Teoretyczne aspekty nadprzewodnictwa w tlenkach kobaltu

M. Mierzejewski

Instytut Fizyki, Uniwersytet Śląski, Katowice

E. Kochetov

JINR, DUBNA

A. Ferraz

International Center of Condensed Matter Physics, Univ. of Brasilia

plan

Unikalne własności nadprzewodników wysokotemperaturowych (HTSC)

plan

Unikalne własności nadprzewodników wysokotemperaturowych (HTSC)

- układy qwazi-dwuwymiarowe

plan

Unikalne własności nadprzewodników wysokotemperaturowych (HTSC)

- układy qwazi-dwuwymiarowe
- nadprzewodnictwo występuje w pobliżu fazy izolatora Motta

plan

Unikalne własności nadprzewodników wysokotemperaturowych (HTSC)

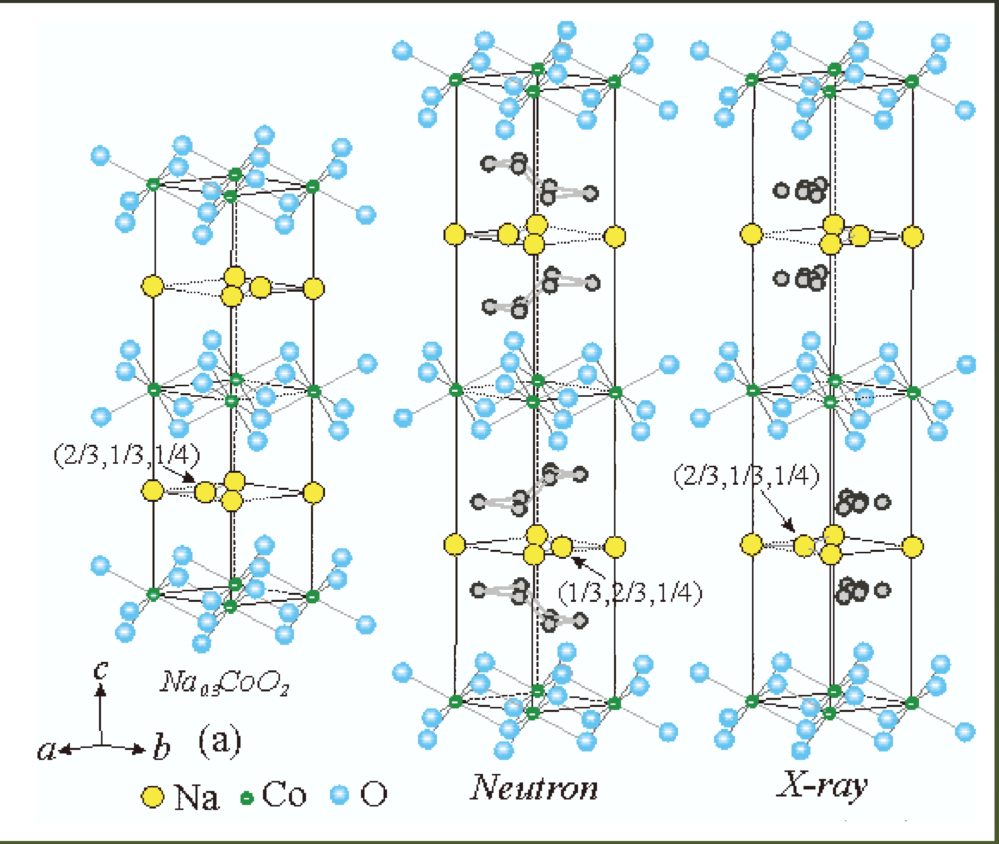
- układy qwazi-dwuwymiarowe
- nadprzewodnictwo występuje w pobliżu fazy izolatora Motta
- duża wartość J

plan

Unikalne własności nadprzewodników wysokotemperaturowych (HTSC) (kobaltowych)

- układy qwazi-dwuwymiarowe ✓
- nadprzewodnictwo występuje w pobliżu fazy izolatora Motta ✓
- duża wartość J ?

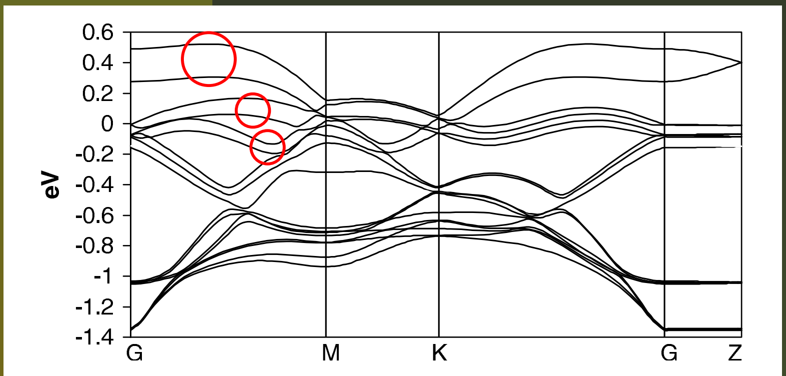
$Na_xCoO_2 \cdot yH_20$: modele 2D/3D



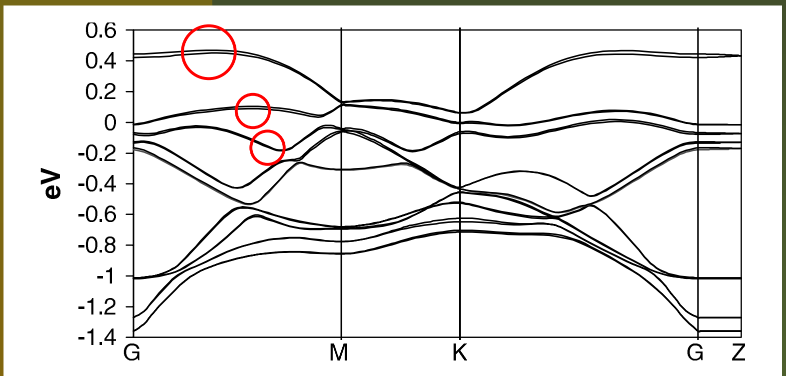
$Na_xCoO_2 \cdot yH_20$: modele 2D/3D

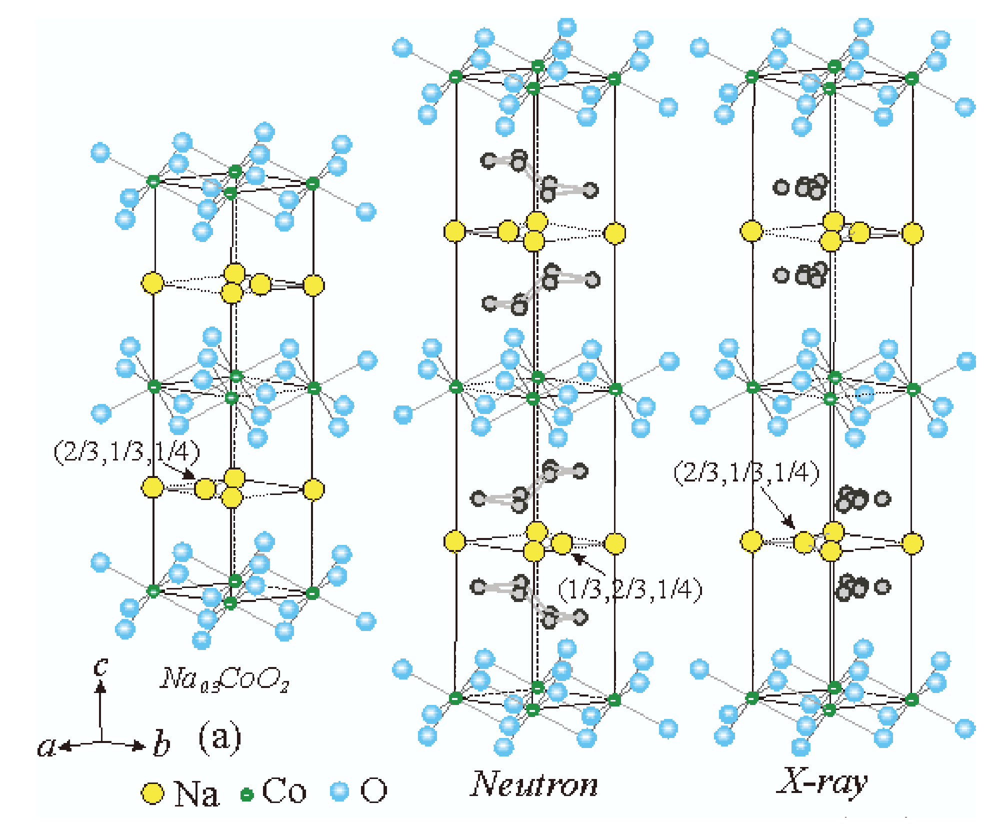
Marianetti, PRL'04:

$Na_{1/3}CoO_2$



$Na_{1/3}CoO_2(H_2O)_{4/3}$



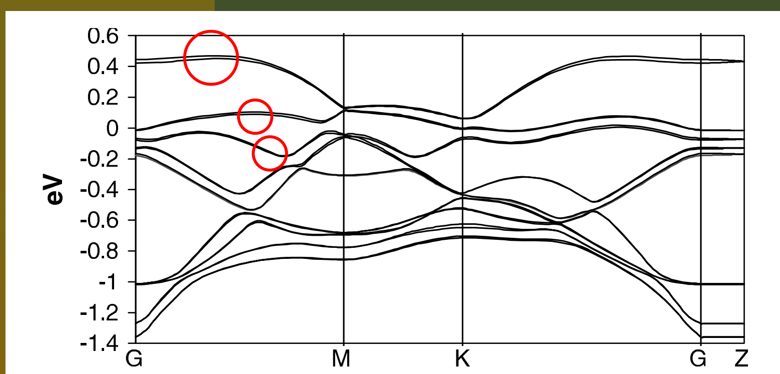


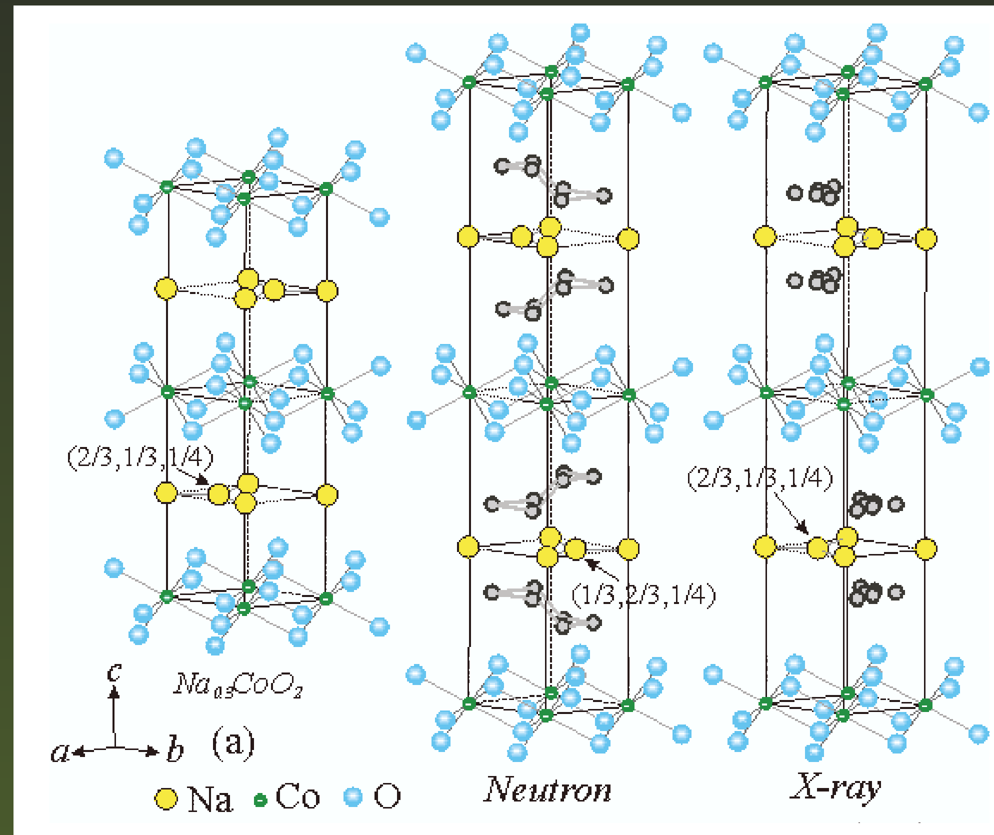
$Na_xCoO_2 \cdot yH_20$: **modele 2D/3D**

Marianetti, PRL'04:

$Na_{1/3}CoO_2$

$Na_{1/3}CoO_2(H_2O)_{4/3}$





Jin, PRL'03: $\rho_c/\rho_{ab} \sim 10^3$

korelacje elekronowe

Brak bezpośrednich danych:

- obliczenia z pierwszych zasad (Zou, PRB'04; Zhang, PRL'04):
  większość nośników : a_{1g}
  szerokość pasma: $W \simeq 1 \div 1.6$ eV
  odpychanie Coulombowskie: $U \simeq 4$ eV

korelacje elekronowe

Brak bezpośrednich danych:

- obliczenia z pierwszych zasad (Zou, PRB'04; Zhang, PRL'04):
  większość nośników : a_{1g}
  szerokość pasma: $W \simeq 1 \div 1.6$ eV
  odpychanie Coulombowskie: $U \simeq 4$ eV
- szerokość pasma wyznaczona z ARPES
  $\mathrm{Na_{0.6}CoO_2}$: $t \simeq 10 \div 30$ meV (Yang, PRL'04)
  $\mathrm{Na_{0.7}CoO_2}$: $t \simeq 10$ meV (Hasan, PRL'04)
  $\mathrm{Na_{0.3}CoO_2}$: $W \simeq 200$ meV (Hasan, cond-mat/0501530)

korelacje elekronowe

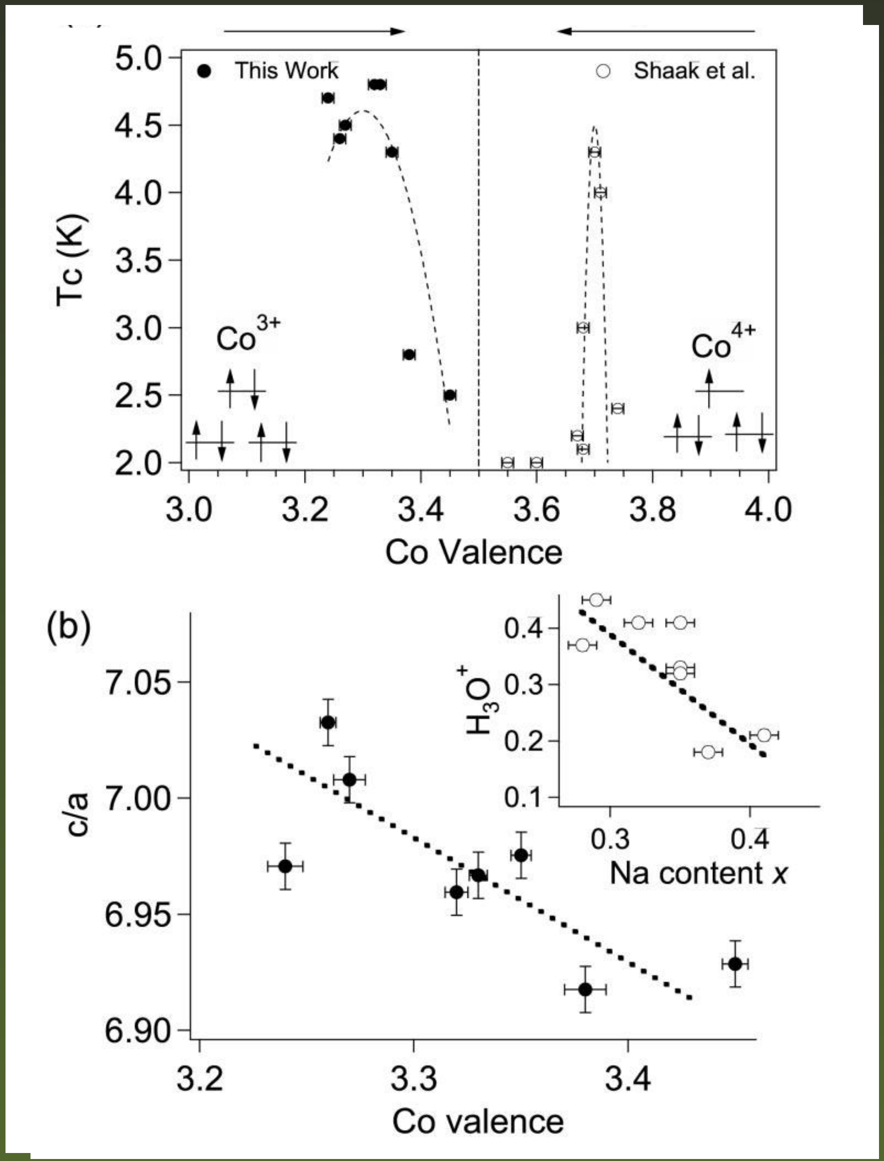
Brak bezpośrednich danych:

- obliczenia z pierwszych zasad
  (Zou, PRB'04; Zhang, PRL'04):
  większość nośników : a_{1g}
  szerokość pasma: $W \simeq 1 \div 1.6$ eV
  odpychanie Coulombowskie: $U \simeq 4$ eV
- szerokość pasma wyznaczona z ARPES
  $\mathrm{Na_{0.6}CoO_2}$: $t \simeq 10 \div 30$ meV (Yang, PRL'04)
  $\mathrm{Na_{0.7}CoO_2}$: $t \simeq 10$ meV (Hasan, PRL'04)
  $\mathrm{Na_{0.3}CoO_2}$: $W \simeq 200$ meV (Hasan, cond-mat/0501530)
- rozbieżność między LDA i ARPES $\longrightarrow$ korelacje elektronowe

koncentracja nośników w pł. CoO_2

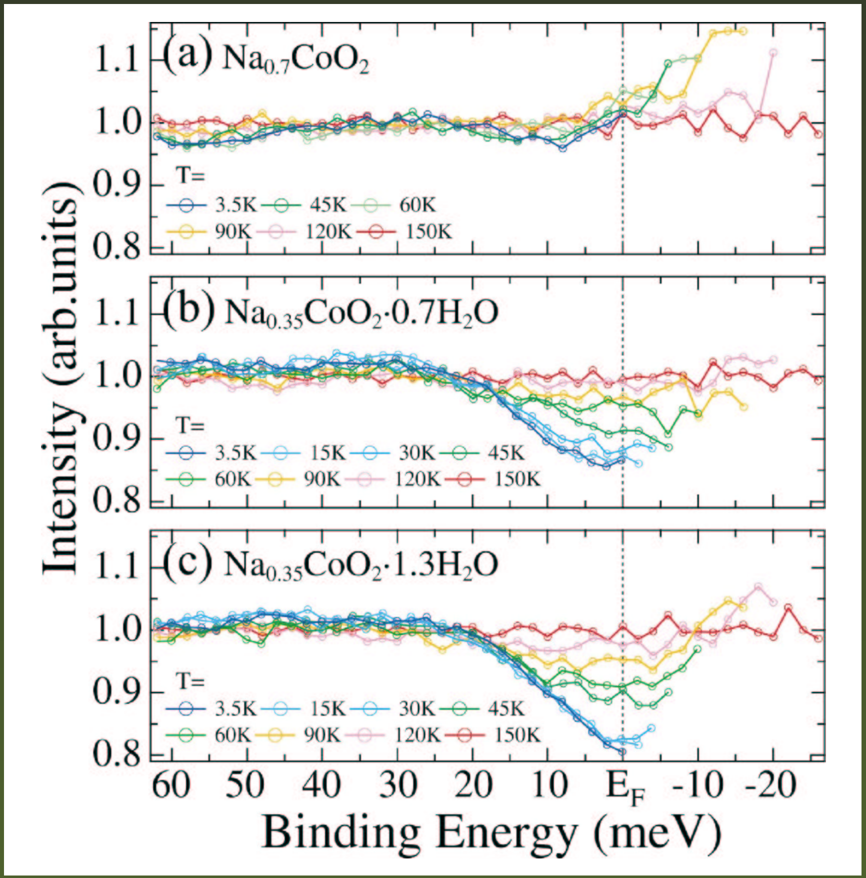
$Na_xCoO_2 \cdot yH_20$:
jon hydronowy (H_3O^+) dodatkowym źródłem nośników (Milne, PRL'04)

ARPES ??



obecność pseudoszczeliny

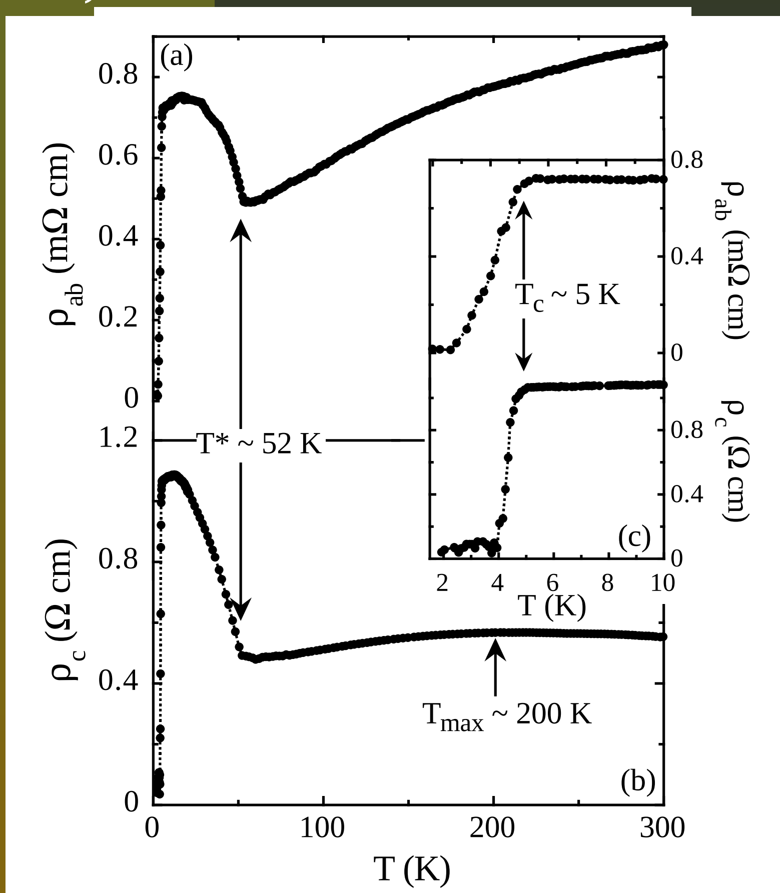
Laser-excited PES
Shimojima, PRB’05



$$k_B T_c \simeq 1 \text{ meV}$$

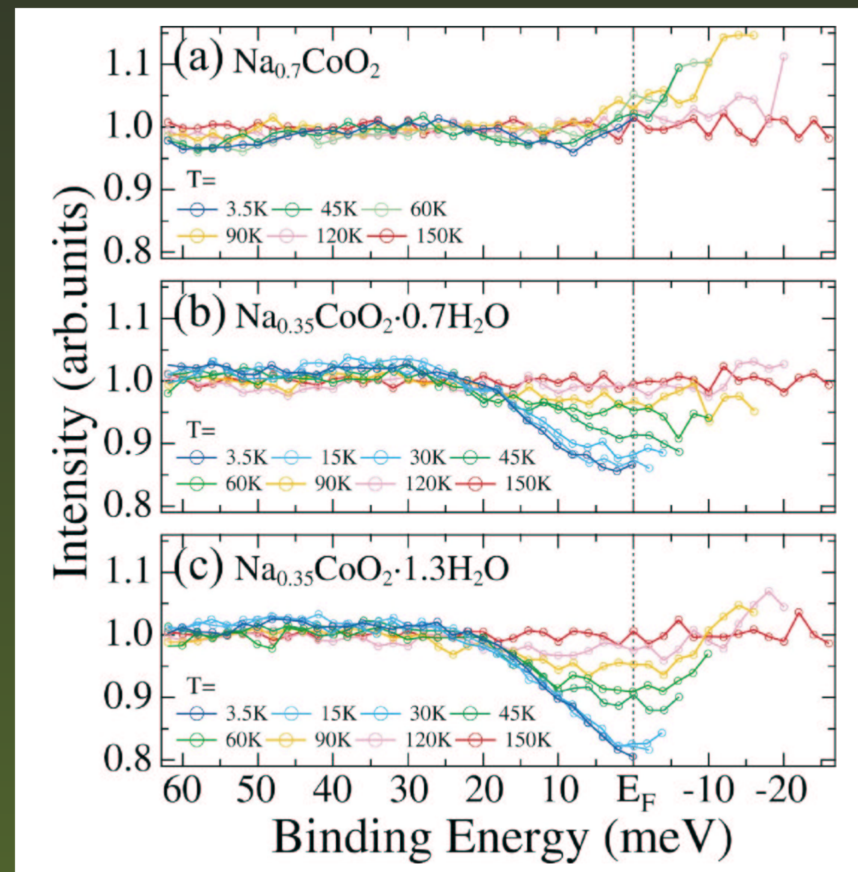
obecność pseudoszczeliny

Jin, PRL'03



Laser-excited PES

Shimojima, PRB'05

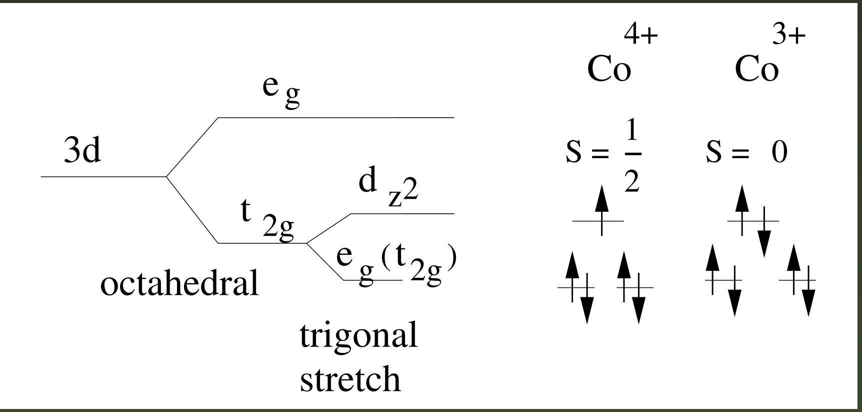


$$k_B T_c \simeq 1 \text{ meV}$$

modele jednopasmowe/wielopasmowe

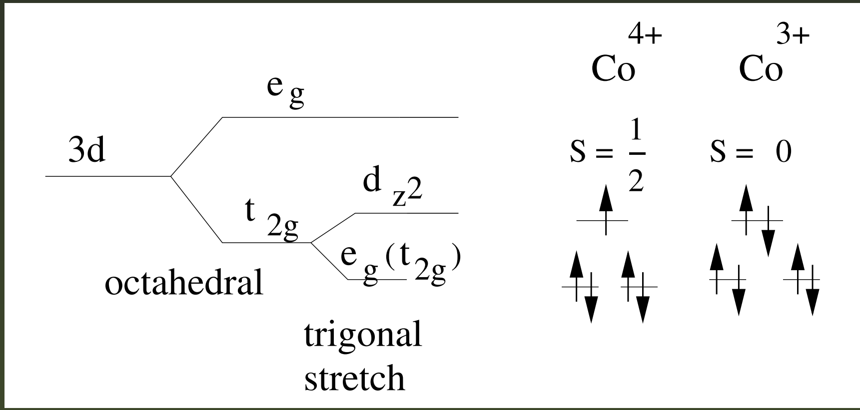
Pole krystaliczne:

Baskaran, PRL’03

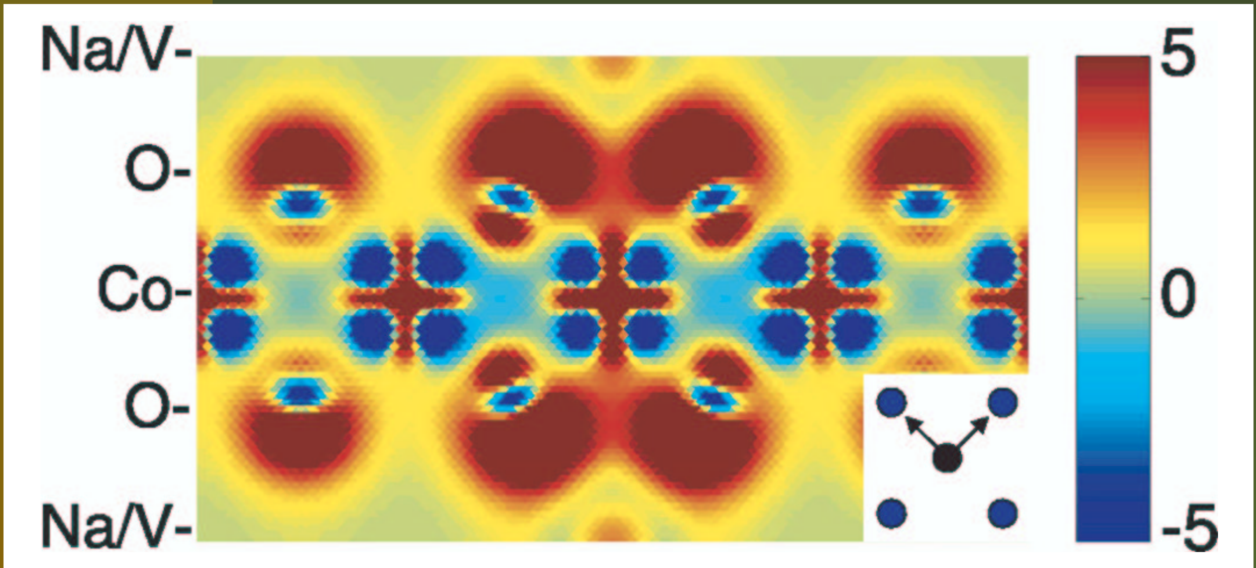


modele jednopasmowe/wielopasmowe

Pole krystaliczne:
Baskaran, PRL’03



LDA: $\rho(Na_{1/3}CoO_2) - \rho(CoO_2)$ (Marianetti, PRL’04)

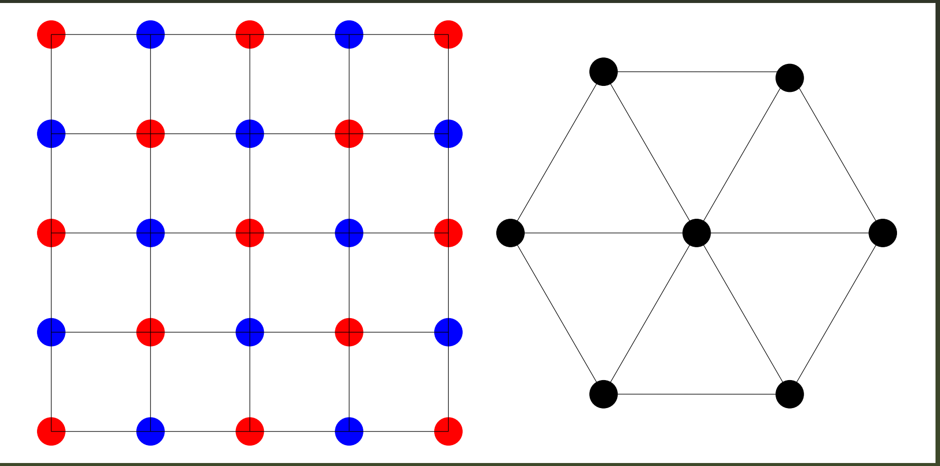


model t–J K. Chao, J. Spałek, A.Oleś, J. Phys. C (1977)

$$H = -t \sum_{\langle ij\rangle\sigma} c^\dagger_{i\sigma} c_{j\sigma}$$
$$+J \sum_{\langle ij\rangle} \left(S_i \cdot S_j - \frac{1}{4} n_i n_j\right)$$

model t–J K. Chao, J. Spałek, A.Oleś, J. Phys. C (1977)

$$H = -t \sum_{\langle ij\rangle\sigma} c^\dagger_{i\sigma} c_{j\sigma}$$
$$+J \sum_{\langle ij\rangle} \left(S_i \cdot S_j - \tfrac{1}{4} n_i n_j\right)$$



Dla sieci kwadratowej: $\boxed{H = -t \sum_{\langle i,j\rangle\sigma} c^\dagger_{i\sigma} c_{j\sigma}}$

- brak frustracji w oddziaływaniu $\boxed{J \sum_{\langle i,j\rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}$
- symetria $t \to -t$: $\boxed{c \to -c \text{ albo } c \to -c}$
- symetria cząstka–dziura: $t \to -t$, $c_{i\sigma} \to c^\dagger_{i-\sigma}$

t–J: obsadzenie węzłów sieci

Jak uwzględnić pojedyncze obsadzenie węzłów sieci

t–J: obsadzenie węzłów sieci

Jak uwzględnić pojedyncze obsadzenie węzłów sieci

Niewolnicze bozony (*slave boson* - SB):

$$c_{i\sigma} = f_{i\sigma} b_i^\dagger \qquad b_i^\dagger b_i + \sum_\sigma f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} \equiv Q_i = 1$$

t–J: obsadzenie węzłów sieci

Jak uwzględnić pojedyncze obsadzenie węzłów sieci

Niewolnicze bozony (*slave boson* - SB):

$$c_{i\sigma} = f_{i\sigma} b_i^\dagger \qquad b_i^\dagger b_i + \sum_\sigma f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} \equiv Q_i = 1$$

Niewolnicze fermiony (*slave fermion* - SF):

$$c_{i\sigma} = b_{i\sigma} f_i^\dagger \qquad f_i^\dagger f_i + \sum_\sigma b_{i\sigma}^\dagger b_{i\sigma} \equiv Q_i = 1$$

t–J: obsadzenie węzłów sieci

Jak uwzględnić pojedyncze obsadzenie węzłów sieci

Niewolnicze bozony (*slave boson* - SB):

$$c_{i\sigma} = f_{i\sigma} b_i^\dagger \qquad b_i^\dagger b_i + \sum_\sigma f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} \equiv Q_i = 1$$

Niewolnicze fermiony (*slave fermion* - SF):

$$c_{i\sigma} = b_{i\sigma} f_i^\dagger \qquad f_i^\dagger f_i + \sum_\sigma b_{i\sigma}^\dagger b_{i\sigma} \equiv Q_i = 1$$

Średnie pole : $< Q_i >= 1$, separacja pól f i b

SB $\rightarrow$ antyferromagnetyzm zanika dla $\delta = 0$ (Feng, PRB'94)

SF $\rightarrow$ antyferromagnetyzm stabilny dla $\delta =< 0.6$ (Kane, PRB'90)

M.M., E. Kochetov (DUBNA), A. Ferraz (BRASIL)

SF:$c_{i\sigma} = b_{i\sigma} f_i^\dagger = (b_{i\sigma} e^{i\phi_i})(f_i e^{i\phi_i})^\dagger$

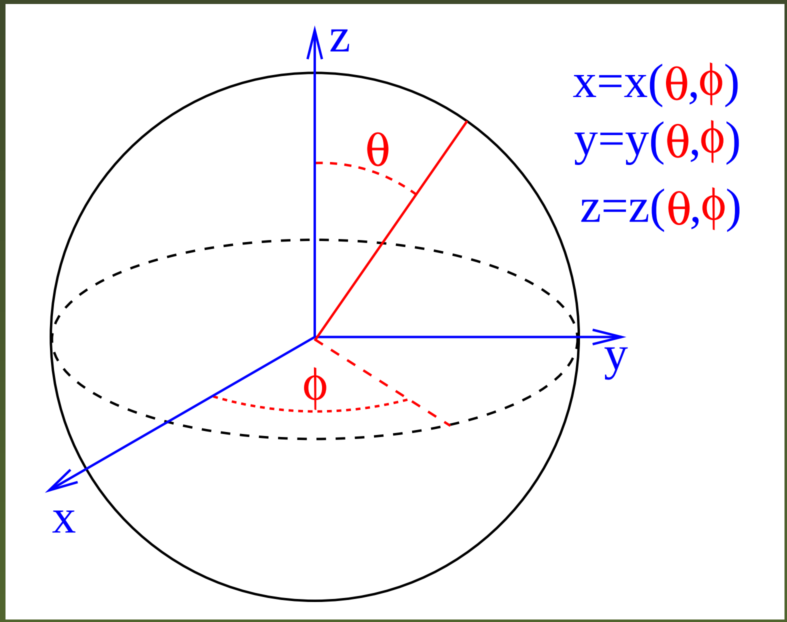
$$Z_{t-J} = \int \prod_i D\bar{b}_{i\uparrow} Db_{i\uparrow} D\bar{b}_{i\downarrow} Db_{i\downarrow} D\overline{f_i} D f_i \; e^{S_{t-J}(\bar{b}_\sigma, b_\sigma, f)}$$

M.M., E. Kochetov (DUBNA), A. Ferraz (BRASIL)

SF:$c_{i\sigma} = b_{i\sigma} f_i^\dagger = (b_{i\sigma} e^{i\phi_i})(f_i e^{i\phi_i})^\dagger$

$$Z_{t-J} = \int \prod_i D\bar{b}_{i\uparrow} D b_{i\uparrow} D\bar{b}_{i\downarrow} D b_{i\downarrow} D\overline{f}_i D f_i \; e^{S_{t-J}(\bar{b}_\sigma, b_\sigma, f)}$$

Pojedyncze obsadzenie $\rightarrow \bar{b}_{i\uparrow} b_{i\uparrow} + \bar{b}_{i\downarrow} b_{i\downarrow} + \overline{f}_i f_i = 1$



M.M., E. Kochetov (DUBNA), A. Ferraz (BRASIL)

SF:$c_{i\sigma} = b_{i\sigma} f_i^\dagger = (b_{i\sigma} e^{i\phi_i})(f_i e^{i\phi_i})^\dagger$

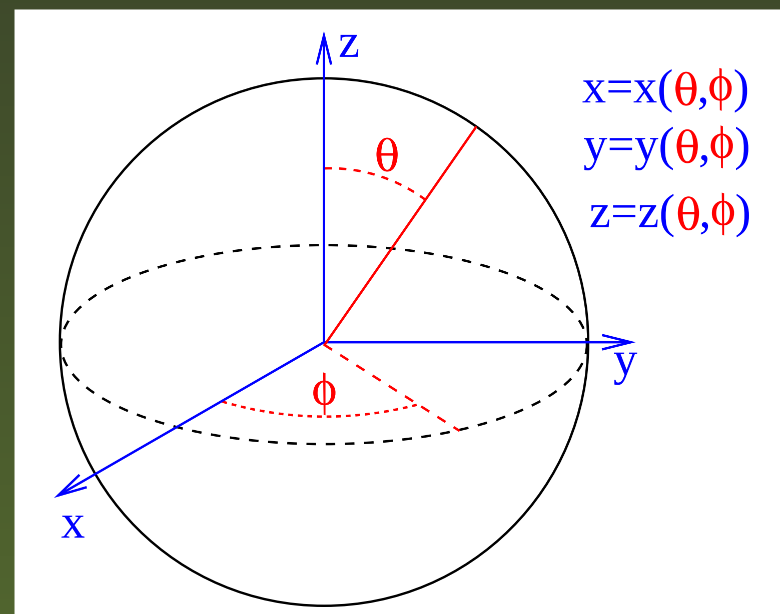
$$Z_{t-J} = \int \prod_i D\bar{b}_{i\uparrow} Db_{i\uparrow} D\bar{b}_{i\downarrow} Db_{i\downarrow} D\overline{f_i} D f_i \, e^{S_{t-J}(\bar{b}_\sigma, b_\sigma, f)}$$

Pojedyncze obsadzenie $\rightarrow \bar{b}_{i\uparrow} b_{i\uparrow} + \bar{b}_{i\downarrow} b_{i\downarrow} + \overline{f}_i f_i = 1$

$$b_{i\uparrow}(z_i, \xi_i) = \frac{\exp(i\phi_i)}{\sqrt{1 + |z_i|^2 + |\xi_i|^2}}$$

$$b_{i\downarrow}(z_i, \xi_i) = b_{i\uparrow}(z_i, \xi_i) z_i$$

$$f_i(z_i, \xi_i) = b_{i\uparrow}(z_i, \xi_i) \xi_i$$



Zmienne z_i, ξ_i są niezależne !!!

wady i zalety parametryzacji

zalety:

- pojedyncze obsadzenie węzłów sieci
- zmienne z, ξ niezależne
- "gauge" niezmienniczość pól z, ξ

$c_{i\sigma} = f_{i\sigma} b_i^\dagger = (f_{i\sigma} e^{i\phi_i})(b_i e^{i\phi_i})^\dagger$

wady:

- Powiązanie z, ξ z polami fermionów i bozonów
- Przybliżenia mogą łamać symetrie

interpretacja:

- ξ - holony o ładunku e, z - spinony

mechanizm RVB

$$J \sum_{<ij>} \left(S_i \cdot S_j - \frac{1}{4} n_i n_j \right) \rightarrow -J \sum_{<ij>} \Delta_{ij} \left(c^\dagger_{i\uparrow} c^\dagger_{j\downarrow} - c^\dagger_{i\downarrow} c^\dagger_{j\uparrow} \right) + h.c.$$

mechanizm RVB

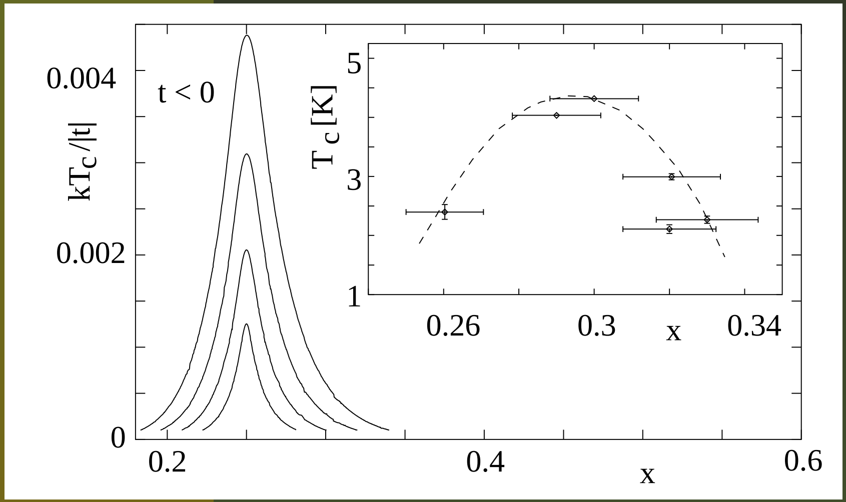
$$J \sum_{<ij>} \left(S_i \cdot S_j - \frac{1}{4} n_i n_j \right) \rightarrow -J \sum_{<ij>} \Delta_{ij} \left(c^\dagger_{i\uparrow} c^\dagger_{j\downarrow} - c^\dagger_{i\downarrow} c^\dagger_{j\uparrow} \right) + h.c.$$

zastosowanie do $\mathrm{Na_xCoO_2 \cdot yH_20}$:

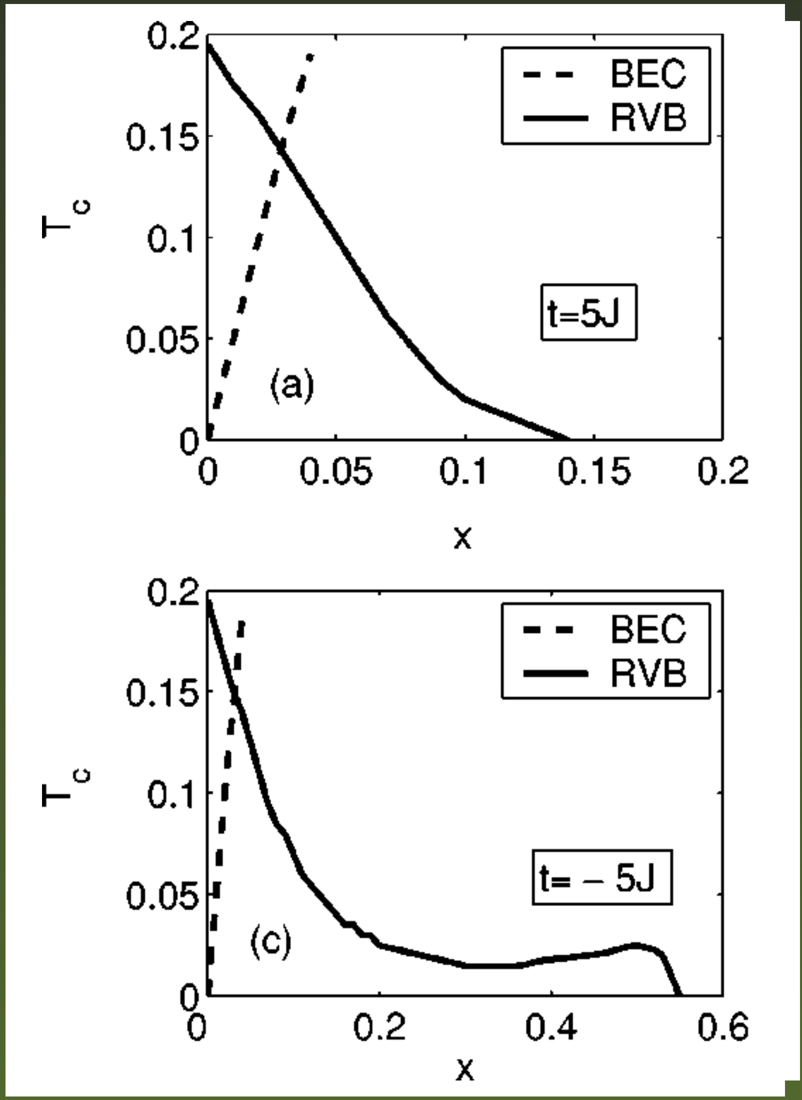
- sieć trójkątna
- spinony (z_i) w przybliżeniu średniego pola zaniedbane oddziaływanie holon-spinon

$Na_xCoO_2 \cdot yH_20$

M.M. E.K. A.F



MF SB: P. Lee, PRB 69 (2004)

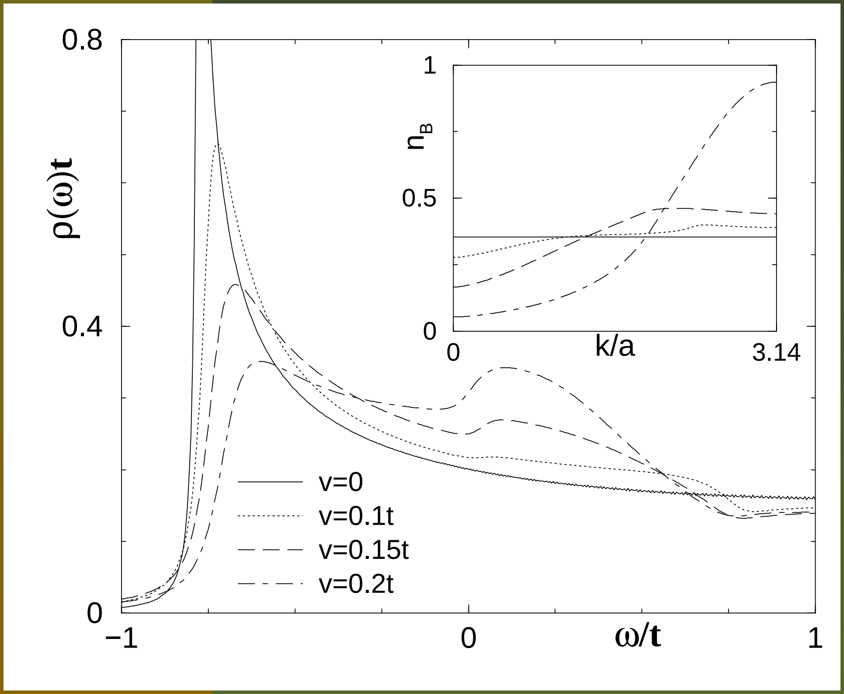


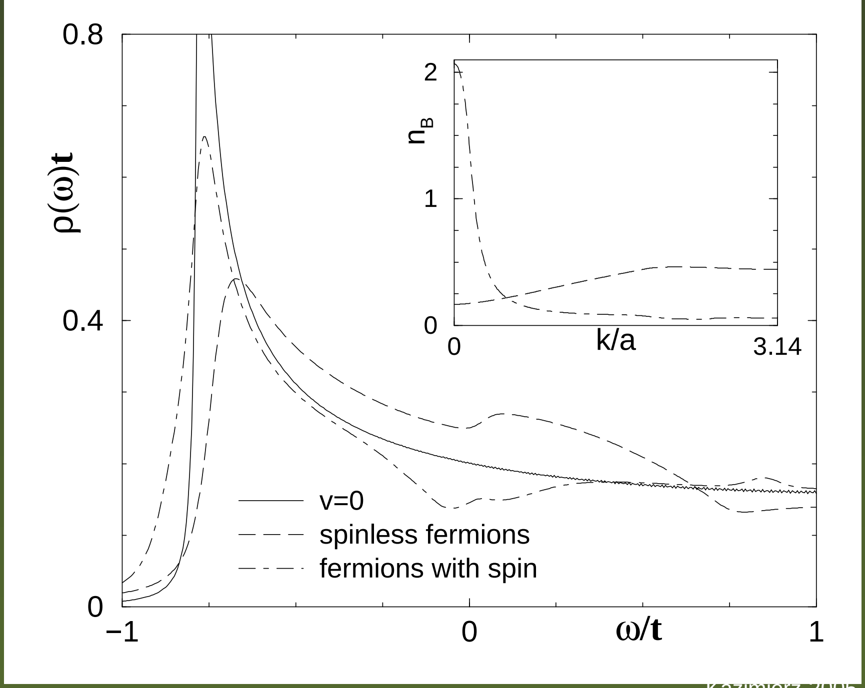
RVB - poza przybliżeniem MF

$$
\begin{aligned}
H_{eff} &= -t \sum_{\langle i,j \rangle} f_i f_j^\dagger - 2v \sum_{\langle i,j \rangle} f_i f_j (b_j^\dagger - b_i^\dagger) + H.c. \\
&+ \Delta_B \sum_i b_i^\dagger b_i - \mu \sum_i (2 b_i^\dagger b_i + f_i^\dagger f_i),
\end{aligned}
$$

RVB - poza przybliżeniem MF

$$H_{eff} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} f_i f_j^\dagger - 2v \sum_{\langle i,j \rangle} f_i f_j (b_j^\dagger - b_i^\dagger) + H.c.$$
$$+ \Delta_B \sum_i b_i^\dagger b_i - \mu \sum_i (2 b_i^\dagger b_i + f_i^\dagger f_i),$$





podsumowanie

Najważniejsze pytania:

- koncentracja nośników
- symetria parametru porządku: singlet/tryplet

podsumowanie

Najważniejsze pytania:

- koncentracja nośników
- symetria parametru porządku: singlet/tryplet

Wiemy:

- układy kwazi–dwuwymiarowe
- istotne znaczenie korelacji elektronowych

podsumowanie

Najważniejsze pytania:

- koncentracja nośników
- symetria parametru porządku: singlet/tryplet

Wiemy:

- układy kwazi–dwuwymiarowe
- istotne znaczenie korelacji elektronowych

Przypuszczalnie:

- najprostszy model: 2D t–J