

# ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ НА ФОНОННЫЙ ВКЛАД В ФУНКЦИЮ ГРИНА ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ СВЕРХПРОВОДЯЩИХ КУПРАТОВ

*Л. А. Корнеева\*, Е. А. Мазур*

*Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»  
115409, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 11 ноября 2011 г.

Рассматривается фононный вклад в нодальную электронную функцию Грина в купратах. Показано, что при уровне дырочного допирования, близком к оптимальному, температурная зависимость действительной части собственно-энергетической части функции Грина купратов описывается электрон-фононным взаимодействием в рамках расширенной теории Элиашберга.

В ряде недавних экспериментальных работ [1–7], выполненных методом фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (ФУР) [8, 9], исследована зависимость действительной и мнимой компонент собственно-энергетической (СЭ) части электронной функции Грина (ФГ) в купратах от температуры. Правильная интерпретация влияния температуры на вид зависимости СЭ-части от частоты в купратах позволит выявить механизмы, ответственные за необычные свойства таких материалов в нормальном состоянии. Ранее [10] было показано, что учет отклонения плотности электронных состояний от постоянного значения вблизи поверхности Ферми приводит к реконструкции СЭ-части и плотности электронных состояний в электрон-фононной (ЭФ) системе. В работе исследуется вопрос о том, является ли факт упомянутой выше температурной зависимости СЭ-части ФГ следствием ЭФ-взаимодействия, или каких-либо дополнительных электронных механизмов. Для этой цели применен расширенный вариант теории Мигдала–Элиашберга [10] при отличных от нуля температурах  $T \neq 0$  в представлении Намбу, который включает в себя учет конечности ширины зоны, непостоянства плотности электронных состояний и дополнительные эффекты неэквивалентности электронов и дырок.

Принимая во внимание все сказанное выше, мы рассмотрим ЭФ-систему в отсутствие сингулярнос-

ти Ван Хова в электронном спектре. Для действительной части СЭ

$$\text{Re } \Sigma_{\varphi}(\omega) = [1 - \text{Re } Z_{\varphi}(\omega)]\omega + \text{Re } \chi_{\varphi}(\omega)$$

в расчетах применяем следующее выражение из работы [11]:

$$\begin{aligned} \text{Re } \Sigma_{nod}(\omega) = & -P \int_0^{\infty} dz \alpha_{nod}^2(z) F(z) \times \\ & \times \int_0^{\infty} dz' \left\{ f(-z') \left( -\frac{N_{nod}(-z')}{z' + z + \omega} + \frac{N_{nod}(z')}{z' + z - \omega} \right) + \right. \\ & \left. + f(z') \left( -\frac{N_{nod}(-z')}{z' - z + \omega} + \frac{N_{nod}(z')}{z' - z - \omega} \right) \right\}. \quad (1) \end{aligned}$$

Здесь  $f(z')$  — функция распределения Ферми, интегрирование по  $z$  осуществляется в смысле главного значения. Для мнимой части СЭ

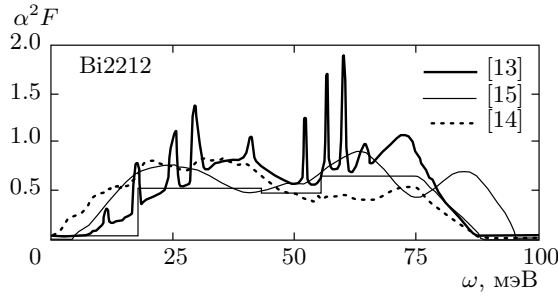
$$\text{Im } \Sigma_{\varphi}(\omega) = \text{Im } \chi_{\varphi}(\omega) - \text{Im } Z_{\varphi}(\omega)\omega$$

в работе [11] получено выражение

$$\begin{aligned} \text{Im } \Sigma_{\varphi}(\omega) = & -\pi \int_0^{\infty} dz \alpha_{nod}^2(z) F(z) \times \\ & \times \{ [N_{nod}(\omega - z) + N_{nod}(\omega + z)] n_B(z) + \\ & + N_{nod}(\omega - z) f(z - \omega) + N_{nod}(\omega + z) f(z + \omega) \}. \quad (2) \end{aligned}$$

В формуле (2)  $n_B(z)$  — функция распределения Бозе. В формулах (1), (2) перенормирован-

\*E-mail: korneeveva\_mila@mail.ru



**Рис. 1.** Экспериментальная электрон-фононная спектральная функция  $\alpha^2 F(\omega)$  [13–15] в сравнении с адаптированной  $\alpha^2 F(\omega)$  (тонкая сплошная линия)

ная ЭФ-взаимодействием нодальная часть плотности электронных состояний  $N_{nod}(z')$  выражается через «голую» нодальную плотность состояний электронов  $N_{0nod}(\xi)$  следующим образом:

$$N_{nod}(z') = -\frac{1}{\pi} \int_{-\mu}^{\infty} d\xi' \Gamma N_{0nod}(\xi') \operatorname{Im} g_{Rnod}(\xi', z'). \quad (3)$$

Будем аппроксимировать выражение для «голой» плотности электронных состояний  $\Gamma N_{0nod}(\xi)$  как  $\Gamma N_{0nod}(\xi) = N_{0nod}$  на отрезке  $-\mu \leq \xi \leq 2W - \mu$ , где  $W$  — полуширина голы исходной зоны. В остальной области определения переменной  $\xi$  «голая» плотность электронных состояний  $\Gamma N_{0nod}(\xi)$  будет считаться равной нулю. Положим для простоты, что дырочное или электронное допирование сдвигает химический потенциал  $\mu$  от значения, соответствующего половинному заполнению, по линейному закону в зависимости от уровня допирования  $\delta$ , так что  $\mu = W(1 + \delta)$ . Такое поведение химического потенциала при изменении уровня допирования подтверждается экспериментом [12] и позволяет нам выражать уровень допирования дырочного или электронного типа  $\delta$  в долях полуширины свободной зоны. Примем во внимание тот факт, что в непосредственной близости к нодальному направлению аномальную функцию Грина можно полагать равной нулю. В наших вычислениях мы смоделировали экспериментально наблюдаемую спектральную функцию  $\alpha^2 F(\omega) N_{0nod}$  кусочно-непрерывной функцией, «адаптированной» к спектральной функции  $\alpha^2 F(z)$  одного из представителей купратов Bi2212 ( $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ ) [13–15]. Спектральная функция ЭФ-взаимодействия, изображенная на рис. 1, является характерной для купратов [13–23].

Некоторые расчеты потенциала ЭФ-взаимодействия [24, 25] предсказывают значительно меньшую величину константы ЭФ-взаимодействия, чем это следует из рис. 1. В недавней достаточно точной экспериментальной работе [26] показано, что вычисления [24, 25] противоречат экспериментальным данным и должны быть пересмотрены. В [27] с помощью инверсионного метода константа ЭФ-взаимодействия получается в согласии с [13–15] в диапазоне фононных частот  $\omega < \omega_D$ . В других расчетах (см. также [28] и ссылки в ней) дается значительно более высокое значение константы ЭФ-взаимодействия, чем получено в работах [24, 25]. Заключение о несправедливости подхода [24] сделано также в работе [29], в которой показано, что вычисления работы [24] не могут воспроизвести сильного влияния ЭФ-спаривания на фононный спектр, наблюдаемого в эксперименте. В работе [29] подчеркивается, что такое возрастание ЭФ-спаривания по сравнению с данными работ [24, 25] возникает по причине ЭФ-корреляций в купратах, которые не вовлечены в рассмотрение в работах [24, 25].

Опишем зависимость функции  $\alpha^2 F(z)$  от безразмерной частоты  $z = \omega/\omega_D$  следующим ступенчатым выражением:  $\alpha^2 F(\omega) N_{0nod} = 0$  для  $0 < z < 18/75$ ; 0.5 для  $18/75 < z < 43/75$ ; 0.45 для  $43/75 < z < 55/75$ ; 0.65 для  $55/75 < z < 1$ ;  $4.43 - 3.8z$  для  $1 < z < 1 + 1/6$ ; 0 для  $z > 1 + 1/6$ . Такое адаптированное распределение соответствует упомянутому выше характерному виду  $\alpha^2 F(z)$  (рис. 1). Это позволяет нам вычислить аналитически один из интегралов в (2), что способствует вычислению единственного оставшегося интеграла.

Отличие положения химического потенциала от симметричного в электронной зоне допированного материала в сочетании с глубокой реконструкцией объема Ферми приводит к образованию частотной асимметрии в поведении функций  $\omega \operatorname{Im} Z(\omega)$  и  $\omega \operatorname{Re} Z(\omega)$  в области отрицательных и положительных частот (электронно-дырочная асимметрия). В данной работе мы ограничим наше рассмотрение итерационным подходом к решению системы уравнений (1), (2) и (3). Результаты вычисления СЭ-части ФГ представлены на рис. 2 и 3 в виде графиков, показывающих зависимость от безразмерных параметров  $\lambda$ ,  $W/\omega_D$  и  $T/\omega_D$ . На рис. 2 представлены результаты расчетов для  $W/\omega_D = 5$  [10] при различных температурах для Bi2212. Расчетные кривые наложены на экспериментальные графики, полученные в [30] методом ФУР. Для меньших единицы безразмерных частот поведение действительной части СЭ-части ФГ может быть охарактери-

зовано как «плечо», наблюдавшееся в экспериментах [1, 2, 31]. На рис. 2 видно, что при температурах, существенно меньших температуры сверхпроводящего перехода  $T_c$ , практически весь вклад в действительную составляющую СЭ-части обусловлен фононами. Из рис. 2, 3 также вытекает, что при температурах  $T = 130$  К, превышающих  $T_c$ , появляется заметный порядка 15–20 % нефононный вклад в СЭ-часть, который следует отнести за счет взаимодействия электронов со спиновыми флуктуациями. Становится понятно, что плотность состояний и электронный спектр обнаруживают реконструкцию при значениях частоты порядка нескольких безразмерных единиц. Результаты вычисления  $\text{Re } \Sigma_{nod}(\omega)$  в случае оптимального допирования дырочного типа со степенью  $\delta = 0.16$  при  $T = 130$  К и  $\alpha^2 F(z)$ , моделирующей экспериментально наблюдаемую  $\alpha^2 F(z)$  [13–15] для Bi2212, наложены на экспериментальный график действительной части СЭ из работы [39] для Bi2212 (рис. 3). В диапазоне частот, при которых  $\text{Re } \Sigma_{nod}(\omega)$  отрицательна, экспериментальные данные ФУР практически отсутствуют (за исключением [32], где представлены не слишком определенные результаты). Рисунок 3 наглядно демонстрирует, что полученные в настоящем расчете значения  $\text{Re } \Sigma_{nod}(\omega)$  в частотном диапазоне, важном для образования сверхпроводящих пар  $\omega < 75$  мэВ, совпадает с действительной частью СЭ  $\text{Re } \Sigma_{nod}(\omega)$ , полученной в экспериментах [26, 27]. Константа ЭФ-взаимодействия  $\lambda \approx 1.21$ , оцененная по уклону  $\text{Re } \Sigma_{nod}(\omega) \approx -\lambda\omega$  на рис. 3 при низких частотах, согласуется с оценками [33, 34] и оказывается в полном соответствии с результатами, представленными в обзорах [35, 36]. То обстоятельство, что электроны описываются как рассредоточенные по всему объему Ферми, а не только «лежащими» на поверхности Ферми, позволяет нам описать реконструкцию объема Ферми, обусловленную перенормировкой электронного спектра каскадом фононов, «чувствующих» дно зоны в согласии с экспериментами [37, 38].

Подводя итоги всему изложенному выше, мы приходим к следующим выводам.

1. Рассчитанная в данной работе величина СЭ-части нодальной электронной ФГ для типичного представителя купратов Bi2212 с использованием адаптированной к экспериментальной кривой модели спектральной функции ЭФ-взаимодействия согласуется с экспериментальными данными [30, 39] в диапазоне частот, не превышающих характерные значения энергий фононного спектра. Учет конечности ширины запрещенной зоны приводит

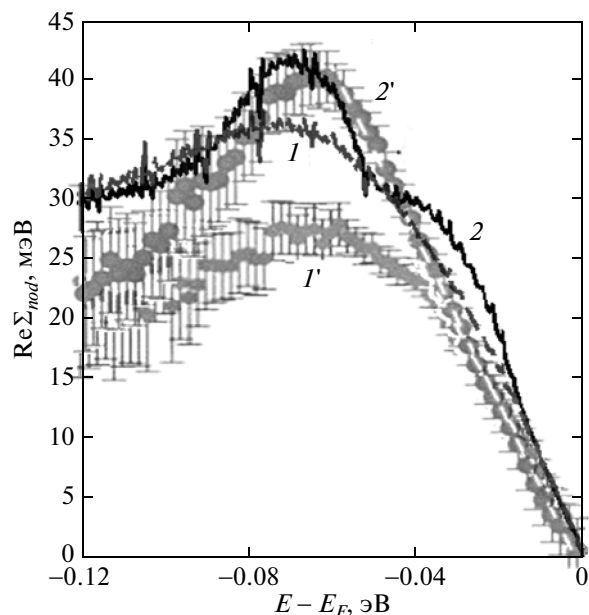


Рис. 2. Расчетная (1, 2) и экспериментальная [30] (1', 2') зависимости действительной части СЭ  $\text{Re } \Sigma_{nod}$  от энергии фононов  $E - E_F$ : кривые 1, 1' для  $T = 130$  К; 2, 2' — для  $T = 15$  К

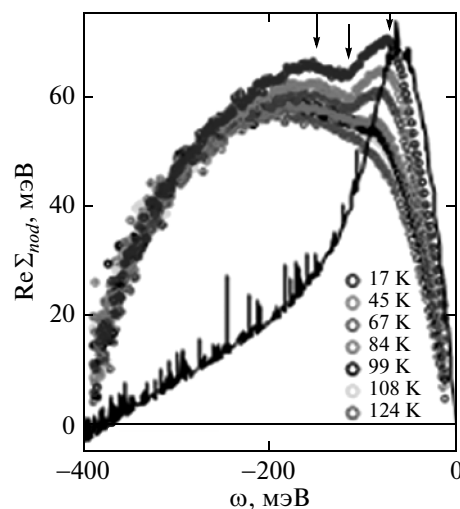


Рис. 3. Расчетная (тонкая линия) зависимость действительной части СЭ  $\text{Re } \Sigma_{nod}$  от энергии фононов  $\omega$  при  $T = 130$  К в сравнении с экспериментальными  $\text{Re } \Sigma_{nod}$  для различных температур из материалов [39]

к убыванию  $\text{Re } \Sigma_{nod}(\omega)$  до нуля при энергиях  $\omega_0 \approx 400$ – $420$  мэВ в согласии с экспериментальными данными [27, 39]. Для воспроизведения такой энергии  $\omega_0$  нет необходимости предпола-

гать наличие высокоэнергетического «хвоста» в спектральных функциях электрон-бозонного взаимодействия [27, 40–43].

2. Данное рассмотрение не сводит описание ФГ исключительно к взаимодействию электрона с фононами, поскольку рассмотрение, проведенное в настоящей работе, использует [11] эффект пика в рассеянии вперед (ПРВ), который является коллективным электронным явлением.

3. Корректно описывая поведение  $\text{Re} \Sigma_{nod}(\omega)$  при частотах, не превышающих частоту фононного спектра, и воспроизводя как энергию  $\omega_0 \approx 420$  мэВ, при которой  $\text{Re} \Sigma_{nod}(\omega)$  стремится к нулю, так и положение низкоэнергетических кинков, полученный в расчетах фононный вклад существенно уступает по величине данным экспериментов [27, 39] в области частот, превышающих характерную частоту фононов. К возможным причинам несовпадения расчетной кривой с экспериментом в диапазоне высоких частот следует отнести неточность, связанную с приближенным описанием вершинной функции Грина, отвечающей за ЭФ-взаимодействие, осложненное электронной корреляцией в форме ПРВ. С меньшей вероятностью неопределенность в определении «голового» электронного спектра или пренебрежение непостоянством  $N_{0nod}(\epsilon)$  в расчетах, в особенности, пренебрежение сингулярностями Ван Хофа, ответственны за данное несовпадение. Это несовпадение не может происходить из-за высокоэнергетического «хвоста» в спектральных функциях электрон-бозонного взаимодействия, отвечающего за взаимодействие электрона с флуктуациями спина, потому что такой подход противоречит эксперименту [44].

Авторы выражают благодарность Ю. Кагану, В. Ф. Елесину, Н. А. Кудряшову за обсуждение настоящей работы.

## ЛИТЕРАТУРА

1. A. Lanzara, P. V. Bogdanov, X. J. Zhou et al., *Nature* **412**, 510 (2001).
2. P.-D. Johnson, T. Valla, A. V. Fedorov et al., *Phys. Rev. Lett.* **87**, 177007 (2001).
3. Z.-X. Shen, A. Lanzara, S. Ishihara et al., *Philos. Mag. B* **82**, 1349 (2002).
4. T. Cuk, F. Baumberger, D. H. Lu et al., *Phys. Rev. Lett.* **93**, 117003 (2004).
5. A. Kaminski, M. Randeria, J. C. Campuzano et al., *Phys. Rev. Lett.* **86**, 1070 (2001).
6. X. J. Zhou, Shi Junren, T. Yoshida et al., *Phys. Rev. Lett.* **95**, 117001 (2005).
7. G.-H. Gweon, S. Y. Zhou, and A. Lanzara, *J. Phys. Chem. Sol.* **65**, 1397 (2004).
8. X. J. Zhou, T. Cuk, T. Devereaux et al., *Handbook of High-Temperature Superconductivity: Theory and Experiment*, ed. by J. R. Schrieffer, Springer (2007), p. 87.
9. A. A. Kordyuk, and S. V. Borisenko, *Low Temp. Physics* **32**, 298 (2006).
10. А. С. Александров, В. Н. Гребенев, Е. А. Мазур, *Письма в ЖЭТФ* **45**, 357 (1987).
11. E. A. Mazur, *Europhys. Lett.* **90**, 47005, 69901 (2010).
12. K. M. Shen, F. Ronning, D. H. Lu et al., arXiv: cond-mat/0407002.
13. R. S. Gonnelli, F. Asdente, and D. Andoreone, *Phys. Rev. B* **49**, 1480 (1994).
14. Y. O. Shiina and A. Nakamura, *Sol. St. Comm.* **76**, 1189 (1990).
15. A. T. M. N. Islam and A. K. M. A. Islam, *J. Supercond.* **13**, 559 (2000).
16. L. N. Bulaevskii, O. V. Dolgov, I. P. Kazakov et al., *Supercond. Science & Technology* **1**, 205 (1988).
17. S. I. Vedeneev, A. G. M. Jensen, P. Samuely et al., *Phys. Rev. B* **49**, 9823 (1994).
18. S. I. Vedeneev, A. G. M. Jansen, A. A. Tsvetkov et al., *Phys. Rev. B* **51**, 16380 (1995).
19. S. I. Vedeneev, A. G. M. Jensen, and P. Wyder, *Physica B* **218**, 213 (1996).
20. D. Shimada, Y. Shiina, A. Mottate et al., *Phys. Rev. B* **51**, 16495 (1995).
21. N. Miyakawa, A. Nakamura, Y. Fujino et al., *Physica C* **282–287**, 1519 (1997).
22. N. Miyakawa, Y. Shiina, T. Kaneko et al., *J. Phys. Soc. Jpn.* **62**, 2445 (1993).
23. N. Miyakawa, Y. Shiina, T. Kido et al., *J. Phys. Soc. Jpn.* **58**, 383 (1989).
24. F. Giustino, M. L. Cohen, and S. G. Louie, *Nature* **452**, 975 (2008).
25. R. Heid, K.-P. Bohnen, R. Zeyher et al., *Phys. Rev. Lett.* **100**, 137001 (2008).

26. L. Zhao, J. Wang, J. Shi et al., arXiv: cond-mat10020120.
27. Bok Jin Mo, Yun Jae Hyun, Choi Han-Yong et al., arXiv:cond-mat09120088.
28. E. G. Maximov, M. L. Kulich, and O. V. Dolgov, arXiv:cond-mat10014859.
29. D. Reznik, G. Sangiovanni, O. Gunnarson et al., Nature E **6**, 452 (2008).
30. I. M. Vishik, W. S. Lee, R.-H. He et al., arXiv: cond-mat1009.0274.
31. T. Valla, T. E. Kidd, Z.-H. Pan et al., Phys. Rev. Lett. **98**, 167003 (2007).
32. D. S. Inosov, A. A. Kordyuk, S. V. Borisenko et al., Phys. Rev. Lett. **99**, 237002 (2007).
33. O. Rosch, O. Gunnarsson, X. J. Zhou et al., Phys. Rev. Lett. **95**, 227002 (2005).
34. M. L. Kulich and O. V. Dolgov, Phys. Rev. B **76**, 132511 (2007).
35. O. Gunnarson and O. Rosch, J. Phys. Condens. Matter. **20**, 043201 (2008).
36. A. S. Mishchenko, Physics-Uspekhi. **52**, 1193 (2009).
37. Z.-H. Pan, P. Richard, A. V. Fedorov et al., arXiv: cond-mat0610442.
38. M. Ikeda, T. Yoshida, A. Fujimori et al., Phys. Rev. B **80**, 184506 (2009).
39. W. Zhang, G. Liu, L. Zhao et al., Phys. Rev. Lett. **100**, 107002 (2008).
40. E. Schachinger and J. P. Carbotte, Phys. Rev. B **77**, 094524 (2008).
41. S. V. Dordevich, C. C. Homes, J. J. Ty et al., Phys. Rev. B **71**, 104529 (2005).
42. E. Schachinger and J. P. Carbotte, Phys. Rev. B **80**, 094521 (2009).
43. E. Schachinger, J. P. Carbotte, and T. Timusk, Europhys. Lett. **86**, 67003 (2009).
44. P. Bourges, in: *The gap Symmetry and Fluctuations in High Temperature Superconductors*, ed. by J. Bok, G. Deutscher, D. Pavuna, and S. A. Wolf, Plenum Press (1998), p. 349 (V. 371 in NATO ASI series, Physics); arXiv:cond-mat9901333.