

Сильное влияние трехцентровых взаимодействий на формирование сверхпроводимости $d_{x^2-y^2}$ -симметрии в $t - J^*$ -модели

В. В. Вальков^{+*1)}, Т. А. Валькова*, Д. М. Дзедзисашвили^{+□}, С. Г. Овчинников^{+*□}

⁺ Институт физики Сибирского отделения РАН, 660036 Красноярск, Россия

* Красноярский государственный технический университет, 660074 Красноярск, Россия

□ Красноярский государственный университет, 660075 Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 25 декабря 2001 г.

После переработки 4 марта 2002 г.

Методами диаграммной техники для операторов Хаббарда и неприводимых функций Грина рассмотрено влияние трехцентровых взаимодействий на формирование сверхпроводящей фазы с симметрией $d_{x^2-y^2}$. Показано, что для типичных значений параметров модели эти взаимодействия приводят к уменьшению T_c в десятки раз.

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

1. Известно, что модель Хаббарда [1], несмотря на ее относительную простоту, отражает наиболее существенные особенности поведения ансамбля сильно-коррелированных электронов и часто используется в качестве базовой модели, на основе которой строится эффективный гамильтониан $H_{\text{эфф}}$, действующий в усеченном гильбертовом пространстве. Практическая целесообразность построения $H_{\text{эфф}}$ определяется возможностью получения в явном виде взаимодействий, открывающих, например, дополнительные пути для куперовской неустойчивости. Так при выводе $t-J$ -модели [2, 3] выделяется взаимодействие, приводящее к магнитному механизму куперовского спаривания.

В настоящей работе показано, что возникающие при построении $H_{\text{эфф}}$ трехцентровые взаимодействия, имеющие ту же параметрическую малость, что и обменные взаимодействия, радикально влияют на свойства сверхпроводящей фазы, уменьшая (более чем на порядок) T_c при неизменных параметрах модели.

2. Используя атомное представление, запишем гамильтониан модели Хаббарда

$$H = H_0 + V, \quad (1)$$

$$H_0 = \sum_f \left\{ \sum_{\sigma} (\epsilon - \mu) X_f^{\sigma\sigma} + (2\epsilon + U - 2\mu) X_f^{22} \right\},$$

$$V = \sum_{fm\sigma} t_{fm} \left\{ X_f^{\sigma 0} X_m^{0\sigma} + X_f^{2\bar{\sigma}} X_m^{\bar{\sigma} 2} + \sigma (X_f^{\sigma 0} X_m^{\bar{\sigma} 2} + X_m^{2\bar{\sigma}} X_f^{0\sigma}) \right\},$$

где H_0 учитывает вклады одно- и двухэлектронных состояний на одном узле с энергиями ϵ и $2\epsilon + U$, соответственно; U – параметр кулоновского отталкивания двух электронов, находящихся на одном узле, μ – химический потенциал системы. Оператор V описывает перескоки электронов в пределах нижней и верхней хаббардовских подзон, а также перескоки из одной подзоны в другую; X_f^{nm} – операторы Хаббарда:

$$X_f^{nm} \equiv |n, f\rangle \langle f, m|, \quad X_f^{nm} |p, f\rangle = \delta_{mp} |n, f\rangle. \quad (2)$$

Посредством σ в (1) обозначена величина, принимающая значения ± 1 и соответствующая двум возможным проекциям спинового момента у электрона, $\bar{\sigma} = -\sigma$.

Кроме энергетических параметров модели, существенным фактором является концентрация электронов в расчете на один узел $n = N_e/N$ (N_e – полное число электронов в системе, N – число узлов в решетке). При $n < 1$ и большой величине кулоновского отталкивания, $U \gg |t_{fm}|$, электроны будут стремиться заполнять нижнюю хаббардовскую подзону. Влияние состояний с двумя электронами на одном узле может быть учтено по теории возмущений, основанной на использовании малого параметра $|t_{fm}|/U \ll 1$. Элегантную реализацию такой программы обеспечивает, например, операторная форма теории возмущений [4] посредством указания конкретного алгоритма построения эффективного гамильтониана.

Для интересующего нас случая $H_{\text{эфф}}$ действует в гильбертовом подпространстве, не содержащем двоек. Вклады от двочных состояний отражаются в $H_{\text{эфф}}$ в виде дополнительных слагаемых, представля-

¹⁾ e-mail: vvv@iph.krasn.ru

ющих операторный ряд по возрастающей степени параметра малости. С квадратичной по t_{fm}/U точностью эффективный гамильтониан определяется выражением [4]

$$H_{\text{eff}} = PH_0P + PVP + PV(H_0 - E_0)^{-1}(PV - V)P, \quad (3)$$

где P – оператор проектирования на гильбертово подпространство без двоек. Используя правила умножения операторов Хаббарда $X_f^{nm} \cdot X_f^{lq} = \delta_{ml}X_f^{nq}$, получаем

$$P = \prod_f (X_f^{00} + X_f^{\uparrow\uparrow} + X_f^{\downarrow\downarrow}), \quad (4)$$

$$PVP - VP = - \sum_{fm\sigma} t_{mf}\sigma X_m^{2\sigma} X_f^{0\sigma} P.$$

С учетом этих соотношений находим вид третьего слагаемого H_{eff} :

$$PV(H_0 - E_0)^{-1}(PV - V)P =$$

$$= P \sum_{fmg\sigma} \left(\frac{t_{fm}t_{mg}}{U} \right) (X_f^{\sigma 0} X_m^{\bar{\sigma}\sigma} X_g^{0\bar{\sigma}} - X_f^{\sigma 0} X_m^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} X_g^{0\sigma}) P. \quad (5)$$

Добавление двух первых слагаемых из (3) приводит к следующей структуре H_{eff}

$$H_{\text{eff}} = \sum_{f\sigma} (\epsilon - \mu) X_f^{\sigma\sigma} + \sum_{fm\sigma} t_{fm} X_f^{\sigma 0} X_m^{0\sigma} +$$

$$+ \sum_{fmg\sigma} \left(\frac{t_{fm}t_{mg}}{U} \right) (X_f^{\sigma 0} X_m^{\bar{\sigma}\sigma} X_g^{0\bar{\sigma}} - X_f^{\sigma 0} X_m^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} X_g^{0\sigma}).$$

В этом выражении оператор проектирования опущен, поскольку гильбертово подпространство состояний без двоек инвариантно относительно действия H_{eff} . В последнем слагаемом H_{eff} среди прочих содержатся члены с $f = g$, которые в сумме с двумя первыми слагаемыми H_{eff} дают гамильтониан t - J -модели

$$H_{t-J} = \sum_{f\sigma} (\epsilon - \mu) X_f^{\sigma\sigma} + \sum_{fm\sigma} t_{fm} X_f^{\sigma 0} X_m^{0\sigma} +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{fm\sigma} J_{fm} (X_f^{\sigma\bar{\sigma}} X_m^{\bar{\sigma}\sigma} - X_f^{\sigma\sigma} X_m^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}). \quad (6)$$

Таким образом, H_{eff} (в дальнейшем H_{t-J^*}) записывается в виде

$$H_{t-J^*} = H_{t-J} + H_{(3)},$$

$$H_{(3)} = \sum_{\substack{fmg\sigma \\ f \neq g}} \left(\frac{t_{fm}t_{mg}}{U} \right) (X_f^{\sigma 0} X_m^{\bar{\sigma}\sigma} X_g^{0\bar{\sigma}} - X_f^{\sigma 0} X_m^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} X_g^{0\sigma}). \quad (7)$$

Обсудим отличия H_{t-J^*} для металлической фазы и для случая половинного заполнения. При $n = 1$ на каждом узле находится один электрон. Поэтому гильбертово подпространство для H_{t-J^*} представляет собой совокупность гомеополарных состояний, когда отсутствуют не только двойки, но и дырки. При этом проекционный оператор записывается в виде $P = \prod_f (X_f^{\uparrow\uparrow} + X_f^{\downarrow\downarrow})$ и H_{t-J^*} с рассматриваемой точностью сводится к модели Гейзенберга [5]. Если же $n < 1$, то в системе присутствуют дырки. Поэтому в H_{t-J^*} включаются процессы перескоков электронов (второе слагаемое в (6)), а также трехцентровые взаимодействия $H_{(3)}$.

Из (7) видно, что трехцентровые взаимодействия $H_{(3)}$ имеют ту же параметрическую малость, что и обменная часть t - J -модели, но существенно меньшую, чем ее кинетическая часть. Этим объясняется малость влияния $H_{(3)}$ на спектральные свойства системы в нормальной фазе [2, 3].

Иная ситуация складывается при формировании сверхпроводящего состояния с d -типом симметрии параметра порядка (ПП). В этом случае в сверхпроводящей фазе константа связи $J \sim t^2/U$ имеет такой же порядок величины, что и трехцентровые взаимодействия. Вот почему следует ожидать сильного влияния $H_{(3)}$ на сверхпроводимость с d -типом симметрии ПП. Ниже справедливость этого тезиса подтверждена количественным расчетом.

3. При решении задачи применялись два метода. В первом случае использовалась диаграммная техника для операторов Хаббарда [6, 7], обобщенная на случай учета трехцентровых взаимодействий. Во втором подходе применялся аппарат двухвременных неприводимых функций Грина точно так же, как это было сделано при рассмотрении t - J -модели в работах [8, 9]. Уравнения самосогласования, полученные в рамках отмеченных методов, полностью совпадают.

Линеаризованная система уравнений для нормальных и аномальных функций Грина приводится к стандартному виду уравнений Горькова:

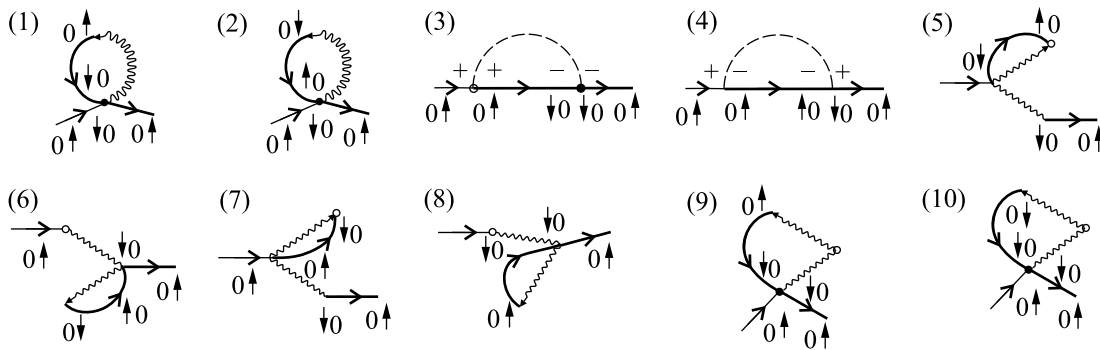
$$(E - \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} + \mu) \langle\langle X_{\mathbf{k}\sigma}^+ | X_{\mathbf{k}\sigma}^+ \rangle\rangle -$$

$$- \Delta_{\mathbf{k}} \langle\langle X_{-\mathbf{k}\bar{\sigma}}^+ | X_{\mathbf{k}\sigma}^+ \rangle\rangle = 1 - n/2, \quad (8)$$

$$- (\Delta_{\mathbf{k}})^* \langle\langle X_{\mathbf{k}\sigma}^+ | X_{\mathbf{k}\sigma}^+ \rangle\rangle +$$

$$+ (E + \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} - \mu) \langle\langle X_{-\mathbf{k}\bar{\sigma}}^+ | X_{\mathbf{k}\sigma}^+ \rangle\rangle = 0.$$

В (8) перенормированный электронный спектр $\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$ описывается выражением

Рис.1. Диаграммы для аномальной компоненты массового оператора t - J^* -модели

$$\begin{aligned} \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} = & \epsilon - \frac{n^2}{4} \frac{1 - n/4}{1 - n/2} J_0 + \\ & + \left(1 - \frac{n}{2}\right) t_{\mathbf{k}} - \frac{n}{2} \left(1 - \frac{n}{2}\right) \frac{t_{\mathbf{k}}^2}{U} - \\ & - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \left\{ t_{\mathbf{q}} + \frac{n}{2} J_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + [(2-n) t_{\mathbf{k}} + \right. \\ & \left. + (1-n) t_{\mathbf{q}}] \frac{t_{\mathbf{q}}}{U} \right\} n_{\mathbf{q}\sigma}, \end{aligned} \quad (9)$$

где фурье-образ интеграла перескока $t_{\mathbf{q}} = 2t(\cos q_x + \cos q_y)$ записан в приближении ближайших соседей, при этом $J_{\mathbf{q}} = (2t/U) t_{\mathbf{q}}$, а $n_{\mathbf{q}\sigma}$ определяется выражением

$$\begin{aligned} n_{\mathbf{q}\sigma} = & \frac{E_{\mathbf{q}} - \xi_{\mathbf{q}}}{2E_{\mathbf{q}}} + \frac{\xi_{\mathbf{q}}}{E_{\mathbf{q}}} (\exp(E_{\mathbf{q}}/T) + 1)^{-1}, \\ \xi_{\mathbf{q}} = & \tilde{\epsilon}_{\mathbf{q}} - \mu. \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь $E_{\mathbf{q}} = \sqrt{(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{q}} - \mu)^2 + |\Delta_{\mathbf{q}}|^2}$ – спектр квазичастичных возбуждений, через $\Delta_{\mathbf{q}}$ обозначен ПП сверхпроводящего состояния.

Для демонстрации относительной роли трехцентровых взаимодействий приведем вклады в компоненту массового оператора $\Sigma_{0\uparrow,\downarrow}(\mathbf{p}, \omega_n)$, определяющего сверхпроводящий параметр порядка. На рис.1 показаны десять графиков, аналитические выражения которых в сумме определяют

$$\begin{aligned} \Sigma_{0\uparrow,\downarrow}(\mathbf{p}, \omega_n) = & -\frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}\omega_m} [2t_{\mathbf{q}} + (J_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} + J_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}) + \\ & + A_{\mathbf{q}}^{(3)}] G_{0\uparrow,\downarrow}(\mathbf{p}, \omega_m), \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} A_{\mathbf{q}}^{(3)} = & \left(1 - \frac{n}{2}\right) \frac{4t_{\mathbf{p}} t_{\mathbf{q}}}{U} - n \left(\frac{t_{\mathbf{q}}^2}{U} - \frac{J_0}{2}\right) - \\ & - \left(1 - \frac{n}{2}\right) (J_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} + J_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}). \end{aligned}$$

В (11) вклад $\sim 2t_{\mathbf{q}}$ происходит от двух первых графиков и определяет кинематический механизм [10],

слагаемое в круглых скобках отражает вклад, определяемый третьим и четвертым графиками [7] и обуславливает магнитный механизм t - J -модели. Наконец, слагаемое $\sim A_{\mathbf{q}}^{(3)}$ индуцировано трехцентровыми взаимодействиями $H_{(3)}$ и определяется последними шестью графиками рис.1.

Для d -симметрии ПП наиболее существенным фактором является последнее слагаемое в $A_{\mathbf{q}}^{(3)}$, приводящее в полном $\Sigma_{0\uparrow,\downarrow}$ к перенормировке константы связи по сценарию $J \rightarrow J[1 - (1 - n/2)] = (n/2)J$. Эта перенормировка и определяет сильное влияние $H_{(3)}$ на формирование сверхпроводимости с d -симметрией ПП. Уравнение самосогласования для ПП находится обычным образом:

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

Отличие этого уравнения от соответствующего уравнения для t - J -модели заключается в двух моментах. Во-первых, появились дополнительные слагаемые, которые легко отличить по явной зависимости от параметра U . Второе отличие имеет более важное значение и связано с уже отмеченной перенормировкой коэффициента, стоящего перед слагаемыми $J_{\mathbf{k}\pm\mathbf{q}}$.

4. В приближении ближайших соседей уравнение для ПП обладает решениями с различным типом симметрии параметра порядка $\Delta_{\mathbf{k}}$. Решение с s -типом симметрии $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta_0$ не удовлетворяет правилу сумм [9] и не рассматривается. Наибольший интерес представляет решение с d -симметрией ПП: $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta_0 (\cos k_x - \cos k_y)$. В этом случае уравнения для определения температурной зависимости $\Delta_0(T)$

и вычисления критической температуры T_c записываются следующим образом:

$$1 = \frac{nJ}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{(\cos q_x - \cos q_y)^2}{E_{\mathbf{q}}} \text{th} \left(\frac{E_{\mathbf{q}}}{2T} \right),$$

$$1 = \frac{nJ}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{(\cos q_x - \cos q_y)^2}{\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{q}} - \mu} \text{th} \left(\frac{\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{q}} - \mu}{2T_c} \right). \quad (12)$$

На рис.2 представлены результаты численного решения уравнения на T_c при различных n для $t-J^*$ -модели (кривая 2). Для сравнения показана зависи-

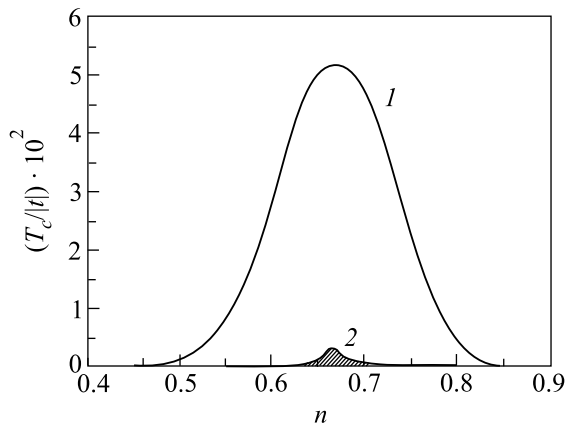


Рис.2. Области сверхпроводящего состояния в $t-J$ - (кривая 1) и $t-J^*$ -моделях (2)

мость T_c от концентрации электронов, полученная без учета $H_{(3)}$ (кривая 1). Численные расчеты проводились в предположении, что отношение $2|t|/U$ равнялось 0.25. Видно, что включение $H_{(3)}$ приводит к существенному уменьшению температуры перехода в сверхпроводящее состояние (заштрихованная область).

Уменьшение критической температуры за счет $H_{(3)}$ обусловлено двумя факторами. Первый (и главный) заключается в перенормировке константы связи. Второй фактор проявляется посредством дополнительной перенормировки электронного энергетического спектра. Для демонстрации роли второго фактора на рис.3 показаны (в увеличенном масштабе по сравнению с рис.1) зависимости критической температуры в $t-J^*$ -модели от концентрации электронов как при учете вкладов от $H_{(3)}$ в ренормировку электронного спектра (кривая 2), так и без них (кривая 2'). Видно, что второй фактор гораздо слабее влияет на T_c .

На рис.4 показаны зависимости T_c от отношения $2|t|/U$, полученные без учета трехцентровых взаимодействий (кривая 1) и при их учете (кривая 2). Для приведенных графиков значение концентрации

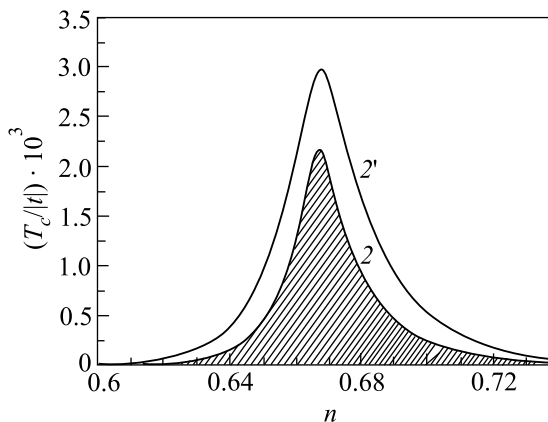


Рис.3. Изменение T_c за счет перенормировки спектра, обусловленной $H_{(3)}$

электронов соответствует оптимальному допированию ($n = 0.665$). Видно, что при $2|t|/U = 0.25$ (штриховые линии) T_c , полученная при учете влияния $H_{(3)}$, в 25 раз меньше T_c , вычисленной без учета отмеченных взаимодействий.

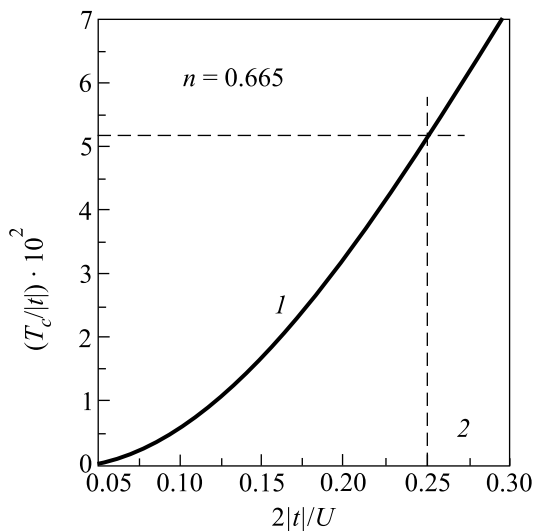


Рис.4. Влияние $H_{(3)}$ на зависимость T_c от параметра $2|t|/U$

5. Для наглядной демонстрации физической причины полученной перенормировки константы связи трехцентровыми взаимодействиями рассмотрим действие операторов H_{t-J} и $H_{(3)}$ на синглетную пару. Если других электронов нет, то состояние системы с такой синглетной парой описывается кет-вектором:

$$|\psi(f, f + \Delta)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(X_f^{\uparrow 0} X_{f+\Delta}^{\downarrow 0} - X_f^{\downarrow 0} X_{f+\Delta}^{\uparrow 0} \right) |0\rangle,$$

где $|0\rangle$ – состояние без электронов. Эта пара есть собственный вектор H_{t-J} :

$$H_{t-J}|\psi(f, f + \Delta)\rangle = (2\epsilon - 4t^2/U)|\psi(f, f + \Delta)\rangle.$$

После действия $H_{(3)}$ на синглетную пару получается суперпозиция состояний:

$$\begin{aligned} H_{(3)}|\psi(f, f + \Delta)\rangle = \\ = (-2t^2/U) \sum_{\Delta_1 \neq -\Delta} \{|\psi(f, f + \Delta_1)\rangle + \\ + |\psi(f + \Delta + \Delta_1, f + \Delta)\rangle\}. \end{aligned}$$

Видно, что влияние $H_{(3)}$ сводится к поворотам на углы: $\pi/2, \pi, 3\pi/2$ рассматриваемой синглетной пары вокруг узлов f и $f + \Delta$. Существенно, что возникающий при этом энергетический параметр равняется $-2t^2/U$. Вследствие этого, при записи правой части последнего уравнения в виде, не содержащем ограничения $\Delta_1 \neq \Delta$ (такого типа процедуру приходится делать при переходе к фурье-представлению), необходимо добавить слагаемое $(+4t^2/U)|\psi(f, f + \Delta)\rangle$, которое полностью компенсирует действие обменной части гамильтониана H_{t-J} . Таким образом, видно, что трехцентровые слагаемые гамильтониана вносят существенный вклад в динамику синглетных пар, формирование которых лежит в основе механизма сверхпроводящего спаривания. Поэтому в случае, когда в системе имеется только одна синглетная пара, можно говорить о полной компенсации выделенных двухцентровых слагаемых эффективного гамильтониана. При наличии в системе других электронов трехцентровые слагаемые действуют так, что в результирующую суперпозицию начинают вносить вклад те состояния, которые возникают в результате изменения соседних к рассматриваемой синглетной паре узлов решетки. Эти дополнительные вклады возрастают по мере заполнения электронами соседних к паре узлов. Данные обстоятельства объясняет

появление концентрационного множителя, приводящего к отмеченной выше перенормировке константы связи.

В заключение отметим, что проведенный анализ однозначно указывает на существенную роль трехцентровых взаимодействий при формировании сверхпроводящего состояния с d -типом симметрии ПП. Если без $H_{(3)}$ при типичных значениях параметров получались $T_c \sim 100$ К [2], то с их учетом имеем $T_c \sim 4$ К для тех же параметров.

Авторы выражают благодарность Е. В. Кузьмину и В. И. Зиненко за полезное обсуждение результатов работы.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант # 00-02-16110), РФФИ и ККФН “Енисей” (грант # 02-02-97705). Один из авторов (Д.М.Д.) признателен Благотворительному Фонду содействия отечественной науке за финансовую поддержку исследований.

1. J. Hubbard, Proc.R.Soc.London Ser. **A276**,238 (1963).
2. Ю. А. Изюмов, УФН **167**, 465 (1997).
3. С. Г. Овчинников, УФН **167**, 1043 (1997).
4. Н. Н. Боголюбов, *Лекции по квантовой статистике*, Киев: Наукова думка, 1949.
5. Э. Л. Нагаев, *Магнетики со сложными обменными взаимодействиями*, М.: Наука, 1988.
6. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **70**, 1100 (1976).
7. Ю. А. Изюмов, М. И. Кацнельсон, Ю. Н. Скрябин, *Магнетизм коллективизированных электронов*, М.: Физматлит, 1994.
8. N. M. Plakida, V. Yu. Yushankhay, and I. V. Stasyuk, Physica **C162–164**, 787 (1989).
9. V. Yu. Yushankhay, N. M. Plakida, and P. Kalinay, Physica **C174**, 401 (1991).
10. Р. О. Зайцев, В. А. Иванов, Письма в ЖЭТФ **46**, 140 (1987).