

Электрон-фононное взаимодействие и высокоэнергетическая часть спектра ARPES купратов с различным допированием

Э. А. Жилеева, Д. В. Мосейкин, А.Э. Мясникова

Южный федеральный университет, г. Ростов-на-Дону, Россия



Купраты – сверхпроводники. Можем ли мы сказать, что приблизились на шаг к пониманию процессов фотоэмиссии в веществах, демонстрирующих сверхпроводимость? Да, можем. В предыдущих теоретических моделях были рассчитаны спектры фотоэмиссии (ARPES) в следующих моделях купратов:
 - расчет, учитывающий электронные корреляции и электрон-фононное взаимодействие (ЭФВ) в модели полярона малого радиуса [1,2];
 - для дальнедействующего ЭФВ (когда радиус полярона больше постоянной решетки) был сделан расчет без учета электронных корреляций [3,4].
 К сожалению, результаты двух указанных моделей при высокой концентрации носителей расходятся друг с другом. В представленной работе рассчитываются спектры ARPES при учете как электронных корреляций, так и дальнедействующего ЭФВ при всех уровнях допирования как электронами, так и дырками. Теоретически рассчитанные для такой модели спектры хорошо согласуются с экспериментальными, как видно на примерах ниже.

Зонная структура купратов:

В недопированных купратах исходным состоянием носителя является биполярон при $k < k_0$ и делокализованный носитель в противном случае. В первом случае при поглощении кванта света электрон покидает кристалл, и происходит частичный распад биполяронной поляризационной шубы до поляронной. Однако минимуму энергии системы это состояние не соответствует. В результате релаксации системы один из электронов переходит в локализованное состояние, восстанавливая биполярон, а дырка оказывается на вершине валентной зоны и формирует дырочный полярон. Во втором случае ($k > k_0$) исходное состояние – делокализованный электрон. Образующаяся в результате фотоэффекта дырка релаксирует к вершине зоны и автолокализуется.

электронные корреляции плюс ЭФВ

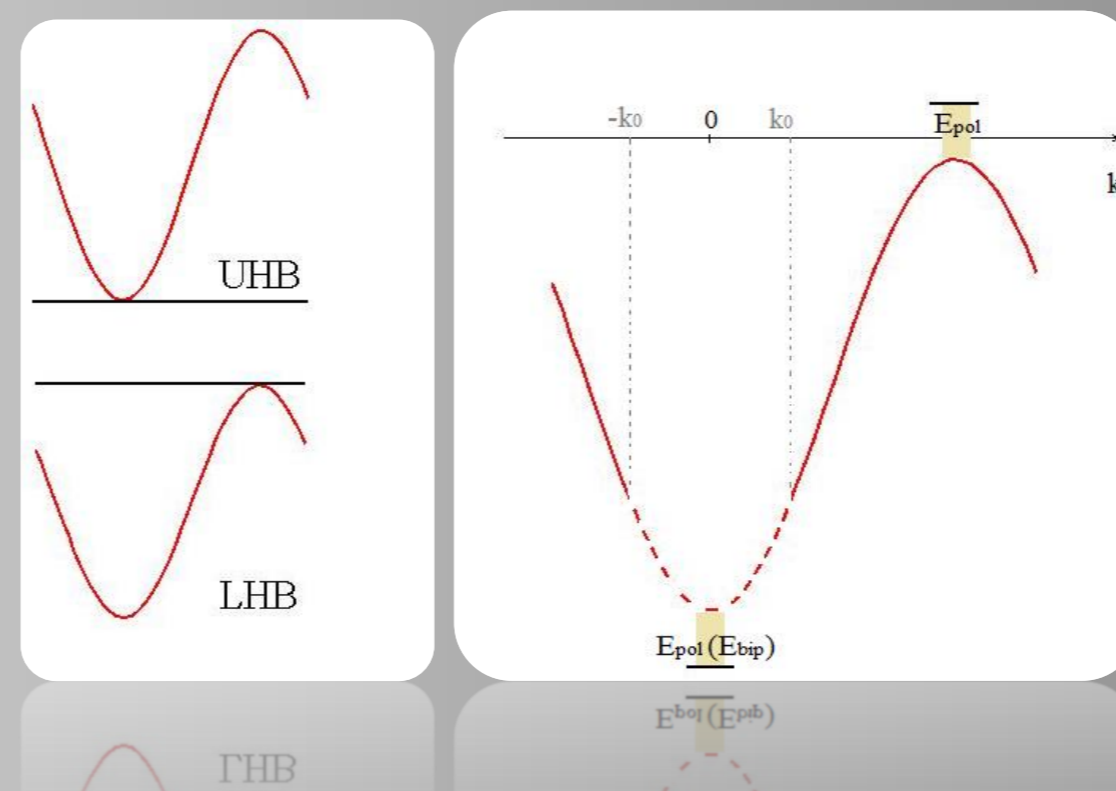
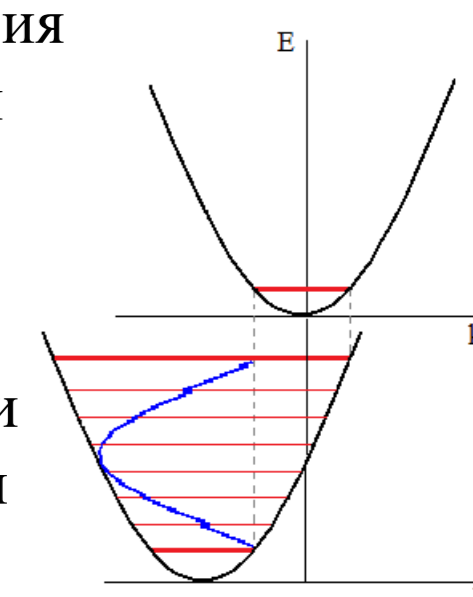


Иллюстрация формирования деформации фононного вакуума с рождением фононов при образовании полярона



Недопированные купраты

Излученные при распаде и формировании деформации фононного вакуума фононы обуславливают широкую полосу в спектре вследствие того, что вероятность излучения различного числа фононов распределена в соответствии с распределением Пуассона [3]. “Вертикальная дисперсия” получается за счет различия энергии, полученной кристаллом при релаксации, в двух описанных случаях [4].

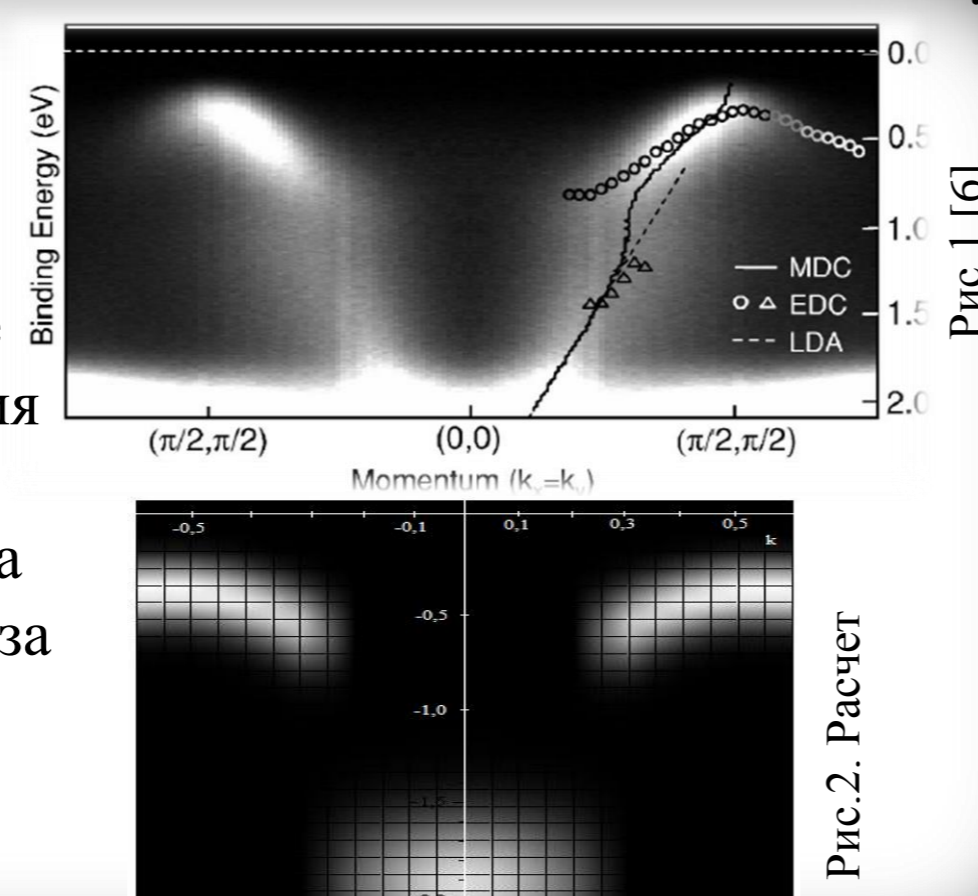


Рис.2. Расчет

Допирование электронами слабое

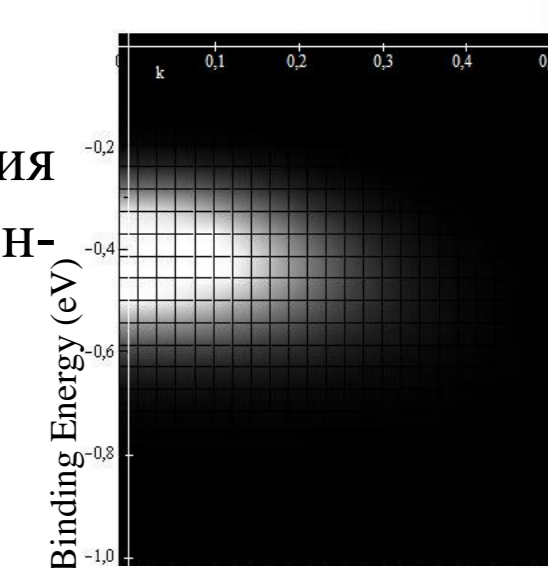
Исходное состояние - электронный полярон большого радиуса. Конечное: фотоэлектрон + фононы. Уравнение фотоэффекта (закон сохранения энергии) выглядит так:

$$E_{pol} + \hbar\Omega = E_{kin} + \Phi + \nu\hbar\omega$$

$\hbar\Omega$ – энергия фотона, Φ – работа выхода, $\nu\hbar\omega$ – это энергия фононов, образованных вследствие распада поляризационной шубы. Число излученных фононов ν различно в разных актах фотоэмиссии, вероятность P_ν рождения ν квантов определяется распределением Пуассона [3]:

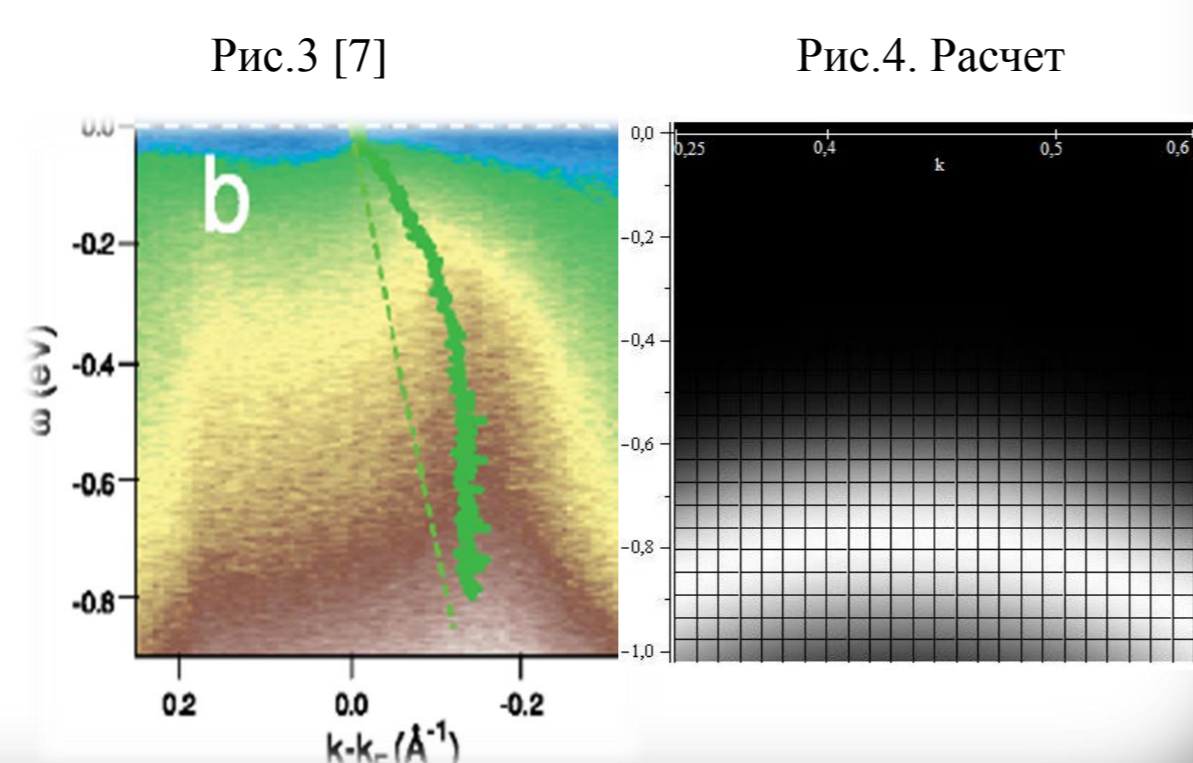
$$P_\nu = \frac{\bar{\nu}^{\nu-1}}{(\nu-1)!} e^{-\bar{\nu}}, \quad \text{где } \bar{\nu} = \frac{2E_p}{\hbar\omega}$$

Рис.7. Расчет



Дырочное допирование ниже оптимального уровня

С увеличением концентрации носителей, когда все состояния дырочных поляронов уже заняты, при фотоэмиссии образуются дырочные биполяроны. Что приводит к смещению полосы в область больших энергий связи (Рис.4). Экспериментальный Рис.3 [7] демонстрирует этот процесс.



Допирование электронами ниже оптимального

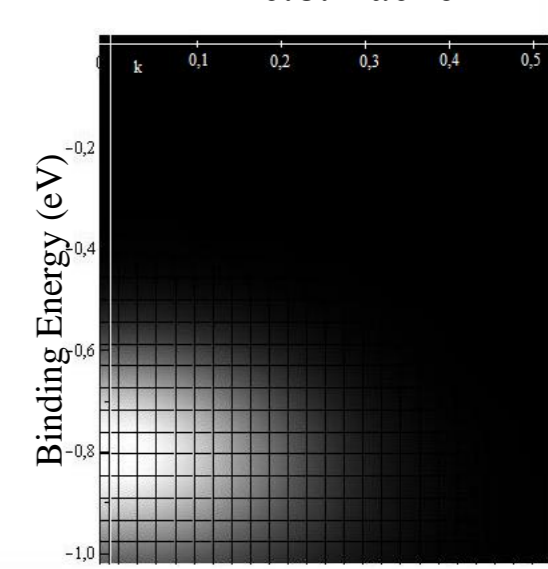
С увеличением допирования поляронные состояния заменяются биполяронными. Закон сохранения энергии:

$$E_{bip} + \hbar\Omega = E_{pol} + E_{kin} + \Phi + \nu\hbar\omega$$

В данном случае [4]: $\bar{\nu} = \frac{E_{bip}^{pol} - E_{pol}^{pol}}{\hbar\omega}$

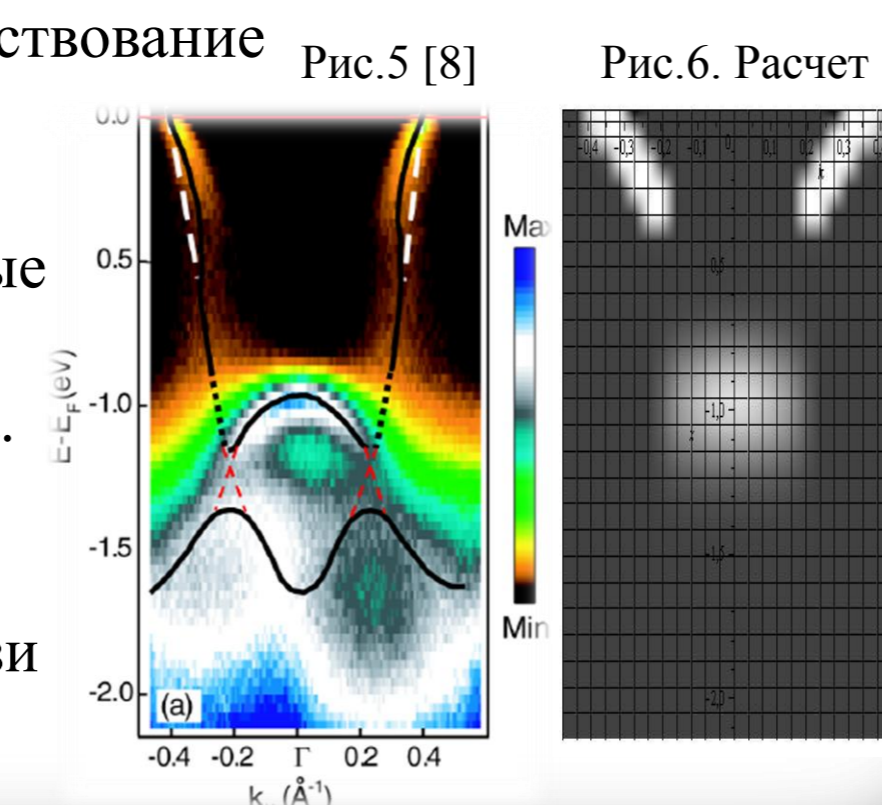
Соответственно энергия связи увеличивается, что наглядно видно из сравнения рис.7 и рис.8.

Рис.8. Расчет



Дырочное допирование выше оптимального уровня

В данном случае также проявляется сосуществование биполяронов (в области $k < k_0$) и делокализованных носителей ($k > k_0$). Однако теперь все дырочные локализованные состояния заняты, и конечным состоянием может быть только делокализованная дырка. Поэтому появляется спектральный вес у поверхности Ферми, и широкая полоса в области $k < k_0$ поднимается от энергий связи около -1.7 эВ до -1 эВ.



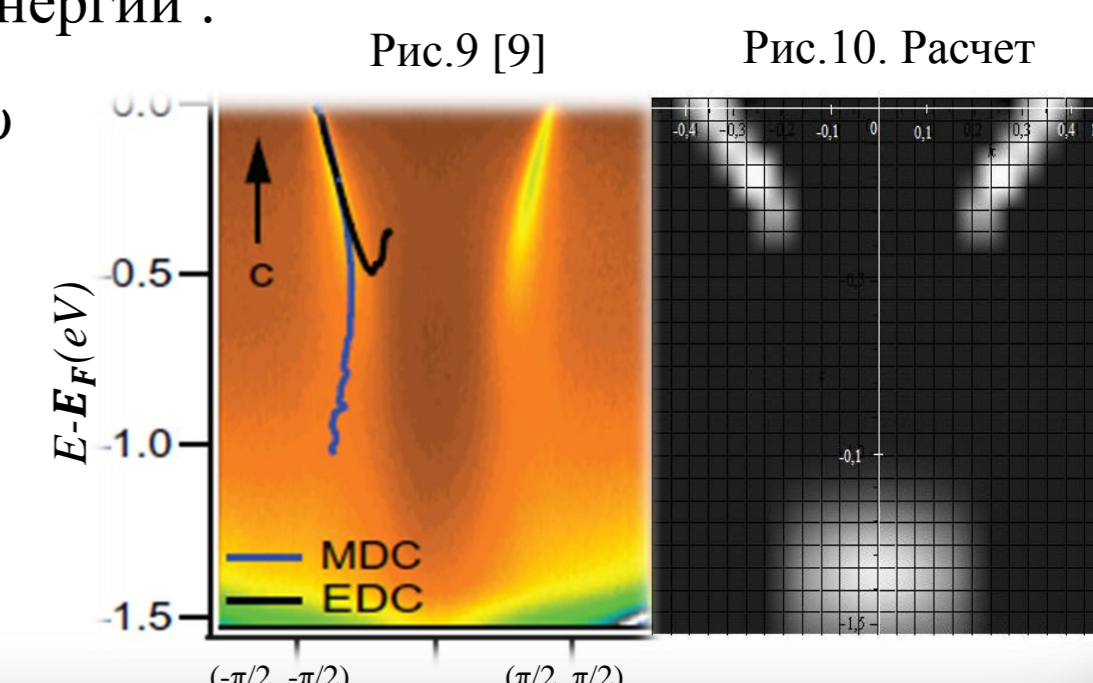
Допирование электронами выше оптимального

Ситуация такая же как и в случае дырочного допирования выше оптимального. Закон сохранения энергии:

$$E_{bip} + \hbar\Omega = E_{bip} + E_{kin} + \Phi + \nu\hbar\omega$$

В данном случае:

$$\bar{\nu} = 2 \frac{E_{bip}^{pol} - E_{pol}^{pol}}{\hbar\omega} + \frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2m_p \hbar\omega}$$



Основные результаты

Новый метод расчета, основанный на использовании когерентных состояний для описания фононного поля [3] и учитывающий релаксацию к основному состоянию [4] сильно взаимодействующей Фрелиховской электрон-фононной системы после фотоэмиссии, позволяет теоретически рассчитать высокоэнергетическую часть спектра ARPES купратов при любом уровне допирования носителями заряда обоих типов. Полученные теоретические результаты находятся не только качественно, но и количественно в согласии с экспериментальными данными. В частности, впервые рассчитана “вертикальная дисперсия” на обеих сторонах фазовой диаграммы купратов, количественно согласующаяся с экспериментом.

1. A. S. Mishchenko and N. Nagaosa, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 036402 (2004)
2. O. Rosch et al., *Phys. Rev. Lett.* **95**, 227002 (2005)
3. A. E. Myasnikova, E. N. Myasnikov, *Phys. Rev. B* **77**, 165136 (2008)
4. A. E. Myasnikova et al., *Phys. Rev. A* **379**, 458 (2015)
5. E. Dagotto, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 763 (1994)
6. F. Ronning, *Phys. Rev. B* **71**, 094518 (2005)
7. T. Valla et al., *Phys. Rev. Lett.* **98**, 167003 (2007)
8. B. P. Xie et al., *Phys. Rev. Lett.* **98**, 147001 (2007)
9. B. Moritz et al., *New Journal of Physics* **11**, 093020 (2009)