c с ростом числа CuO_2 -слоев в элементарной ячейке. Полученная в теоретических расчетах эволюция поверхности Ферми двухслойных купратов в нормальной фазе предсказывает возможный вид

поверхности Ферми в ARPES и других экспериментах для различных уровней допирования.

Достоверность полученных результатов достигнута применением $t-t'-t''-J^*$ -модели, которая является низкоэнергетическим пределом многозонной $p-d$ -модели, вместе с обобщенным приближением среднего поля, учитывающим статические кинетические и спиновые корреляторы. Данный подход был использован для описания электронной структуры однослойных купратов, которая оказалась в качественном согласии с данными ARPES. Расщепление зон в двухслойных купратах, являющееся следствием межслойных перескоков, наблюдается в ARPES [5] и проявляется в виде наличия нескольких характерных частот в экспериментах по квантовым осцилляциям. Небольшая величина бислойного расщепления в ARPES свидетельствует о малой величине связи между CuO_2 -слоями. Наличие антиферромагнитного упорядочения спинов в соседних CuO_2 -слоях внутри элементарной ячейки подтверждено в экспериментах по нейтронной дифракции [6].

Основные положения, выносимые на защиту:

- 1) Метод расчета электронной структуры двухслойных купратов с учетом сильных корреляций в рамках LDA+GTB подхода.
- 2) Перестройка зонной структуры и поверхности Ферми двухслойных купратов от дырочных карманов к большим дырочным поверхностям при допировании.
- 3) Отсутствие вклада межслойных перескоков, обменных взаимодействий и парного туннелирования в константу связи для спаривания $d_{x^2-y^2}$ -симметрии в рамках теории обобщенного среднего поля.

4) Подавление бислойного расщепления за счет межслойных спиновых корреляций в двухслойных купратах.

Апробация работы: Основные результаты работы докладывались на семинарах в Институте физики им. Л.В. Киренского СО РАН, на 4-ой международной конференции «Фундаментальные проблемы высокотемпературной сверхпроводимости» ФПС'11, г. (Звенигород, Россия, 2011 г.), на Международной конференции «Сильно коррелированные электронные системы 2011» («Strongly correlated electronic systems 2011», SCES 2011) (Cambridge, UK, 2011), на конференции молодых ученых Красноярского научного центра СО РАН, (Красноярск, Россия, 2010, 2011 г.), на XXXIII Международной зимней школе физиков-теоретиков «Коуровка 2010», (Новоуральск, Свердловская обл., Россия, 2010 г.), на Сибирском семинаре по высокотемпературной сверхпроводимости, (Новосибирск, Россия, 2010), на Сибирском семинаре по высокотемпературной сверхпроводимости, (Красноярск, Россия, 2009), на 3-ей международной конференции «Фундаментальные проблемы высокотемпературной сверхпроводимости» ФПС'08, г. (Звенигород, Россия, 2008 г.), XXXI Международной зимней школы физиков-теоретиков «Коуровка 2006», (Кыштым, Челябинская обл., Москва, 2006), на Сибирском семинаре по высокотемпературной сверхпроводимости, (Омск, Россия, 2005), на конференции НКСФ-2005: Материалы научной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых физиков «Физика и Эйнштейн», (Красноярск, Россия, 2005)

Публикации. Основные результаты диссертации изложены в 8 печатных работах, из них 2 статьи в центральных рецензируемых журналах,

2 в сборниках трудов международных конференций, 2 в сборниках трудов красноярских конференций, 2 в тезисах международных конференций,

Структура и объем работы: Диссертация состоит из введения, четырех глав, результатов и списка литературы, изложена на 122 страницах, включает 27 рисунков и 4 таблицы. Список цитируемой литературы включает 210 наименований.

Работа выполнена при финансовой поддержке программы «Квантовая физика конденсированных сред» Президиума РАН №18.7, интеграционного проекта СОРАН-УРОРАН №40, гранта РФФИ 09-02-00127, гранта Президента РФ МК-1683.2010.2 и проекта ФЦП ГК П891; Макаров И.А. благодарит за финансовую поддержку для участия в конференциях SCES'11 и ФПС 2011 Краевое государственное автономное учреждение «Красноярский краевой фонд поддержки научной и научно-технической деятельности»

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Первая глава диссертации посвящена обзору теоретических и экспериментальных работ, которые предоставляют необходимые инструменты и информацию для исследования купратов.

Первый раздел **Главы 1** содержит информацию об экспериментальных работах, результаты которых ложатся в основу большинства теоретических описаний (ARPES, метод квантовых осцилляций, туннельные эксперименты, одноосное давление и др.)

Обзор теоретических работ во втором разделе **Главы 1** состоит из двух логических частей. В первой части поэтапно описываются всевозможные способы теоретического исследования купратов. Выбор

модели зависит от области энергий, описание которой мы хотим получить. Наиболее общей моделью для купратов является многозонная $p-d$ - модель. Обобщение модели Хаббарда на случай многозонной системы, описываемой $p-d$ - моделью, приводит к многозонной модели Хаббарда. Низкоэнергетическими моделями являются трехзонная $p-d$ - модель, синглет-триплетная $t-J$ - модель, двухзонная модель Хаббарда, $t-J$, $t-t'-t''-J^*$ - модель. Для нахождения параметров модельного гамильтониана могут быть использованы как непосредственно данные экспериментов (ARPES, оптические, магнитные), так и первопринципные расчеты. Также упоминается спин-поляронный подход, метод резонансных валентных связей. Далее перечисляются аналитические и численные методы описания электронной структуры после выбора модели. Среди аналитических методов наиболее широко применяется метод уравнения движения для функций Грина. Также используются диаграммная техника, теория динамического среднего поля, кластерная теория динамического среднего поля и другие. Примерами численных методов нахождения электронной структуры служат квантовый метод Монте-Карло и точная диагонализация.

Во второй части рассказывается о теоретических работах, посвященных исследованию влияния межслойных взаимодействий на сверхпроводящую фазу купратов. Рассматриваются примеры учета межслойных одночастичных перескоков, перескоков пар между слоями CuO_2 .

В третьем разделе сформулированы цели и задачи данной работы.

Глава 2 посвящена описанию метода LDA+GTB (Local Density Approximation (приближение локальной плотности) + Generalized Tight-Binding method (обобщенный метод сильной связи)) [4] для изучения

купратов и его обобщению конкретно для двухслойных купратов. Первый раздел главы 2 рассказывает об общей схеме метода LDA+GTB. В этом методе выбирается модельный гамильтониан, параметры для которого вычисляются с помощью первопринципных расчетов. Далее на основе этого полного гамильтониана строится обобщенный метод сильной связи. Последний включает в себя три этапа: точная диагонализация внутриячеечной части гамильтониана, построение операторов Хаббарда на базисе точных внутриячеечных многоэлектронных состояний и применение кластерной формы теории возмущений для записи межъячеечной части гамильтониана.

Существует два способа применить схему LDA+GTB к двухслойным купратам. Первый заключается в учете межслойных перескоков на этапе точной диагонализации кластера двухслойного купрата Cu_2O_{10} в виде двух CuO_5 -пирамид. Мы проделали этап точной диагонализации и получили собственные состояния, а также их энергии для количества дырок $n_p = 1, 2$ и 3 в элементарной ячейке. Выяснили, что основным состоянием стехиометрического состава ($n_p = 2$) является синглетное состояние, в котором дырка находится на медной d_x и молекулярной кислородной

$|b\rangle = \frac{1}{2}(|p_{x-1/2}\rangle - |p_{x+1/2}\rangle + |p_{y-1/2}\rangle - |p_{y+1/2}\rangle)$ орбиталях верхней CuO_5 -пирамиды, а вторая – на тех же орбиталях нижней пирамиды. Этому способу посвящен второй раздел **Главы 2**.

Однако мы выбрали другой способ обобщения LDA+GTB метода на случай двухслойных купратов, который заключается в построении межслойных взаимодействий уже между квазичастичными возбуждениями из соседних CuO_5 -пирамид. Весь кристалл представляется в виде двух слоев CuO_5 -пирамид. Каждый слой CuO_5 -пирамид рассматривается как

однослойное соединение типа $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, которое было подробно изучено в работах [4,7]. Из-за большого расстояния между слоями и, принимая во внимание геометрию перекрывающихся орбиталей, можно считать связь между слоями CuO_5 -пирамид слабой и считать, что перескоки между слоями не меняют волновые функции и квазичастичные возбуждения внутри CuO_5 -пирамид. В работе [4] было показано, что эффективной низкоэнергетической моделью для купратов является $t-t'-t''-J^*$ -модель. Поэтому гамильтониан нашей системы запишется в виде

$$H_{t-t'-t''-t_{\perp}-J^*} = H_{t-t'-t''-J^*} + H_{\perp}, \quad (1)$$

где

$$\begin{aligned} H_{t-t'-t''-J^*} = & \sum_{f\alpha\sigma} (\varepsilon_1 - \mu) X_{f\alpha}^{\sigma\sigma} + \sum_{f\alpha} (\varepsilon_2 - 2\mu) X_{f\alpha}^{SS} + \\ & \sum_{fg\alpha\sigma} t_{fg} X_{f\alpha}^{S\sigma} X_{g\alpha}^{\sigma S} + \sum_{fg\alpha\sigma} J_{fg} \left(X_{f\alpha}^{\sigma\bar{\sigma}} X_{g\alpha}^{\bar{\sigma}\sigma} - X_{f\alpha}^{\sigma\sigma} X_{g\alpha}^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} \right) - \\ & \sum_{mnl\alpha\sigma} \frac{\tilde{t}_{ml}\tilde{t}_{ln}}{E_{ct}} \left(X_{m\alpha}^{S\sigma} X_{l\alpha}^{\sigma\bar{\sigma}} X_{n\alpha}^{\bar{\sigma}S} - X_{m\alpha}^{S\sigma} X_{l\alpha}^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} X_{n\alpha}^{\sigma S} \right) \end{aligned} \quad (2)$$

является гамильтонианом для двух слоев CuO_5 -пирамид, индекс α указывает на верхний (u) и нижний (d) CuO_5 -слой, $J_{fg} = \frac{2\tilde{t}_{fg}^2}{E_{ct}}$ -параметр эффективного обменного взаимодействия за счет перескоков в нижнюю хаббардовскую зону и обратно, t_{fg} -межъячеечные внутризонные перескоки между ячейками, \tilde{t}_{ml} -межъячеечные межзонные перескоки между ячейками, E_{ct} - диэлектрическая щель с переносом заряда, ε_1 и ε_2 - энергии локальных состояний с одной и двумя дырками. Гамильтониан H_{\perp} содержит слагаемые, отвечающие за связь между слоями. Основной вклад в связь дают одночастичные межслойные перескоки, то есть

$$H_{\perp} = \sum_{f_u, g_d} t_{\perp}(f_u, g_d) (X_{f_u}^{S\sigma} X_{g_d}^{\sigma S} + h.c.). \quad (3)$$

Интеграл перескока $t_{\perp}(f_u, g_d)$ в обратном пространстве определяется выражением [3]:

$$t_{\perp}(\mathbf{k}) = t_{\perp}(\cos k_x - \cos k_y)^2. \quad (4)$$

Величина t_{\perp} определяется из расщепления зон в ARPES спектрах, характерное значение этого параметра равно 0.03 эВ. Параметры гамильтониана $H_{t-t'-t''-j^*}$ заимствуются из работы [7]. Метод описания двухслойного купрата по теории возмущений подробно описан в **разделе 3 главы 2**.

Глава 3 посвящена влиянию межслойных перескоков на электронную структуру купратов в нормальной фазе.

В первом разделе этой главы описывается метод уравнения движения для функции Грина применительно к расчету электронной структуры системы двух слоев CuO_5 -пирамид со слабой связью. Для расщепления системы уравнения движения используется обобщенное приближение среднего поля, в рамках которого массовый оператор определяется через статические спиновые и кинематические корреляционные функции. Кинематические корреляторы вычислялись самосогласованно с хипотенциалом, спиновые корреляторы заимствовались из [7]. Наличие одночастичных перескоков между CuO_2 -слоями приводит к расщеплению двукратно вырожденной зоны, соответствующей каждому из слоев CuO_5 -пирамид, на связывающую и антисвязывающую зоны (Рис. 1). Половина энергии расщепления определяется выражением:

$$\tilde{t}_{\perp \mathbf{k}} = (p_{\sigma} + x) t_{\perp} (\cos k_x - \cos k_y)^2 \left(1 + \frac{3C_{\perp}}{2(p_{\sigma} + x)^2} \right). \quad (5)$$

Видно, что помимо вклада в энергию расщепления от перекрытия орбиталей, также присутствует вклад от межслойного спинового коррелятора $C_{\perp} = \langle X_{f_u}^{\sigma\bar{\sigma}} X_{f_d}^{\bar{\sigma}\sigma} \rangle = 2 \langle S_{f_u}^z S_{f_d}^z \rangle$. Межслойная внутриячеечная спиновая корреляционная функция была вычислена в результате точной диагонализации основного состояния Cu_2O_{10} кластера. Оказалось, что $C_{\perp} = -0.1$. Таким образом, из (5) следует, что межслойный спиновый коррелятор антиферромагнитного типа подавляет бислойное расщепление. Влияние спинового коррелятора C_{\perp} на зонную структуру двухслойных купратов изучается во **втором разделе главы 3**.

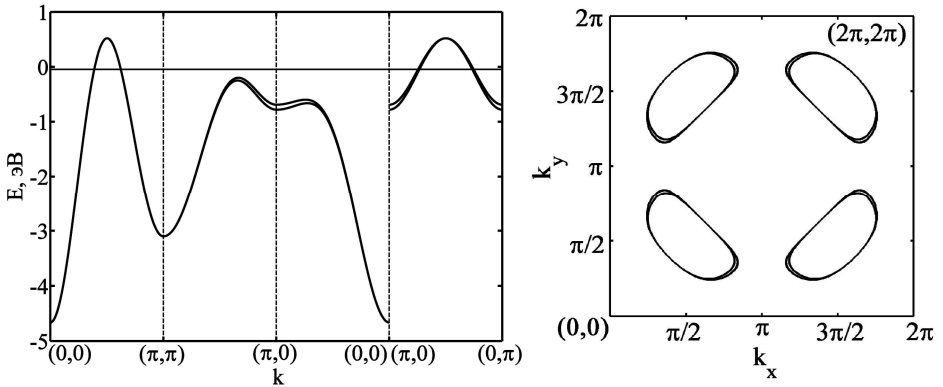


Рис. 1 Зонная структура и поверхность Ферми двухслойных купратов при $x = 0.13$ и $t_{\perp} = 0.03$ эВ. Горизонтальная линия на зонной структуре вблизи нуля обозначает положение химпотенциала.

В **третьем разделе Главы 3** показана эволюция зонной структуры и поверхности Ферми с допированием. При слабом допировании ($x = 0.11$) поверхность Ферми представляет собой четыре сдвоенных дырочных кармана (Рис.1). Удвоение карманов происходит вследствие бислойного расщепления. При дальнейшем росте количества дырок карманы

разрастаются и при $x_{c1} = 0.144$ происходит квантовый фазовый переход, заключающийся в смыкании внешних карманов (Рис.2а). Следующий фазовый переход имеет место при $x_{c2} = 0.156$, когда смыкаются внутренние карманы (Рис.2б). После этого поверхность Ферми представляет из себя два больших дырочных кармана и два электронных кармана (Рис. 2в), причем последние практически сливаются. Еще два квантовых перехода наблюдаются при исчезновении электронных карманов (Рис. 2г).

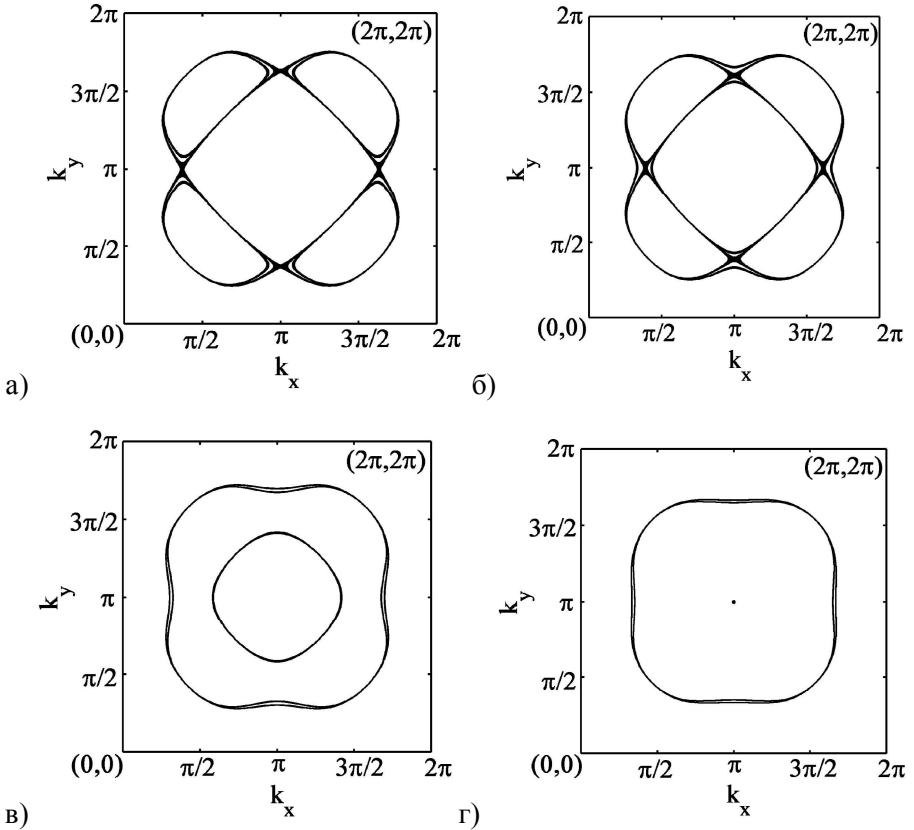


Рис.2. Эволюция электронной структуры двухслойных купратов с допированием

(а) $x = x_{c1} = 0.144$, б) $x = x_{c2} = 0.156$, в) $x = 0.2$, г) $x = 0.25$).

Последняя **Глава 4** посвящена ключевому вопросу, который мы ставили в начале исследования: каково влияние межслойных взаимодействий на свойства сверхпроводящей фазы и, в частности, на температуру перехода в сверхпроводящее состояние.

В сверхпроводящей фазе мы не ограничимся только взаимодействием в виде одночастичных межслойных перескоков, но учтем также межслойное обменное взаимодействие, определяемое параметром J_{\perp} , и перескоки пар квазичастиц между слоями, которые задаются параметром T_{\perp} . Поэтому гамильтониан будет выглядеть следующим образом:

$$\begin{aligned}
 H_{t-t'-t''-t_{\perp}-J_{\perp}} = & H_{t-t'-t''-J_{\perp}} + \sum_{m_u, n_d} t_{\perp} (m_u, n_d) (X_{m_u}^{S\sigma} X_{n_d}^{S\sigma} + X_{n_d}^{S\sigma} X_{m_u}^{S\sigma}) + \\
 & \sum_{m_u, n_d, \sigma} J_{\perp} (m_u, n_d) (X_{m_u}^{\sigma\bar{\sigma}} X_{n_d}^{\sigma\bar{\sigma}} - X_{m_u}^{\sigma\sigma} X_{n_d}^{\sigma\bar{\sigma}}) + \\
 & \sum_{\substack{u_1, u_2 \\ d_1, d_2 \\ \sigma}} T_{\perp} (u_1, u_2, d_1, d_2) (X_{u_1}^{S\bar{\sigma}} X_{u_2}^{S\sigma} X_{d_1}^{S\sigma} X_{d_2}^{S\bar{\sigma}} + h.c.)
 \end{aligned} \quad (7)$$

Сверхпроводящая фаза описывается в рамках обобщенной теории среднего поля. Для вычисления энергетических характеристик, таких как дисперсия и сверхпроводящая щель, мы используем метод уравнения движения для двухвременной запаздывающей четырехкомпонентной функции Грина $G_{\mathbf{k}\sigma} = \langle\langle X_{\mathbf{k}}^{\sigma S} | X_{\mathbf{k}}^{S\sigma} \rangle\rangle$. Данная функция Грина состоит из нормальных и аномальных внутрислойных и межслойных компонент. В рассматриваемой системе возможно спаривание внутри CuO_2 -слоев, которое происходит за счет кинетического и обменного механизмов и определяется сверхпроводящей щелью

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{N} \frac{1}{p_{\sigma} + x} \sum_{\mathbf{q}} \left[(2t_{\mathbf{q}} - p_{\sigma} (J_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + J_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})) + 2p_{\sigma} \frac{\tilde{t}_{\mathbf{q}}^2}{E_{ct}} - 4(p_{\sigma} + x) \frac{\tilde{t}_{\mathbf{k}\tilde{\mathbf{q}}}^2}{E_{ct}} \right] B_{\mathbf{q}} - 2\tilde{t}_{\perp\mathbf{q}} B_{\perp\mathbf{q}} \Big], \quad (8)$$

и образование пар из квазичастиц, находящихся в соседних CuO_2 -слоях, которое задается межслойной щелью

$$\Delta_{\perp k} = \frac{1}{N} \frac{1}{p_{\sigma} + x} \sum_q \left(p_{\sigma} (J_{\perp k+q} + J_{\perp k-q}) + (p_{\sigma} + x) T_{\perp} \right) B_{\perp q}, \quad (9)$$

где $B_q = \langle X_q^{\sigma S} X_{-q}^{\bar{\sigma} S} \rangle$ и $B_{\perp q} = \langle X_{(u)q}^{\sigma S} X_{(d)-q}^{\bar{\sigma} S} \rangle$ – внутри- и межслойные аномальные средние. Межплоскостное спаривание обусловлено обменным межслойным взаимодействием и перескоками квазичастичных пар. Учитывая, что в купратах сверхпроводящая щель имеет $d_{x^2-y^2}$ -симметрию, в приближении ближайших соседей большинство механизмов перестает работать и остается только магнитный механизм спаривания внутри CuO_2 -слоя, соответствующее уравнение на T_c принимает вид

$$1 = \frac{1}{N} p_{\sigma} J_{01} \sum_q \frac{(\cos q_x - \cos q_y)^2}{2} \left(\frac{1}{E_q^+} \tanh \frac{E_q^+}{2\tau} + \frac{1}{E_q^-} \tanh \frac{E_q^-}{2\tau} \right), \quad (10)$$

где введено обозначение $\tau = k_B T$, а $E_q^+ = \xi_q + \tilde{t}_{\perp q}$ и $E_q^- = \xi_q - \tilde{t}_{\perp q}$ – энергии антисвязывающей и связывающей зон, на которые расщепилась зона отдельного CuO_2 -слоя с энергией ξ_q под действием связи $\tilde{t}_{\perp q}$ между слоями CuO_2 (5). Наличие связи между CuO_2 -слоями выражается в перераспределении плотности состояний по двум зонам и, как следствие, возникновении суммы двух гиперболических тангенсов в уравнении на T_c . Концентрационная зависимость T_c для реалистичных значений параметра межслойного взаимодействия $t_{\perp} = 0.02$ эВ и $C_{\perp} = -0.1$ (Рис. 3) почти не отличается от аналогичной зависимости для однослойных купратов, можно говорить только о незначительном уменьшении T_c для всех концентраций допированных носителей.

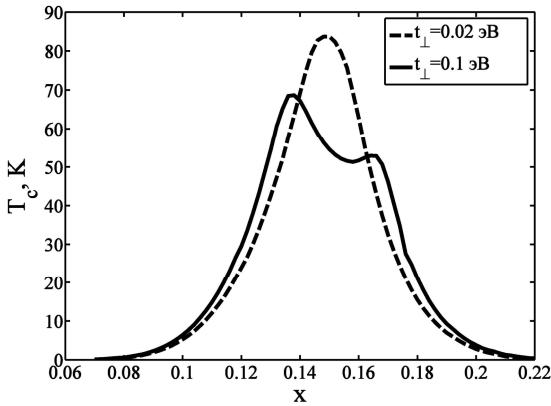


Рис. 3. Концентрационная зависимость T_c двухслойных купратов для двух значений величины интеграла межслойного перескока.

Увеличение величины интеграла перескока t_{\perp} сопровождается увеличением бислойного расщепления между связывающей и антисвязывающей зонами, а значит и расстоянием между двумя пиками в плотности состояний, каждая из которых соответствует своей особенности ван Хова.

Достаточно большой внутриячеечный межплоскостной интеграл перескока $t_{\perp} = 0.1$ эВ приводит к большому расщеплению зон и, как следствие, к двухпиковой структуре $T_c(x)$ (Рис. 3). Причиной малой величины бислойного расщепления является как слабое перекрытие орбиталей из разных CuO_2 -слоев, так и подавление межслойных перескоков спиновыми корреляциями антиферромагнитного типа. Влияние величины спинового коррелятора C_{\perp} на концентрационную зависимость T_c двухслойных купратов приводится в **разделе 2 главы 4**.

Помимо концентрационной зависимости критической температуры, важной характеристикой сверхпроводящего состояния является изотопический эффект по температуре. Поэтому в наших расчетах был учтен также фононный механизм спаривания и после этого проанализировано поведение изотопического эффекта в системе с межслойным расщеплением (**раздел 3 главы 4**).

Отсутствие эффекта увеличения максимальной T_c с включением межслойных перескоков говорит о том, что в рамках приближения обобщенного среднего поля ключевую роль в формировании высокотемпературной сверхпроводимости перескоки квазичастиц между слоями CuO_2 играть не могут. Более вероятным представляется влияние на механизм сверхпроводимости неоднородностей и беспорядка, сопровождающих добавление CuO_2 -слоев.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ И ВЫВОДЫ

- 1) Произведена точная диагонализация кластера Cu_2O_{10} , моделирующего элементарную ячейку двухслойного купрата, в результате чего получен набор локальных многоэлектронных собственных состояний и их энергий. Оказалось, что основное двухдырочное состояние является синглетным состоянием, в котором каждая из дырок находится в одной из двух CuO_2 -плоскостей. Вывод об антиферромагнитном упорядочении дырок в соседних плоскостях согласуется с экспериментами по нейтронному рассеянию.
- 2) В рамках $t-t'-t''-t_{\perp}-J^*-J_{\perp}$ -модели в обобщенном приближении Хартри-Фока исследовано влияние межслойных перескоков t_{\perp} на электронную структуру нормальной фазы двухслойных купратов. Наличие межслойной связи приводит к расщеплению зоны квазичастиц, соответствующей каждой из идентичных CuO_5 -пирамид, на связывающую и антисвязывающую зоны. Полученное расщепление проявляется как в зонной структуре, так и в виде наличия двух листов поверхности Ферми. При изменении концентрации допированных дырок в купратах наблюдается ряд квантовых фазовых переходов, связанных с изменением

топологии контура Ферми. Благодаря бислойному расщеплению количество этих переходов в два раза больше, чем в однослойных купратах.

3) Исследована сверхпроводящая фаза двухслойных купратов с учетом различных межслойных взаимодействий, таких как одночастичные перескоки, обменное взаимодействие и парные перескоки. В случае $d_{x^2-y^2}$ -симметрии сверхпроводящей щели в рамках теории среднего поля было выяснено, что в приближении ближайших соседей одночастичные и парные перескоки, а также межслойное обменное взаимодействие не приводят к дополнительным механизмам спаривания. Влияние межслойных перескоков и спиновых корреляций на сверхпроводящую фазу проявляется через перераспределение плотности состояний между связывающей и антисвязывающей зонами.

4) Показано, что антиферромагнитное упорядочение спинов в соседних CuO_2 -слоях уменьшает энергию межслойной связи, в результате чего происходит подавление бислойного расщепления и восстанавливается один максимум в концентрационной зависимости T_c . Сделан вывод о том, что динамический механизм влияния многослойности на T_c не является механизмом ее увеличения.

Основные результаты диссертации опубликованы в работах:

1. Овчинников С.Г., Макаров И.А., Шнейдер Е.И., Влияние межслойного туннелирования на электронную структуру двухслойных купратов и квантовые фазовые переходы по концентрации носителей и сильному магнитному полю. // ЖЭТФ. – 2011. – Т. 139, вып.2. – С. 334–350.

2. Макаров И.А., Овчинников С.Г., Влияние межслоистых одночастичных перескоков на температуру перехода в сверхпроводящее состояние. // Письма в ЖЭТФ. – 2011. – Т. 93, вып.6. – С. 372–377.
3. Макаров И.А., Овчинников С.Г., Шнейдер Е.И., Зависимость критической температуры высокотемпературных сверхпроводников от перескоков и спиновых корреляций между CuO_2 -плоскостями. Сборник расширенных тезисов 4-ой международной конференции «Фундаментальные проблемы высокотемпературной сверхпроводимости» ФПС'11, г. Звенигород, Россия, 3-7 октября 2011 г.
4. Макаров И.А., Овчинников С.Г., Шнейдер Е.И., Перестройка поверхности Ферми ВТСП купратов в сильном магнитном поле. // Сборник трудов Конференции молодых ученых Красноярского Научного Центра СО РАН. – Красноярск. – 2010. – С. 3–4.
5. Макаров И.А., Овчинников С.Г., Шнейдер Е.И., Перестройка поверхности Ферми ВТСП купратов в сильном магнитном поле. // XXXIII Международная зимняя школа физиков-теоретиков «Коуровка 2010». – Новоуральск. – 22-27 февраля 2010. – С. 46–47.
6. Макаров И.А., Овчинников С.Г., Влияние межслоевого туннелирования на электронную структуру двухслойных купратов. // Сборник трудов Третьей международной конференции «Фундаментальные проблемы сверхпроводимости». – Звенигород. – 13-17 октября 2008. – С. 44–45.
7. Гавричков В.А., Макаров И.А., Овчинников С.Г., Влияние межслоевого перескока на электронную структуру многослойных купратов. // Тезисы докладов XXXI Международной зимней школы физиков-теоретиков «Коуровка 2006». – Кыштым. – 19-25 февраля 2006. – С. 29.
8. Макаров И.А., Овчинников С.Г., Точная диагонализация кластера двухслойного купрата. // Материалы научной конференции студентов,

аспирантов и молодых ученых физиков «Физика и Эйнштейн» НКСФ-2005.

– Красноярск. – 22-23 апреля 2005. – С. 38.

СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Chakravarty S., Sudbo A., Anderson P.W., Strong S., Interlayer tunneling and gap anisotropy in high-temperature superconductor. // *Science*. – 1993. – Vol. 261. – P. 337–340.
2. Вальков В.В., Кравцов А.С., Концентрационная зависимость критической температуры бислойных ВТСП. // *Вестник КГУ*. – 2004. – Т. 1. – С. 51–54.
3. Andersen O.K., Liechtenstein A.I., Jepsen O., Paulsen F., LDA energy bands, low-energy Hamiltonians, t' , t'' , $t_{\perp}(\mathbf{k})$, and J_{\perp} . // *J. Phys. Chem. Solids*. – 1995. – Vol. 56, No.12. – P. 1573–1591.
4. Korshunov M.M., Gavrichkov V.A., Ovchinnikov S.G., Nekrasov I.A., Pchelkina Z.V., Anisimov V.I., Hybrid LDA and Generalized Tight-Binding method for the electronic structure calculations of strongly correlated electron systems. // *Phys. Rev. B*. – 2005. – Vol. 72. – P. 165104 (13 p).
5. Schabel M.C., Park C.-H., Matsuura A., Shen Z.-X., Bonn D.A., Liang R., Hardy W.N., Angle-resolved photoemission on untwinned $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.95}$. I. Electronic structure and dispersion relations of surface and bulk bands. // *Phys. Rev. B*. – 1998. – Vol. 57, no. 10. – P. 6090–6106.
6. Tranquada J.M., Cox D.E., Kunnmann W., Moudden H., Shirane G., Suenaga M., Zolliker P., Vaknin D., Sinha S.K., Alvarez M.S., Jacobson A.J., Johnston D.C., Neutron-diffraction determination of antiferromagnetic structure of Cu ions in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ with $x=0.0$ and 0.15 . // *Phys. Rev. Lett.* – 1988. – Vol. 60. – P. 156–159.
7. Korshunov M., Ovchinnikov S., Doping-dependent evolution of low-energy excitations and quantum phase transitions within an effective model for high- T_c copper oxides. // *Eur. Phys. J. B*. – 2007. – Vol. 57. P.271-278.

Подписано в печать 18. 01. 2012

Формат 60x84/16. Усл. печ. л. 1.5. Тираж 70 экз. Заказ № 3

Отпечатано в типографии Института физики СО РАН

660036, Красноярск, Академгородок 50, стр. 38