Письма в ЖЭТФ, том 77, вып. 7, с. 450 – 454 © 2003 г. 10 апреля

Модификация сверхпроводящего параметра порядка $\Delta(\mathbf{k})$ дальними взаимодействиями

В. В. Вальков[+*□1)], *Д. М. Дзебисашвили*[+□]

[+]*Институт физики Сибирского отделения РАН, 660036 Красноярск, Россия;*

[*]*Красноярский государственный технический университет, 660074 Красноярск, Россия*

[□]*Красноярский государственный университет, 660075 Красноярск, Россия*

Поступила в редакцию 9 декабря 2002 г.

После переработки 21 февраля 2003 г.

Показано, что учет дальних межузельных взаимодействий качественно изменяет вид зависимости сверхпроводящей щели от квазиимпульса как для s-, так и для d-типов симметрии. В частности, параметр порядка сверхпроводящей фазы с $d_{x^2-y^2}$ типом симметрии становится зависящим от двух амплитуд и описывается выражением $\Delta(\mathbf{k}) = \Delta_1(\cos k_x - \cos k_y) + \Delta_2(\cos 2k_x - \cos 2k_y)$. При этом реализуется ситуация, когда теоретическая зависимость критической температуры от степени допирования соответствует экспериментальной.

PACS: 71.27.+a, 74.90.+n, 75.10.Lp

1. Известно, что $(t-J)$-модель [1] качественно правильно отражает магнитный механизм спаривания в высокотемпературных сверхпроводниках (см., например, обзор [2]). Если эта модель строится на основе модели Хаббарда в режиме сильных корреляций, то эффективный гамильтониан H_{eff} содержит так называемые трехцентровые слагаемые [3, 4]. В работе [5] было показано, что трехцентровые слагаемые $H_{(3)}$ дают слабый вклад в дисперсионные зависимости энергетического спектра. Такой результат вполне естественен, так как поправки $H_{(3)}$ к параметрам перескоков содержат дополнительную малость. Иная ситуация возникает при анализе сверхпроводящей фазы. В случае магнитного механизма спаривания константой связи является обменное взаимодействие. Тот же порядок величины имеют и энергетические параметры в трехцентровых слагаемых. Поэтому вклад $H_{(3)}$ в уравнение самосогласования для сверхпроводящей щели оказывается существенным. Ранее влияние трехцентровых слагаемых на формирование сверхпроводимости изучалось в работах [6, 7]. При этом в [7] было показано, что учет трехцентровых слагаемых приводит к перенормировке константы связи. Это вызывает существенное уменьшение области реализации сверхпроводящей фазы с $d_{x^2-y^2}$ типом симметрии параметра порядка [8].

При выходе за рамки приближения ближайших соседей эффективный гамильтониан будет включать обменные взаимодействия между спиновыми моментами квазичастиц, находящихся на расстояниях, больших, чем параметр решетки. Важность учета перескоков квазичастиц между узлами из дальних координационных сфер, а также обменных взаимодействий между не ближайшими спинами была продемонстрирована во многих работах при описании особенностей энергетического спектра квазичастиц (см., например, [9 – 13]). В этом случае теоретические представления удовлетворительно согласовывались с ARPES данными. В частности, отмечалось, что учет фрустрированных связей ($J_2 > 0$) имеет важное значение для описания эволюции спектральной зависимости при допировании [12]. Поскольку, как отмечалось, параметры обменных взаимодействий выступают как константы связи при магнитном механизме сверхпроводящего спаривания, то можно ожидать существенного влияния J_2 и J_3 как на функциональный вид параметра порядка, так и на условия реализации сверхпроводящего состояния.

Ниже в рамках эффективного гамильтониана, следующего из модели Хаббарда в режиме сильных корреляций (расширенная $(t-J)$-модель с трехцентровыми взаимодействиями), показывается, что наличие обменных взаимодействий между спиновыми моментами, не являющимися ближайшими соседями, оказывает существенное влияние как на зависимость от квазиимпульса сверхпроводящего параметра порядка, так и на вид уравнения для определения сверхпроводящей щели и критической температуры T_c.

[1)]e-mail: vvv@iph.krasn.ru

2. В качестве исходной модели выбирается модель Хаббарда

$$H = \sum_f (\varepsilon - \mu) a_{f\sigma}^{+} a_{f\sigma} + + \sum_{fm} t_{fm} a_{f\sigma}^{+} a_{m\sigma} + U \sum_f \hat{n}_{f\uparrow} \hat{n}_{f\downarrow}, \qquad (1)$$

и предполагается, что отличны от нуля три параметра перескоков: $t_{f,f+\delta_1} = -t_1$, $t_{f,f+\delta_2} = -t_2$, $t_{f,f+\delta_3} = -t_3$, δ_i – радиус-вектор узлов из i-й координационной сферы.

Хорошо известно, что в режиме сильных электронных корреляций ($U \gg |t_{fm}|$) и концентрации $n < 1$ можно перейти к эффективному гамильтониану, который с квадратичной по $|t_{fm}|/U$ точностью в представлении операторов Хаббарда имеет вид [7, 2, 8]

$$H = \sum_{f\sigma} (\varepsilon - \mu) X_f^{\sigma\sigma} + \sum_{fm\sigma} t_{fm} X_f^{\sigma 0} X_m^{0\sigma} + + \sum_{fm\sigma} \left(\frac{t_{fm} t_{mf}}{U} \right) \left(X_f^{\sigma\bar{\sigma}} X_m^{\bar{\sigma}\sigma} - X_f^{\sigma\sigma} X_m^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} \right) + + \sum_{\substack{fmg\sigma \\ (f\neq g)}} \left(\frac{t_{fm} t_{mg}}{U} \right) \left(X_f^{\sigma 0} X_m^{\bar{\sigma}\sigma} X_g^{0\bar{\sigma}} - X_f^{\sigma 0} X_m^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} X_g^{0\sigma} \right). \quad (2)$$

Обозначения стандартные, расшифровка которых содержится в отмеченных статьях и обзоре [2]. Отметим лишь, что последнее слагаемое гамильтониана зависит от трех узлов и описывает коррелированный перескок.

Воспользовавшись диаграммной техникой для операторов Хаббарда [14, 15] либо методом неприводимых функций Грина в атомном представлении с введением аномальных средних [16], находим уравнение самосогласования для сверхпроводящего параметра порядка (СПП) $\Delta_{\mathbf{q}}$ при учете трехцентровых слагаемых [8]:

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \left\{ 2t_{\mathbf{q}} + \frac{n}{2} (J_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + J_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}) + 4 \left(1 - \frac{n}{2}\right) \times \times \frac{t_{\mathbf{k}} t_{\mathbf{q}}}{U} - n \left(\frac{t_{\mathbf{q}}^2}{U} - \frac{J_0}{2} \right) \right\} \left(\frac{\Delta_{\mathbf{q}}}{2E_{\mathbf{q}}} \right) \mathrm{th} \left(\frac{E_{\mathbf{q}}}{2T} \right). \quad (3)$$

В этом уравнении t_k и J_k обозначают фурье-образы параметров t_{fm} и $2t_{fm}^2/U$. Энергия боголюбовских квазичастиц обозначена посредством $E_k = \sqrt{(\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2}$, а перенормированный электронный спектр

$$\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}} = (1 - n/2) \left(1 - \frac{n}{2} \frac{t_{\mathbf{k}}}{U} \right) t_{\mathbf{k}} - \frac{1}{N} \times \times \sum_{\mathbf{q}} \left\{ t_{\mathbf{q}} + \frac{n}{2} J_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + [(2-n)\, t_{\mathbf{k}} + (1-n)\, t_{\mathbf{q}}] \frac{t_{\mathbf{q}}}{U} \right\} n_{\mathbf{q}\sigma},$$

$$n_{\mathbf{q}\sigma} = (1 - \vartheta_{\mathbf{q}})/2 + \vartheta_{\mathbf{q}} \left(\exp\left(E_{\mathbf{q}}/T \right) + 1 \right)^{-1}, \qquad (4)$$
$$\vartheta_{\mathbf{q}} = \xi_{\mathbf{q}}/E_{\mathbf{q}}, \quad \xi_{\mathbf{q}} = \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{q}} - \mu.$$

Отметим, что при выводе уравнения (3) на основе H_{eff} появляются только аномальные средние $\langle X_f^{0\downarrow} X_m^{0\uparrow} \rangle$. Если же исходить из гамильтониана (1), записанного в атомном представлении, то, как было показано Зайцевым с сотрудниками [17], в теорию входят аномальные средние $\langle X_f^{0\sigma} X_m^{\sigma 2} \rangle$, $\langle X_f^{\sigma 2} X_m^{\bar{\sigma} 2} \rangle$, обусловленные переходами из нижней в верхнюю хаббардовскую подзону, а также переходами внутри верхней подзоны, которые дают вклад при конечных U. Формальное отсутствие в нашем подходе отмеченных аномальных средних не означает, что мы пренебрегаем упомянутыми процессами. Все дело в том, что при переходе к H_{eff} все вычисления проводятся в новом представлении, в котором отмеченные процессы выражаются посредством иных операторных структур. Поясним подробнее смысл высказанного утверждения.

Рассмотрим прежде всего вопрос о средних $\langle X_f^{02} \rangle$ и $\langle X_f^{0\sigma} X_m^{02} \rangle$, связанных с процессами перехода из нижней подзоны Хаббарда в верхнюю (в такой постановке вопроса молчаливо предполагается, что используется представление, индуцированное исходным гамильтонианом). Переход к H_{eff} означает проведение унитарного преобразования ($S^{+} = -S$):

$$H \to H_{\text{eff}} = \exp(S) H \exp(-S); \quad H|\Psi_n\rangle = E_n |\Psi_n\rangle,$$

$$H_{\text{eff}} |\Phi_n\rangle = E_n |\Phi_n\rangle, \quad |\Phi_n\rangle = \exp(S) |\Psi_n\rangle,$$

при котором меняют свой вид гамильтониан, базисные функции, а также все операторы, усреднение которых дают интересующие нас физические величины. Так например, операторы X_f^{02} и $X_f^{0\sigma} X_m^{\sigma 2}$ преобразуются по законам:

$$X_f^{02} \to \tilde{X}_f^{02} = = -\sum_g (t_{fg}/U) \left(X_f^{0\downarrow} X_g^{0\uparrow} - X_f^{0\uparrow} X_g^{0\downarrow} \right) + O\left\{ (t_{fg}/U)^3 \right\},$$

$$X_f^{0\sigma} X_m^{\sigma 2} \to \tilde{X}_f^{0\sigma} \tilde{X}_m^{\sigma 2} = -\sum_g (t_{mg}/U) \eta(\sigma) \times \times \left(X_f^{0\sigma} X_m^{\sigma\bar{\sigma}} X_g^{0\sigma} - X_f^{0\sigma} X_m^{\sigma\sigma} X_g^{0\bar{\sigma}} \right) + O\left\{ (t_{fm}/U)^3 \right\}.$$

Полученные законы преобразований наглядно демонстрирует, что в новом представлении с линейной по (t_{fm}/U) точностью отмеченные аномальные средние действительно не игнорируются, а их вклад определяется посредством средних от операторов, принимающих во внимание только переходы между состояниями без двоек. По существу, этот результат является частным случаем, вытекающим из общего утверждения, содержащегося в работе [18]. Что касается аномальных средних, связанных с переходами по верхней хаббардовской зоне, то как нетрудно убедиться, их вклад появляется лишь в квадратичном (а не в линейном) по $(t_{fm/U})$ приближении. Поэтому эти средние не дают вклада в рассматриваемую теорию.

Уравнение (3), как известно, имеет решения, различающиеся по типу симметрии $\Delta_{\mathbf{k}}$. Рассмотрение влияния дальних перескоков как на тип симметрии СПП, так и на модификацию зависимости от $\mathbf{k}$ в рамках заданной симметрии проведем по отдельности:

а) s-симметрия: для этого типа симметрии наличие трех $t_1, t_2, t_3 \neq 0$ приводит к тому, что решением (3) может служить только $\Delta_{\mathbf{k}}$, определяемое выражением

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta_0 + \Delta_1 S_1(\mathbf{k}) + \Delta_2 S_2(\mathbf{k}) + \Delta_3 S_3(\mathbf{k}). \qquad (5)$$

Здесь и ниже, для сокращения записи, используются следующие инварианты

$$S_1(\mathbf{k}) = (\cos k_x a + \cos k_y a)/2,$$
$$S_2(\mathbf{k}) = \cos(k_x a)\cos(k_y a),$$
$$S_3(\mathbf{k}) = (\cos 2k_x a + \cos 2k_y a)/2.$$

Параметр порядка в виде (5) будет являться решением интегрального уравнения (3), если неизвестные коэффициенты Δ_i удовлетворяют системе четырех уравнений:

$$\Delta_0 = \\ = \sum_{l=0}^{3}\left\{\sum_{j=1}^{3} 2G_{lj}T_j + \left(\frac{n}{2}\right) J_0 G_l - \frac{n}{U}\sum_{i,j=1}^{3} G_{lij}T_iT_j\right\}\Delta_l$$
$$(T_j = -4t_j, \quad j = 1,2,3)$$
$$\Delta_m = 4\sum_{l=0}^{3}\left\{nJ_mG_{ml} + (1-n/2)\,T_m\sum_{i=1}^{3} G_{li}T_i/U\right\}\Delta_l,$$

$$J_m = 2t_m^2/U, \quad m = 1,2,3, \qquad (6)$$

где

$$G_i = G_{i00}, \quad G_{ij} = G_{ij0},$$
$$G_{ijl} = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}} S_i(\mathbf{q})S_j(\mathbf{q})S_l(\mathbf{q})\Psi_{\mathbf{q}},$$
$$\Psi_{\mathbf{q}} = \frac{\mathrm{th}\,(E_{\mathbf{q}}/2T)}{2E_{\mathbf{q}}}, \quad S_0(\mathbf{k}) = 1.$$

Из системы (6) следует, что в пределе бесконечно сильного отталкивания, когда сверхпроводящее спаривание определяется только кинематическим механизмом Зайцева, величина параметра порядка содержит лишь линейные по t вклады,

б) d_{xy}-симметрия: $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta_1\sin(k_x a)\sin(k_y a)$. Такой тип симметрии СПП отсутствует в приближении ближайших соседей и появляется только при $t_2 \neq 0$. При этом амплитуда СПП Δ_1 находится из решения трансцендентного уравнения

$$1 = (2nJ_2/N)\sum_{\mathbf{q}} \sin^2 q_x \sin^2 q_y \Psi_{\mathbf{q}} \qquad (7)$$

в) $d_{x^2-y^2}$-тип симметрии. Включение дальних перескоков $(t_2, t_3 \neq 0)$ приводит к тому, что часто рассматриваемый в литературе СПП $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta_0(\cos(k_x a) - -\cos(k_y a))$ не может являться таковым, поскольку не удовлетворяет интегральному уравнению (3). Решение этого уравнения можно представить в двухпараметрическом виде:

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta_1\varphi_1(\mathbf{k}) + \Delta_2\varphi_2(\mathbf{k}),$$
$$\varphi_l(\mathbf{k}) = (\cos(lk_x a) - \cos(lk_y a)), \quad l = 1,2, \qquad (8)$$

если потребовать, чтобы амплитуды Δ_1 и Δ_2 являлись решением двух уравнений:

$$\Delta_i = \lambda_i\sum_{j=1}^{j=2}\Phi_{ij}\Delta_j; \;\; \lambda_1 = n\left(\frac{t_1^2}{U}\right), \;\; \lambda_2 = n\left(\frac{t_3^2}{U}\right),$$
$$\Phi_{nm} = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}}\varphi_n(\mathbf{q})\varphi_m(\mathbf{q})\,\mathrm{th}\left(\frac{E_{\mathbf{q}}}{2T}\right). \qquad (9)$$

Отсюда следует, что при $t_3 \neq 0$ Δ_1 всегда отлично от нуля. Условие совместности этой системы приводит к уравнению

$$(1 - \lambda_1\Phi_{11})(1 - \lambda_2\Phi_{22}) = \lambda_1\lambda_2\Phi_{12}^2, \qquad (10)$$

определяющему, в частности, критическую температуру. Видно, что только при $t_3 = 0$ получается известное уравнение для критической температуры $(t - J^*)$-модели.

3. Из-за ограниченности места результаты численного анализа по влиянию дальних перескоков на характеристики сверхпроводящего состояния представим только для $d_{x^2-y^2}$-типа симметрии $\Delta_{\mathbf{k}}$. На рис.1 показано изменение концентрационной зависимости температуры перехода в $d_{x^2-y^2}$-сверхпроводящую фазу при включении параметра t_3. Видно, что перескок электронов на узлы из третьей координационной сферы существенно влияет на положение максимума кривой $T_c(n)$. Примечательно, что сравнительно легко достигается та экспериментально наблюдаемая ситуация, когда максимум T_c приходится на $n \sim 0.8$. Кривые *1* и *2* рис.2 демонстрируют влияние модификации уравнения (10) за счет даль-

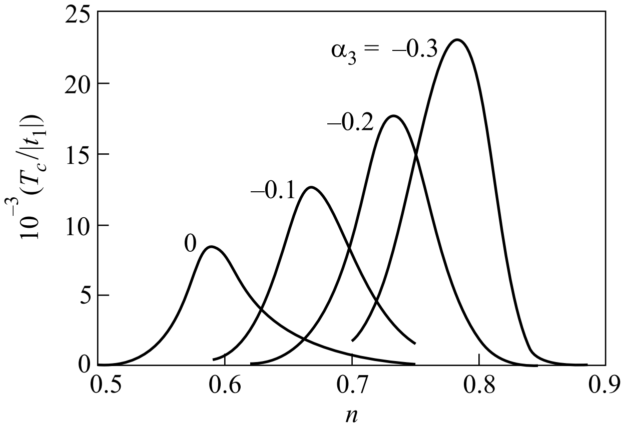

Рис.1. Влияние перескоков в третью координационную сферу на концентрационную зависимость T_c при различных $\alpha_3 = t_3/t_1$. Параметры модели: $t_2/t_1 = -0.2$, $|t_1|/U = 0.2$

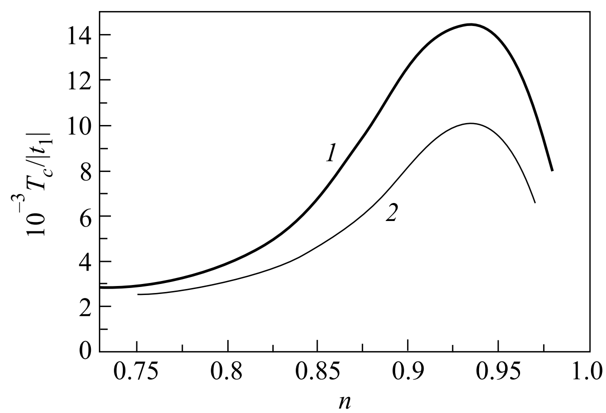

Рис.2. Концентрационная зависимость $T_c(n)$: $t_2/t_1 = 0.4$, $t_3/t_1 = 0.3$, $|t_1|/U = 0.2$. Значения кривых *1* и *2* см. в тексте

них обменных взаимодействий на значение критической температуры. Кривая *1* построена на основе решения полного уравнения (10), тогда как кривая *2* получена в предположении, что $\lambda_2 = 0$.

В сверхпроводящей фазе ($T < T_c$) амплитуды Δ_1 и Δ_2 отличны от нуля и изменяются синхронно при изменении температуры. Пример такого поведения продемонстрирован на рис.3. Видно, что во всей температурной области, где реализуется сверхпроводящее решение, $|\Delta_2|$ ($\Delta_2 < 0$) повторяет температурное поведение амплитуды Δ_1.

В заключение отметим, что в настоящей работе влияние дальних перескоков как на условия реализации сверхпроводящего состояния, так и на импульсную зависимость параметра порядка продемонстрировано на примере эффективного гамильтониана, полученного из модели Хаббарда в режиме силь-

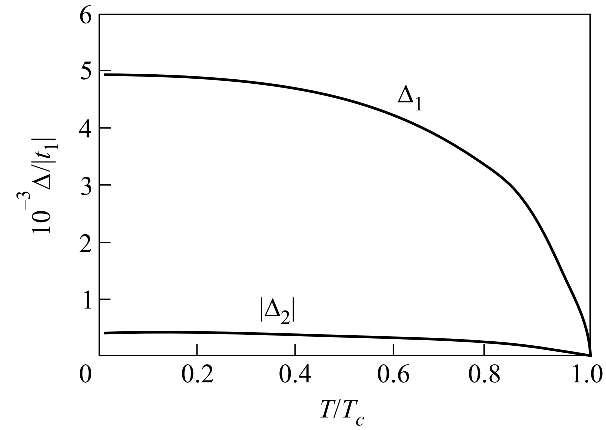

Рис.3. Температурная зависимость амплитуд Δ_1 и $|\Delta_2|$ при $n = 0.84$. Параметры модели те же, что и на рис.2

ных электронных корреляций. В этом случае имеет место соответствие между значением t_3 и обменным параметром J_3. Между тем часто рассматривают ситуацию, когда параметры перескоков и обменные константы считаются независимыми. В этом случае принципиально может реализоваться ситуация, когда величина дальних обменных взаимодействий не будет связана с амплитудами перескоков.

Целесообразно также заметить, что результаты более общего характера можно было бы получить на основе исходного гамильтониана (1), если записать систему четырех уравнений самосогласования так, как это было сделано в работе Зайцева и др. [17]. Если же интересоваться ответами в главном по (t_{fm}/U) приближении, то представленный вариант теории оказывается проще. Именно поэтому сравнительно легко удается проанализировать влияние дальних перескоков как на возможный тип симметрии параметра порядка, так и на модификацию квазиимпульсной зависимости для каждого типа симметрии.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований + ККФН “Енисей” (грант # 02-02-97705), а также Программе Президиума РАН “Квантовая макрофизика”. Один из авторов (Д.М.Д.) признателен Благотворительному Фонду содействия отечественной науке и СО РАН (Лаврентьевский конкурс молодежных проектов) за финансовую поддержку исследований.

1. P. W. Anderson, Science **235**, 1196 (1987).
2. Ю. А. Изюмов, УФН **167**, 465 (1997).
3. Л. П. Булаевский, Э. Л. Нагаев, Д. Л. Хомский, ЖЭТФ **54**, 1562 (1968).

4. K. A. Chao, J. Spalek, and A. M. Oles, J. Phys. **C10**, L271 (1977).
5. V. Yu. Yushankhay, V. S. Oudovehko, and R. Hayn, Phys. Rev. **B55**, 15562 (1997).
6. J. E. Hirsch, Phys. Lett. **A136**, 163 (1989).
7. V. Yu. Yushankhay, G. M. Vujicic, and R. B. Zakula, Phys. Lett. **A151**, 254 (1990).
8. В. В. Вальков, Т. А. Валькова, Д. М. Дзебисашвили, С. Г. Овчинников, Письма в ЖЭТФ **75**, 450 (2002).
9. A. Nazarenkoet et al., Phys. Rev. **B51**, 8676 (1995).
10. O. P. Sushkov et al., Phys. Rev. **B56**, 11769 (1997).
11. А. Ф. Барабанов и др., Письма в ЖЭТФ, **68**, 386 (1998).
12. R. Hayn et al., Phys. Rev.**B53**, 11714 (1996).
13. T. Tohyama and S. Maekawa, Supercond. Sci. Technol. **13**, R17-R32 (2000).
14. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **70**, 1100 (1976).
15. Р. О. Зайцев, В. А. Иванов, Письма в ЖЭТФ **46**, 140 (1987).
16. N. M. Plakida, V. Yu. Yushankhay, and I. V. Stasyuk, Physica **C162-164**, 787 (1989).
17. Р. О. Зайцев, В. А. Иванов, Ю. В. Михайлова, ФММ **68**, 1108 (1989).
18. Н. Н. Боголюбов, *Избранные труды*, т.2., Киев, 1970, стр.423.