

# Зеркальный нестинг и электрон-дырочная асимметрия при сверхпроводящем спаривающем отталкивании

В. И. Белявский, В. В. Капаев, Ю. В. Капаев<sup>1)</sup>

Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 30 июля 2007 г.

Численно исследована зависимость сверхпроводящего параметра порядка  $\Delta(\mathbf{k})$  от импульса относительного движения пары с большим суммарным импульсом  $\mathbf{K}$  при спаривающем отталкивании с учетом кинематического и диэлектрического ограничений передачи импульса при рассеянии. Типичный для купратов и оптимальный для сверхпроводимости при отталкивании контур Ферми с нестингом и зеркальным нестингом располагается в протяженной окрестности седловых точек закона дисперсии. Отклонение от зеркального нестинга обрезает логарифмическую особенность снизу, ограничивая предэкспоненту в  $\Delta(\mathbf{k})$ . Эффективная константа связи определяется степенью электрон-дырочной асимметрии. Подавление вклада малых передач импульсов примесным и электрон-фононным рассеянием способствует увеличению амплитуды параметра порядка. Нестинг контура Ферми приводит к пайерлсовской особенности в кулоновском взаимодействии. Уравнение самосогласования допускает антисимметричные и симметричные решения относительно инверсии импульса. Антисимметричное решение с максимальной амплитудой при синглетном спаривании реализуется только в случае  $\mathbf{K} \neq 0$ .

PACS: 78.47.+p, 78.66.–w

1. Для сверхпроводящего (SC) спаривания при отталкивании необходимо хотя бы одно отрицательное собственное значение ядра  $U(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$  оператора спаривающего взаимодействия [1], что соответствует возникновению области притяжения вне сильного внутрицентрового отталкивания из-за осцилляций спаривающего взаимодействия в реальном пространстве [2]; здесь  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k}'$  – импульсы относительного движения пары до и после рассеяния, соответственно.

Ядро экранированного кулоновского взаимодействия, всюду положительное в импульсном представлении, приводит к тому, что зависящее от импульса нетривиальное решение уравнения самосогласования, определяющее SC параметр порядка  $\Delta(\mathbf{k})$ , не может быть знакопостоянным. Это решение оказывается весьма чувствительным к выбору параметров закона дисперсии частиц, составляющих пару.

Двумерный (2D) закон дисперсии с учетом перескоков в трех координационных сферах ( $t't''$  – модель [3])

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = 2 - 2t(\cos k_x + \cos k_y) + 2t' \cos k_x \cos k_y + t''(\cos 2k_x + \cos 2k_y) \quad (1)$$

хорошо представляет структуру изолиний (рис.1а) вблизи наблюдаемого в фотоэмиссионных экспериментах [4] контура Ферми (FC) недодопированных

купратов при значениях интегралов перескока, близких к  $t = 0.5$ ,  $t' = -0.3t$ ,  $t'' = 0.2t$  (в эВ). Учет перескоков электронов между соседними атомами Cu вдоль диагонали ( $t'$ ) и между вторыми соседними атомами Cu вдоль направлений химических связей Cu–O ( $t''$ ) приводит к асимметрии спектра возбуждений электронов и дырок (электрон-дырочная асимметрия), проявляющейся в наблюдаемых свойствах купратов, в частности, в туннельных спектрах [5]. Электрон-дырочная асимметрия может рассматриваться как один из фундаментальных элементов физики купратов [6].

Почти прямолинейные участки FC, параллельные координатным осям  $k_x$  или  $k_y$ , располагаются в протяженной окрестности седловой точки, симметрично расщепленной ( $s_-$  и  $s_+$ ) относительно положения  $s$  ( $0, \pm\pi$  и  $\pm\pi, 0$ ) седловой точки, соответствующей приближению ближайших соседей ( $t$ -модель:  $t' = t'' = 0$ ,  $t \neq 0$ ), тогда при половинном заполнении FC совпадает со сторонами квадрата, составляющими границу магнитной зоны Бриллюэна родительского соединения. В случае слабого допирования FC  $t$ - модели представляет квадрат со скругленными углами, вписанный в магнитную зону, так что выход за рамки этой простейшей модели необходим для описания наблюдаемого разворота FC на угол  $\pi/4$  относительно границы магнитной зоны.

2. На конечных участках FC, показанного на рис.1а, достаточно хорошо выполняется свойство не-

<sup>1)</sup>e-mail: kopaev@sci.lebedev.ru

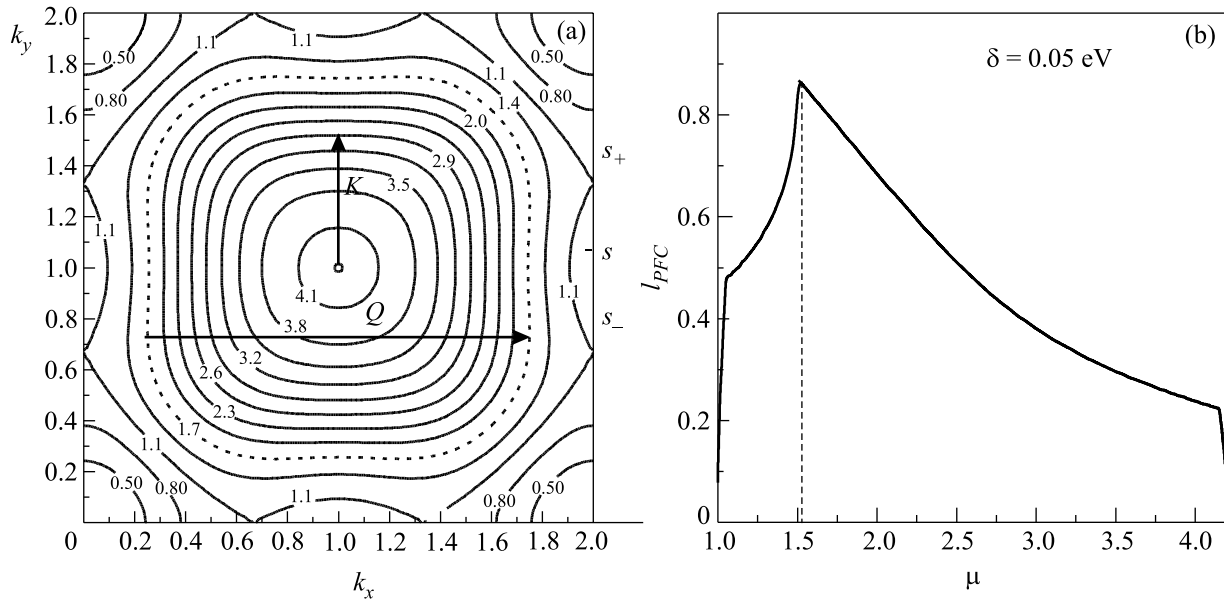


Рис.1. Структура изолиний, соответствующая закону дисперсии (1). Значения энергии в эВ указаны у изолиний (а). Зависимость длины PFC от химического потенциала (в эВ) (b)

стинга  $\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) = -\varepsilon(\mathbf{k})$  для некоторого (вообще говоря, несоизмеримого) импульса  $\mathbf{Q}$  и ему кристаллически эквивалентных. Импульс нестинга  $\mathbf{Q}$  не равен импульсу  $\mathbf{Q}_\pi = (\pi, \pi)$  спиновой антиферромагнитной (AF) структуры родительского соединения.

Нестинг FC при импульсе  $\mathbf{Q} \neq \mathbf{Q}_\pi$  приводит к логарифмической особенности статической обобщенной восприимчивости  $\chi(\mathbf{q})$  при  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$ , допуская неустойчивости в диэлектрических каналах спаривания. Помимо волны спиновой плотности (SDW) с AF вектором  $\mathbf{Q}$ , могут возникать также волна плотности заряда (CDW) и волны плотности тока заряда (CCDW) и спина (SCDW). Конкуренция между триплетными (SDW и SCDW) и синглетными (CDW и CCDW) диэлектрическими каналами может завершиться в пользу одного из последних в области псевдощелевого состояния, формируя, например, основное состояние в виде CCDW с  $d$ -волновой симметрией параметра порядка (DDW) [7].

Таким образом, следствием нестинга FC является возникновение диэлектрической щели  $\Delta_i(\mathbf{k})$  на почти прямолинейных его участках. Закон дисперсии (1) трансформируется в

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon_{1,2}(\mathbf{k}) = \varepsilon_{\pm}(\mathbf{k}, \mathbf{Q}) \pm \sqrt{\varepsilon_{\pm}^2(\mathbf{k}, \mathbf{Q}) + \Delta_i^2(\mathbf{k})}, \quad (2)$$

где  $\varepsilon_{\pm}(\mathbf{k}, \mathbf{Q}) = \varepsilon(\mathbf{k}) \pm \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{Q})$ .

**3.** Параметр SC порядка  $\Delta(\mathbf{k})$  как функция импульса  $\mathbf{k}$  в 2D системе должен иметь линию нулей, разделяющую области импульсного пространства, в

которых  $\Delta(\mathbf{k})$  сохраняет знак. Нетривиальное решение уравнения самосогласования

$$\Delta(\mathbf{k}) = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{U(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \Delta(\mathbf{k}')}{\sqrt{\xi^2(\mathbf{k}') + \Delta^2(\mathbf{k}')}} \quad (3)$$

при отталкивании возникает в результате конкуренции рассеяния внутри областей постоянного знака  $\Delta(\mathbf{k})$  и между этими областями [8], что приводит к необходимому изменению знака суммы в (3). Здесь кинетическая энергия пары определяется как

$$2\xi(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}_+) + \varepsilon(\mathbf{k}_-) - 2\mu, \quad (4)$$

где  $\mathbf{k}_+$  и  $\mathbf{k}_-$  – импульсы частиц, составляющих пару,  $\mu$  – химический потенциал.

**4.** FC обнаруживает зеркальный нестинг для пар с кристаллически эквивалентными импульсами вдоль координатных осей  $k_x$  и  $k_y$ , когда  $\varepsilon(\mathbf{k}_+) = \varepsilon(\mathbf{k}_-)$  на конечной части FC (парном контуре Ферми, PFC). Здесь  $\mathbf{k}_{\pm} = \mathbf{K}/2 \pm \mathbf{k}$  – импульсы частиц пары с импульсом  $\mathbf{K}$  и импульсом относительного движения  $\mathbf{k}$  (K-пары). Нетривиальное решение уравнения (3) формируется в окрестности почти прямолинейных участков несвязного PFC, на которых кинетическая энергия K-пары обращается в нуль или близка к нулю.

При SC спаривании с отличным от нуля импульсом пары (K-спаривание) возникает кинематическое ограничение области импульсного пространства [1], которой могут принадлежать импульсы частиц  $\mathbf{k}_+$  и  $\mathbf{k}_-$ , то есть области интегрирования в (3).

Кинематическое ограничение в куперовском канале SC спаривания (при  $\mathbf{K} = 0$ ) отсутствует, и логарифмическая сингулярность имеет место при любом законе дисперсии в силу того, что  $\varepsilon(-\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k})$ . Зеркальный нестинг сохраняет логарифмическую сингулярность при  $\mathbf{K}$ -спаривании с весом, зависящим от отношения длин PFC и FC.

Анизотропия фермиевской скорости [9] и эффективной массы в протяженной окрестности седловой точки [10] усиливает логарифмическую сингулярность ван Хофа, что приводит к существенной асимметрии плотности состояний относительно FC и увеличению эффективной константы связи [11]:

$$w \rightarrow w \cdot \ln [\varepsilon_s / |\mu - \varepsilon_s|]; \quad (5)$$

здесь  $\varepsilon_s$  - энергия седловой точки.

5. В случае спаривающего отталкивания коэффициент при логарифме в правой части (3) определяется разностью интегралов по областям импульсного пространства, в которых  $\Delta(\mathbf{k})$  имеет разные знаки. Наибольший вклад в логарифмическую особенность в уравнении (3) дают окрестности точек пересечения линии нулей параметра порядка и FC, в которых эти две линии близки друг к другу [1]. Если положить  $U(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \text{const}$ , то при плотности состояний, симметричной относительно FC, вклады в соответствующие интегралы в (3) двух частей такой окрестности с  $\Delta(\mathbf{k})$  разного знака практически полностью гасятся. Поэтому в отсутствие электрон-дырочной асимметрии SC спаривание при отталкивании оказывается подавленным. В связи с этим отметим, что в случае  $\mathbf{K}$ -спаривания при притяжении зеркальный нестинг FC является достаточным условием возникновения SC состояния.

6. Отклонение от идеального зеркального нестинга можно учесть, заменив почти прямолинейные участки FC отрезками прямых линий при заданном среднем их отклонении (с энергетическим масштабом  $\delta$ ) от FC. Такая замена соответствует обрезанию логарифмической особенности в уравнении (3) снизу (так что  $\delta \leq \xi \leq \varepsilon_0$ , где  $\varepsilon_0$  - энергетический масштаб области кинематического ограничения) и приводит к оценке энергетической щели в виде [12]

$$|\Delta(\mathbf{k})| = |\Delta_0(\mathbf{k})| \sqrt{1 - \delta / |\Delta_0(\mathbf{k})|}, \quad (6)$$

где  $\Delta_0(\mathbf{k})$  - нетривиальное решение уравнения (3) при идеальном зеркальном нестинге FC.

Из оценки (6) следует, что при отклонении от идеального зеркального нестинга нетривиальное решение существует, если выбрать  $\delta < \Delta_0$ . При этом область определения функции  $\Delta(\mathbf{k})$  в импульсном

пространстве находится внутри области определения функции  $\Delta_0(\mathbf{k})$ . С уменьшением  $\delta$  энергетическая щель  $|\Delta(\mathbf{k})|$ , как следует из (6), формально возрастает, однако при этом уменьшается длина PFC и, следовательно,  $|\Delta_0(\mathbf{k})|$ . Таким образом,  $|\Delta(\mathbf{k})|$  как функция  $\delta$  достигает максимума, соответствующего определенному выбору PFC, то есть определенному выбору суммарного импульса пары  $\mathbf{K}$ .

Изменение химического потенциала с допированием приводит к изменению условий нестинга и зеркального нестинга FC, поскольку разным изолиниям, которые являются FC при разных уровнях допирования, соответствуют разные PFC. На рис.1b показано, как в случае закона дисперсии (1) изменяется длина PFC в зависимости от химического потенциала при заданном среднем отклонении от идеального зеркального нестинга.

7. Из-за кинематического ограничения спаривающее взаимодействие осциллирует в реальном пространстве. Сами по себе осцилляции еще недостаточны для возникновения связанного состояния. Например, положительный постоянный в области кинематического ограничения потенциал приводит лишь к тривиальному решению уравнения (3), так как не имеет отрицательного собственного значения. Зависимость от импульса экранированного кулоновского взаимодействия, которое при относительно малой области кинематического ограничения приближенно можно представить в виде двух первых членов разложения по степеням передачи импульса при рассеянии  $\kappa = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ ,

$$U(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = U_0(1 - \kappa^2 r_0^2 / 2), \quad (7)$$

где  $U_0$  и  $r_0$  - характерная кулоновская энергия и радиус экранирования, соответственно, при идеальном зеркальном нестинге обеспечивает нетривиальное решение с линией нулей, пересекающей PFC [1]:

$$\Delta(\mathbf{k}) = b \cdot (k_0^2 - k^2). \quad (8)$$

Здесь  $b$  и  $k_0$  - амплитуда SC параметра порядка и радиус линии (окружности) нулей, центр которой совпадает с центром симметрии области кинематического ограничения. Положительные величины  $b$  и  $k_0$  являются решением системы двух нелинейных интегральных уравнений [1], вытекающей из уравнения самосогласования (3) в случае изотропного спаривающего взаимодействия (7). Зависимость (8) параметра порядка от импульса вполне согласуется с предположением [5, 13] о том, что вблизи FC усредненная по направлениям в импульсном пространстве энергетическая щель купратных сверхпроводников как функ-

ция кинетической энергии пары имеет конечный наклон:  $\Delta(\xi) = \alpha - \beta\xi$ .

Амплитуда  $b$  параметра порядка экспоненциально зависит от константы связи  $U_0$  и от параметров области кинематического ограничения [1]. Она оказывается весьма чувствительной к выбору параметров закона дисперсии, а также к уровню допирования, определяющему химический потенциал.

8. Численное исследование (на сетке  $200 \times 200$  с точностью не хуже 10%) системы уравнений для  $b$  и  $k_0$  показывает, что в случае  $t$ -модели при половинном заполнении, то есть при идеальном зеркальном нестинге, но в отсутствие электрон-дырочной асимметрии, нетривиальное решение этой системы появляется лишь в области нефизических значений константы связи, превышающих  $\approx 1$  МэВ. Исследование  $t - t' - t''$ -модели при  $t = 0.5$ ,  $t' = -0.3t$ ,  $t'' = 0.2t$  эВ при заполнении, близком к половинному, приводит к понижению на несколько порядков порогового значения  $U_0$ , начиная с которого возникает нетривиальное решение. Так, при  $U_0 \sim 10$  эВ относительно малым окрестностям указанных значений интегралов перекока, для которых отклонение от идеального зеркального нестинга сравнительно невелико, могут соответствовать физически разумные значения амплитуды SC параметра порядка.

9. Решение (8) формируется в результате конкуренции рассеяния при отталкивательном взаимодействии (7) внутри областей постоянного знака  $\Delta(k)$  и между этими областями. В первом случае, когда величины обоих импульсов  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k}'$  меньше (или больше) радиуса линии нулей  $k_0$ , рассеяние не приводит к изменению знака правой части уравнения (3), то есть способствует подавлению решения (8). Во втором случае, когда  $k < k_0$ ,  $k' > k_0$  (и наоборот), знак правой части (3) меняется, так что преобладание такой компоненты рассеяния обеспечивает нетривиальное решение уравнения самосогласования.

Наиболее существенным является деструктивный вклад рассеяния с малыми передачами импульса, поскольку число переходов внутри областей постоянного знака  $\Delta(k)$  приближенно пропорционально площадям этих областей, то есть  $k_0^2$ , тогда как число переходов, изменяющих знак правой части (3), пропорционально площади полосы шириной  $\kappa$  и длиной, равной длине линии нулей, то есть  $\kappa k_0$ . Поэтому рассеяние с передачами импульса  $\kappa < k_0$  приводит к сильному подавлению амплитуды  $b$  решения (8).

Рассеяние частиц в SC канале  $\mathbf{K}$ -спаривания (в том числе и в куперовском канале при  $\mathbf{K} = 0$ ) конкурирует с рассеянием в других каналах, например, с рассеянием на примесях и фонах, где преобла-

дающими являются переходы с относительно малыми передачами импульса. Эффективность каждого канала определяется соотношениями между амплитудами рассеяния во всех каналах, поэтому рассеяние на примесях и фонах уменьшает вклад рассеяния при малых передачах импульса в SC спаривающем взаимодействии, которое, в основном, происходит внутри области импульсного пространства, в которой  $\Delta(\mathbf{k})$  имеет один и тот же знак. Такое ослабление рассеяния при малых передачах импульса при отталкивании способствует росту  $\Delta(\mathbf{k})$  и, следовательно,  $T_c$ , ослабляя известный эффект разрыва пар из-за нулей параметра порядка тепловым возбуждением и примесями (а также иными дефектами структуры). Сочетание кинематического ограничения в импульсном пространстве с динамическим ограничением электрон-фононного взаимодействия в энергетическом пространстве также приводит к подавлению деструктивного влияния малых передаваемых импульсов.

10. В том случае, когда семейство близких по энергии изолиний проявляет свойство нестинга, как это имеет место для закона дисперсии (1) при типичных для купратов значениях параметров  $t$ ,  $t'$ ,  $t''$ , возникает ограничение рассеяния при больших передачах импульса, связанное с диэлектризацией системы на почти прямолинейных участках FC при некотором импульсе нестинга  $\mathbf{Q}$ . Подобное ограничение, обусловленное перераспределением спектрального веса между пересекающимися ветвями спектра элементарных возбуждений, в случае легированного полуметалла рассмотрено в [14].

Когда дырочное допирование сдвигает химический потенциал ниже нижнего края диэлектрической щели  $2\Delta_i$ , дырочная часть SC ветви спектра возбуждений соответствует небольшой окрестности вершины нижней подзоны диэлектрического спектра (2). Таким образом, с ростом энергии возбуждения его спектральный вес быстро уменьшается, перетекая из SC ветви в диэлектрическую ветвь спектра. Это означает, что передачи импульса электронов и дырок при рассеянии, заметно превышающие  $\mathbf{Q}$ , оказываются существенно подавленными.

Такое диэлектрическое ограничение передачи импульса должно приводить к SC состоянию с весьма низким спектральным весом, что характерно для идеологии Лафлина (*gossamer superconductivity* [15]).

11. Чтобы учесть ограничения рассеяния как при малых, так и при больших передачах импульса, спаривающее экранированное кулоновское взаимодействие было обрезано по передаче импульса  $\kappa$  снизу и сверху:  $q_l \leq \kappa \leq q_r$ . Численное решение уравнения

самосогласования (3) с таким модельным потенциалом, существенно отличающимся от (7), приводит к параметру порядка с более богатыми топологическими свойствами по сравнению с решением (8).

На рис.2а представлен рельеф функции  $\Delta(\mathbf{k})$  в пределах области кинематического ограничения, гра-

области кинематического ограничения на более мелкие части, рассеянием между которыми определяется амплитуда параметра порядка.

Степень дробления области кинематического ограничения зависит от величины импульса пары  $K$ , которым определяется форма и размеры этой области, схематически показанной затемненной на рис.2д. С расширением области кинематического ограничения вдоль оси  $k_y$ , перпендикулярной вектору нестинга  $\mathbf{Q}$ , число областей, в которых  $\Delta(\mathbf{k})$  имеет постоянный знак, возрастает при уменьшении их размеров, и параметр порядка распределяется между этими областями, что сопровождается уменьшением его амплитуды. Такое угасание SC параметра порядка отличается от постепенного уменьшения амплитуды  $b$  при уменьшении радиуса экранирования  $r_0$  в модельном взаимодействии (7), для которого характерные размеры области кинематического ограничения должны быть меньше  $\sqrt{2}/r_0$  [1].

12. Численное исследование уравнения (3) показывает, что уменьшение ограничения малых передач импульса (уменьшение  $q_l$ ) слабо влияет на топологические свойства параметра порядка и не приводит к трансформации структуры линии нулей в окрестность, соответствующую решению (8) для вырожденного ядра модельного взаимодействия (7). При выбранных значениях параметров закона дисперсии  $t$ ,  $t'$ ,  $t''$  амплитуда параметра порядка резко уменьшается практически до нуля при некотором значении  $q_l$ . Можно предположить, что при этих значениях параметров степень электрон-дырочной асимметрии недостаточна для того, чтобы преодолеть отклонение FC от идеального зеркального нестинга при выбранном значении константы связи ( $U_0 = 7$  эВ), поскольку конкуренция электрон-дырочной асимметрии и зеркального нестинга наиболее существенна именно при малых передачах импульса.

13. Сингулярность восприимчивости  $\chi(\mathbf{q})$  при  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$  приводит к возникновению мягкой моды в спектре бозонных возбуждений [16] и эффективному взаимодействию между электронами, которое приближенно можно представить в виде [17]

$$V(\mathbf{q}) \approx \gamma^2 \chi(\mathbf{q}), \quad (9)$$

где  $\gamma$  имеет смысл константы связи, характеризующей взаимодействие электронов с соответствующими бозонными возбуждениями.

Если  $\chi(\mathbf{q})$  – магнитная восприимчивость (функция отклика на магнитное поле), то (9) описывает спин-флуктуационное взаимодействие между электронами [17, 18] при возникновении SDW с импуль-

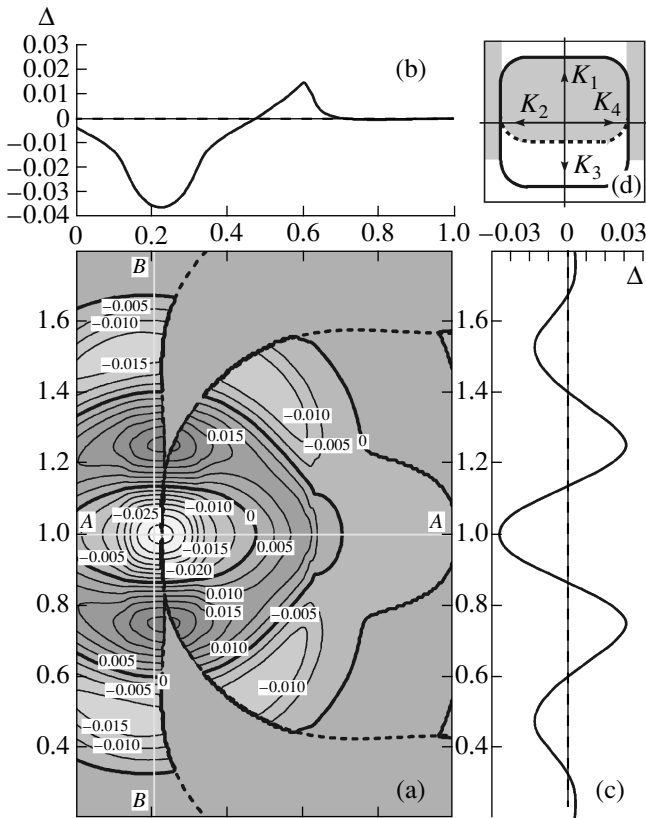


Рис.2. Цифры у изолиний рельефа  $\Delta(\mathbf{k})$  соответствуют значениям  $\Delta$  в эВ, значения компонент импульса  $k_x$ ,  $k_y$  представлены в единицах  $\pi$

ница которой показана штриховой линией (справа область дырочного заполнения, слева – электронного; PFC является участком их общей границы). Сечения функции  $\Delta(\mathbf{k})$  вдоль направлений (светлые отрезки прямых), параллельных осям  $k_{(AA)}$  и  $k_{(BB)}$ , показаны на рис.2б и с, соответственно. Параметр порядка обнаруживает существенно более сложную, по сравнению с решением (8), структуру линии нулей (показана жирными линиями), которая зависит от геометрии кинематического и диэлектрического ограничений и отражает конкуренцию рассеяния внутри областей постоянного знака  $\Delta(\mathbf{k})$  и между этими областями. Главной особенностью этой структуры является замкнутая линия нулей, центрированная на PFC. Площадь внутри этой линии растет с увеличением  $q_r$ . Другие ветви линии нулей соответствуют дроблению

сом  $\mathbf{Q}$ . Для диэлектрической восприимчивости  $\chi(\mathbf{q})$ , описывающей отклик на электрическое поле, роль бозонных возбуждений могут играть плазмоны и фононы; в таком случае сингулярность восприимчивости при  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$  может приводить к пайерлсовской неустойчивости [16] с возникновением CDW с несоизмеримым периодом  $2\pi/Q$ . Фактически же взаимодействие с кристаллической решеткой формирует соизмеримую структуру с периодом, близким к  $2\pi/Q$ .

Волны плотности тока CCDW и SCDW связаны с зарядовыми и спиновыми токовыми степенями свободы, соответственно. Нестинг FC при импульсе  $\mathbf{Q}$  приводит к сингулярности соответствующих восприимчивостей при  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$  и межэлектронному взаимодействию вида (9).

Логарифмическая особенность восприимчивости усиливает отталкивание в сравнительно малой окрестности точки  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$  [19–21]. Характерные размеры этой окрестности устанавливаются длиной участка FC, для которого выполняется условие нестинга, и шириной полосы, охватывающей этот участок, внутри которой сохраняется логарифмическое поведение  $\chi(\mathbf{q})$ . Таким образом, взаимодействие (9) можно заменить его средним (внутри установленной таким образом окрестности) значением.

14. Не учитывая остальное взаимодействие, соответствующее передачам импульса, отличным от  $\mathbf{k} - \mathbf{k}' \approx \mathbf{Q}$ , численным методом получены решения уравнения самосогласования (3) как для спаривания с нулевым импульсом пары, так и для  $\mathbf{K}$ -спаривания.

Имеется два класса решений, отличающихся симметрией относительно изменения знака проекции импульса относительно движения на вектор нестинга  $\mathbf{Q}$ : симметричные и антисимметричные (рис.3). Антисимметричное решение с одним узлом в центре области кинематического ограничения соответствует максимальной амплитуде параметра порядка. Симметричное решение с двумя узлами в области кинематического ограничения имеет заметно меньшую амплитуду. Следующее по амплитуде параметра порядка антисимметричное решение имеет три узла.

Постепенное уменьшение амплитуды параметра порядка соответствует чередованию антисимметричных и симметричных решений с последовательным увеличением числа узлов на единицу. Это напоминает распределение узлов волновой функции частицы в потенциальной яме в соответствии с осцилляционной теоремой [22]; следует отметить, что при отталкивании решение, не имеющее узлов, отсутствует.

15. В куперовском канале антисимметричное решение соответствует орбитальной  $p$ -симметрии пара-

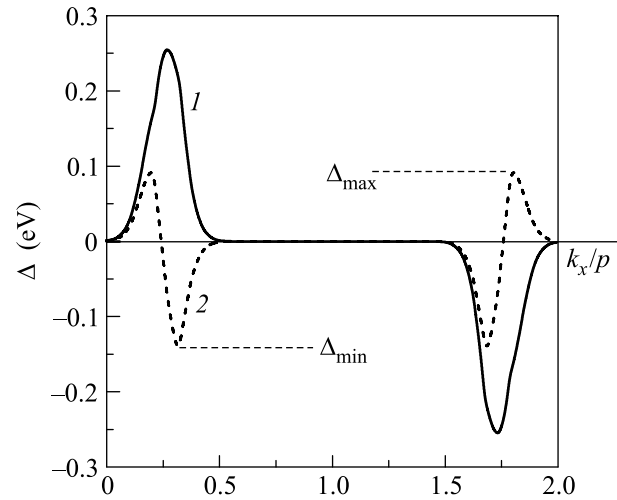


Рис.3. Антисимметричное 1 и симметричное 2 решения уравнения самосогласования (3)

метра порядка (рис.4.1), поэтому оно не может реализоваться при синглетном

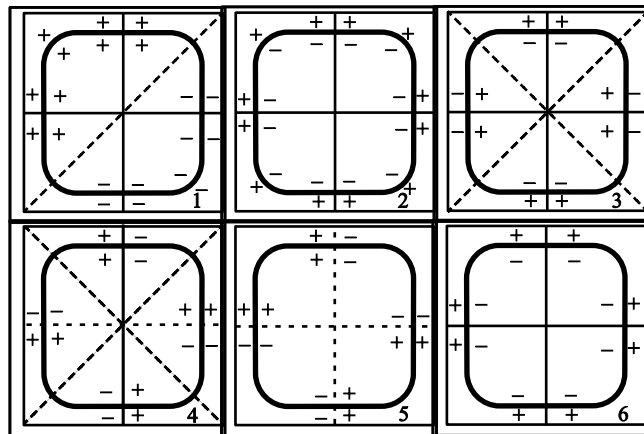


Рис.4. Распределение знаков параметра порядка в окрестности FC. Линии нулей, определяющие симметрию параметра порядка, показаны жирными штриховыми линиями

спаривании, наблюдаемом в купратах. Симметричное решение с двумя узлами и существенно меньшей амплитудой по сравнению с основным антисимметричным решением приводит к параметру порядка с расширенной  $s$ -волновой (рис.4.2) или  $d$ -волновой (рис.4.3) симметрией.

При  $\mathbf{K}$ -спаривании антисимметричное решение с наибольшей амплитудой параметра порядка может быть реализовано для каждого из кристаллически эквивалентных импульсов пары  $\mathbf{K}_j$  ( $j = 1, 2, 3, 4$ ). В силу того, что параметр порядка мал внутри пересечения областей кинематического ограничения, соот-

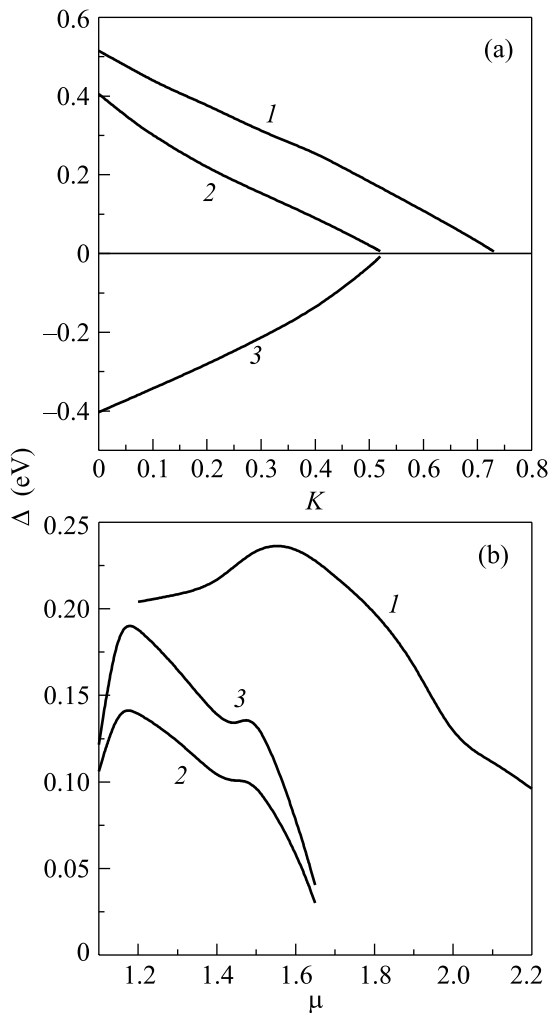


Рис.5. Зависимость амплитуд решений уравнения самосогласования от величины импульса пары (а) и химического потенциала (б) при  $K = 0.4\pi$

ветствующих разным  $\mathbf{K}_j$ , как это видно из рис.3, он может быть определен во всей зоне Бриллюэна как линейная комбинация решений  $\Delta_j(\mathbf{k})$  уравнения (3) в каждой из четырех областей кинематического ограничения [23]:

$$\Delta(\mathbf{R}, \mathbf{k}) = \sum_j \gamma_j e^{i\mathbf{K}_j \mathbf{R}} \Delta_j(\mathbf{k}), \quad (10)$$

где  $\mathbf{R}$  – радиус-вектор центра масс  $\mathbf{K}$ -пары, коэффициенты  $\gamma_j$  определяются неприводимым представлением, по которому преобразуется параметр порядка (10). Неприводимое представление  $A_{1g}$  приводит к  $g$ -волновой симметрии параметра порядка [24] с двумя семействами линий нулей: вдоль координатных осей и вдоль диагоналей зоны Бриллюэна (рис.4.4). Неприводимое представление  $B_{1g}$  приво-

дит к  $d$ -волновой симметрии параметра порядка с линиями нулей вдоль координатных осей (рис.4.5).

Симметричное решение с двумя узлами, возникающее при  $\mathbf{K}$ -спаривании, приводит к расширенной  $s$ -волновой симметрии в случае представления  $A_{1g}$  (рис.4.6) и к  $d$ -волновой симметрии – в случае  $B_{1g}$ .

Соотношение между амплитудами параметра порядка, соответствующего определенному антисимметричному или симметричному решению уравнения (3) в каналах SC спаривания с  $\mathbf{K} \neq 0$  и  $\mathbf{K} = 0$  устанавливается отношением длин PFC и FC. Синглетное  $\mathbf{K}$ -спаривание с антисимметричным параметром порядка оказывается доминирующим, если это отношение больше отношения амплитуд антисимметричного и симметричного решений. Зависимость этих амплитуд от величины импульса пары представлена на рис.5а, где кривая 1 соответствует антисимметричному решению, а кривые 2 и 3 относятся к максимуму и минимуму симметричного решения вблизи FC. Величины импульсов пары, при которых решения исчезают, зависят от параметров закона дисперсии. Из рис.5а видно, что при  $K \gtrsim 0.5\pi$  выживает только антисимметричное решение, то есть доминирующим каналом является  $\mathbf{K}$ -спаривание. На рис.5б представлены зависимости экстремальных значений антисимметричного и симметричного решений уравнения самосогласования от химического потенциала, определяемого уровнем допиривания.

**16.** Рассеяние между двумя участками PFC, связанными вектором нестинга  $\mathbf{Q}$ , эффективно смешивает состояния с импульсами, при которых значения параметра порядка  $\Delta(\mathbf{k})$  отличаются знаком. Учет рассеяния с передачей импульса, существенно отличающейся от  $\mathbf{Q}$ , увеличивает вклад состояний, в которых  $\Delta(\mathbf{k})$  имеет один и тот же знак. Это приводит к уменьшению амплитуды параметра порядка подобно тому, как кулоновское отталкивание подавляет притяжение, обусловленное электрон-фононным взаимодействием в фононном механизме спаривания, когда сверхпроводимость возникает, если абсолютная величина  $V$  эффективной константы спаривающего притяжения превышает логарифмически ослабленную константу кулоновского отталкивания [25].

При куперовском спаривании ( $K = 0$ ) за счет пайерлсовского усиления кулоновского отталкивания эта часть взаимодействия подобна электрон-фононному притяжению, но ограничена не в частном, а в импульсном пространстве. В оставшейся части импульсного пространства кулоновское взаимодействие играет деструктивную роль, так как соответствует преобладанию рассеяния между областями с одина-

ковым знаком  $\Delta(\mathbf{k})$ , хотя и логарифмически ослабленную. Поэтому существует критическое значение для амплитуды пайерлсовского усиления, выше которой возможно спаривание с  $K = 0$ .

В случае же  $K \neq 0$  непайерлсовская часть расщепления существует только в области кинематического ограничения и даже в отсутствие “пайерлсовской” компоненты сама приводит к нетривиальному решению  $\Delta(\mathbf{k})$  (см. [23] и разделы 9–12).

**K**-спаривание устанавливает SC порядок, который может сосуществовать с упорядочением, возникающим в результате куперовского спаривания с нулевым импульсом пары, приводя, таким образом, к дважды упорядоченному SC состоянию [26]. В таком случае наблюдаемая в купратах симметрия синглетного SC параметра порядка определяется симметричным решением уравнения (3) в куперовском канале и суперпозицией (10) антисимметричных решений при **K**-спаривании. Сосуществованию таких решений может соответствовать, например,  $s + g$ -симметрия [24].

Симметрия по отношению к поворотам при **K**-спаривании определяется выбором коэффициентов  $\gamma_j$  в (10), что приводит к линиям нулей, соответствующим определенным направлениям в импульсном пространстве. Такие нули разрешаются в фотоэмиссионных экспериментах. Нули параметра порядка, обусловленные **K**-спариванием для каждого из кристаллически эквивалентных импульсов  $\mathbf{K}_j$ , распределяются на замкнутых семействах линий, которые пересекаются направлениями, исходящими из центра зоны Бриллюэна, в отдельных точках. Поэтому возможность их регистрации в экспериментах по фотоэмиссии оказывается сильно ограниченной.

Мы благодарны В.Ф. Елесину за полезное обсуждение проблемы сверхпроводящего спаривания при отталкивании. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты # 05-02-17077а, # 06-02-17186а).

---

1. В. И. Белявский, Ю. В. Копаев, В. М. Софронов, С. В. Шевцов, *ЖЭТФ* **124**, 1149 (2003).

2. В. И. Белявский, Ю. В. Копаев, *Письма в ЖЭТФ* **83**, 606 (2006).

3. O. K. Andersen, S. Y. Savrasov, O. Jepsen, and A. I. Liechtenstein, *J. Low Temp. Phys.* **105**, 285 (1996).

4. A. Ino, C. Kim, M. Nakamura et al., *Phys. Rev. B* **65**, 094504 (2002).

5. J. E. Hirsch, *Phys. Rev. B* **59**, 11962 (1999).

6. P. A. Lee, N. Nagaosa, and X-G. Wen, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 17 (2006).

7. S. Chakravarty, R. B. Laughlin, D. K. Morr, and C. Nayak, *Phys. Rev. B* **63**, 094503 (2001).

8. K. Kuroki and R. Arita, *Phys. Rev. B* **64** 024501, (2001).

9. M. Chiao, R. W. Hill, C. Lupien et al., *Phys. Rev. B* **62**, 3554 (2000).

10. Z-X. Shen, W. E. Spicer, D. M. King et al., *Science* **267**, 343 (1995).

11. В. И. Белявский, Ю. В. Копаев, Ю. Н. Тогушова, С. В. Шевцов, *ЖЭТФ* **126**, 672 (2004).

12. В. И. Белявский, В. В. Капаев, Ю. В. Копаев, *Письма в ЖЭТФ* **76**, 51 (2002).

13. J. E. Hirsch, *Physica C* **341–348**, 213 (2000).

14. А. И. Русинов, До Чан Кат, Ю. В. Копаев, *ЖЭТФ* **65**, 1984 (1973).

15. R. B. Laughlin, cond-mat/0209269 (unpublished).

16. Л. Н. Булаевский, *УФН* **115**, 263 (1975).

17. Ю. А. Изюмов, *УФН* **169**, 225 (1999).

18. A. J. Millis, H. Monien, and D. Pines, *Phys. Rev. B* **42**, 167 (1990).

19. И. Е. Дзялошинский, *ЖЭТФ* **93**, 1487 (1987).

20. V. B. Geshkenbein, L. B. Ioffe, and A. I. Larkin, *Phys. Rev. B* **55**, 3173 (1997).

21. N. Furukawa, T. M. Rice, and M. Salmhofer, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3195 (1998).

22. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, М.: Физматлит, 2001.

23. В. И. Белявский, Ю. В. Копаев, *УФН* **176**, 457 (2006).

24. G. Zhao, *Phys. Rev. B* **64**, 024503 (2001).

25. Н. Н. Боголюбов, В. В. Толмачев, Д. В. Ширков, *Новый метод в теории сверхпроводимости*, М.: Изд. АН СССР, 1958.

26. В. И. Белявский, Ю. В. Копаев, Н. Т. Нгуен, *ЖЭТФ* **132**, N10 (2007).