

## КУПЕРОВСКОЕ СПАРИВАНИЕ И СВЕРХТЕКУЧЕСТЬ В МОДЕЛИ ЭМЕРИ

*В.А.Кашурников, Е.Г.Холмовский*

*Московский государственный инженерно-физический институт  
(технический университет)  
115409 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 8 декабря 1995 г.

Методом точной диагонализации в двумерном кластере  $\text{Cu}_4\text{O}_8$ , а также методом "slave-boson" для больших систем рассчитана энергия системы  $E$  как функция калибровочной фазы  $\Phi$ . Показано, что при определенных параметрах гамильтониана наблюдается движение носителей с зарядом  $2e$ , то есть куперовских пар, которое идентифицируется по появлению характерного максимума  $E(\Phi)$  при  $\Phi \approx \Phi_0/2$ ,  $\Phi_0$  – квант потока. Построена фазовая диаграмма и локализована область параметров модели, где наблюдается эффект.

PACS 74.20.Mn

В последнее время интенсивно исследуются многозонные модели Хаббарда (особенно модель Эмери [1]) в связи с проблемой куперовского спаривания и симметрией сверхпроводящего состояния в высокотемпературных сверхпроводниках [2]. Однако результаты неоднозначны. Так, методы точной диагонализации [3] и Монте-Карло [4] для двумерных кластеров  $\text{Cu-O}$  (до  $4 \times 4$  ячеек  $\text{CuO}_2$ ) свидетельствуют в пользу спаривания носителей с преобладанием определенного типа симметрии ( $s^*$  – по данным [3,5]), в то время как экстраполяция данных квантового Монте-Карло к термодинамическому пределу (вплоть до  $8 \times 8$  [6] и  $16 \times 16$  ячеек  $\text{CuO}_2$  [7]) приводит к полному исчезновению аномальных средних и, следовательно, к отсутствию спаривания носителей в двумерной модели Эмери. Конечно, следует помнить, что в первом случае [3] малость исследуемой системы не позволяет сделать окончательного вывода о наличии дальнего недиагонального порядка, в то время как диапазон температур, при котором проводился расчет во втором случае [6,7], также может быть причиной отрицательного результата.

В связи с этим представляет несомненный интерес задача о принципиальной возможности спаривания носителей в двумерной модели Эмери. Существует критерий, который позволяет однозначно доказать наличие в системе носителей с зарядом  $2e$ . Согласно [8,9], при включении в систему калибровочной фазы  $\Phi$  (что соответствует вводу магнитного потока или циркулирующего тока в тороидальной геометрии) энергия системы  $E$  становится периодической функцией фазы, так что при наличии носителей с зарядом  $2e$  имеем:

$$E(\Phi/\Phi_0) = E(\Phi/\Phi_0 + \nu), \quad \nu = 0, \pm 1, \dots, \quad (1)$$

где  $\Phi_0 = hc/2e$  – квант потока. Если же заряд носителей  $e$ , то период удваивается:

$$E(\Phi/\Phi_0) = E(\Phi/\Phi_0 + 2\nu), \quad \nu = 0, \pm 1, \dots \quad (2)$$

При наличии в системе как сверхтекучей, так и нормальной ферми-жидкости могут иметь место также ситуации (1) и (2) одновременно.

Такой критерий использовался для модели Хаббарда [9] и для одномерной [10] и двумерной [11] моделей Эмери, причем для одномерной  $\text{Cu-O}$  цепочки [10] были получены условия существования спаривания носителей с зарядом  $2e$ . Однако расчеты методом Монте-Карло [11] двумерной модели Эмери дали отрицательный результат, что, возможно, объясняется как недостаточно низкой температурой расчета, так и не слишком удачным подбором параметров гамильтониана (авторы [11], как будет показано ниже, по-видимому, не попали в сверхпроводящую область для модели Эмери).

В данной работе мы использовали критерии (1) и (2) для исследования при  $T = 0$  двумерного кластера  $\text{Cu}_4\text{O}_8$  с помощью метода точной диагонализации. При этом мы исследовали широкий диапазон значений параметров гамильтониана и получили явные доказательства куперовского спаривания носителей с зарядом  $2e$ .

Проведены также предварительные расчеты методом "slave-boson" [12] для больших систем, которые подтверждают данные точной диагонализации.

Гамильтониан модели Эмери в дырочном представлении имеет вид [1-7]

$$H = -t \sum_{\langle ik \rangle \sigma} (d_{i\sigma}^{\dagger} p_{k\sigma} \exp(i\pi\Phi/2\Phi_0 L) + \text{э.с.}) + \epsilon \sum_{k\sigma} n_{k\sigma} + U_d \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + U_p \sum_k n_{k\uparrow} n_{k\downarrow}, \quad (3)$$

который описывает гибридизацию  $d_{x^2-y^2}$ - и  $p_x$ -,  $p_y$ -орбиталей в  $\text{CuO}_2$ -плоскости с интегралом перекрытия  $t$ , различие энергий на медном и кислородном узлах  $\epsilon$ , кулоновское отталкивание на меди  $U_d$  и кислороде  $U_p$ . Здесь  $\Phi$  - калибровочная фаза,  $L$  - линейный размер системы в периодах ячейки (для  $\text{Cu}_4\text{O}_8$   $L = 2$ ). Магнитный поток введен только для направления вдоль одной из осей решетки.

Для 12-узельного кластера  $\text{Cu}_4\text{O}_8$  с периодическими граничными условиями мы исследовали следующий диапазон параметров модели:  $U_p = 0$ ,  $-10 < U_d < 100$ ,  $0 < \epsilon < 10$  (в единицах  $t$ ). Основные расчеты проводились для трех концентраций носителей  $N$ :  $N = 4$  (недопированное состояние),  $N = 3$  (электронное допирование) и  $N = 5$  (дырочное допирование). Типичные результаты показаны на рис.1 и 2а, где приведены зависимости энергии основного состояния  $E_0$  от фазы при различных параметрах гамильтониана. Как видно из рис.1, в допированном состоянии наблюдается зависимость  $E_0(\Phi)$  с периодом  $2\Phi_0$ , то есть в этом случае имеет место условие (2), что соответствует обычному одночастичному переносу заряда [8,9].

Напротив, в недопированной ситуации (рис.2а) наблюдается максимум зависимости  $E_0(\Phi)$  при  $\Phi \approx \Phi_0/2, 3\Phi_0/2, \dots$ , который свидетельствует о том, что имеет место также и ситуация (1), то есть куперовское спаривание с зарядом  $2e$  [8,9]. Как видно из рис.2а, идеальная периодичность наблюдается при  $U_d = 2.5$ ,  $\epsilon = 1$  (в этом случае  $E_0(0) = E_0(\Phi_0)$ ). При возрастании взаимодействия  $U_d$  точка максимума все ближе подходит к значению  $\Phi_0/2$ , что объясняется уменьшением корреляционных длин и, как следствие, эффективным увеличением размера системы.

На первый взгляд, наличие тока (и сверхтока) в исходно недопированной системе выглядит как парадокс. Однако его легко снять, если учесть, что калибровочная фаза вносит в одночастичный спектр дополнительный вклад  $\Delta E_{\Phi} \sim t(\Phi/\Phi_0 L)^2$ . Для нашей малой системы этот вклад при  $\Phi \sim \Phi_0$  существенно искажает спектр, внося эффективное дырочное допирование, схлопывая

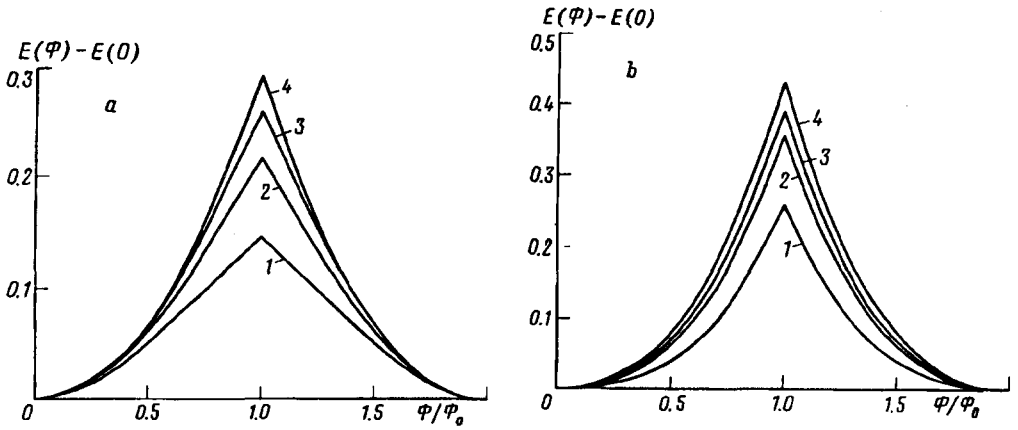


Рис.1. Зависимость энергии основного состояния кластера  $\text{Cu}_4\text{O}_8$  от фазы в допированном случае: а)  $N=3$ ,  $U_d=6$ , кривая 1 -  $\epsilon=10$ , 2 - 5, 3 - 3, 4 - 0; б)  $N=5$ ,  $\epsilon=1$ , кривая 1 -  $U_d=100$ , 2 - 10, 3 - 6, 4 - 0-2

диэлектрическую щель и тем самым сдвигая уровень Ферми в зону проводимости. Таким образом, при  $N=4$  в кластере  $\text{Cu}_4\text{O}_8$  мы имеем дело не с диэлектрическим, а с металлическим состоянием с концентрацией  $x^*$  (по предварительным данным  $x^* \sim 0.2$  - то есть близко к оптимальному<sup>1)</sup>).

Что касается исходно допированных состояний с  $N=3$  и  $N=5$ , при которых мы не наблюдаем спаривания, то с нашей точки зрения два основных обстоятельства приводят к отрицательному результату: а) нескомпенсированный спин ( $S_z = \pm 1/2$ ), к которому система малых размеров чувствительна; б) эффективное дырочное допирование из-за фазы, которое приводит к тому, что при  $N=3$  концентрация избыточных носителей близка к нулю, а при  $N=5$  она слишком велика.

Мы исследовали также систему с  $N=2$  и  $N=6$  и  $S_z=0$ , но не получили признаков спаривания. Видимо, при  $N=2$  носителей слишком мало, а при  $N=6$  - избыточно много, что не дает проявиться эффекту даже при скомпенсированном спине.

Таким образом, мы получаем условия, наиболее оптимальные для наблюдения куперовских пар именно при "недопированном" состоянии с  $N=4$  для нашего кластера, так как в этом случае  $S_z=0$  и имеется эффективная концентрация  $x^*$ .

Куперовское спаривание, то есть наличие максимума  $E(\Phi)$  при  $\Phi \sim \Phi_0/2$ , наблюдается не для всех значений параметров гамильтониана Эмери. На рис.3 мы приводим фазовую диаграмму в переменных  $\epsilon - U_d$ , при этом область существования сверхпроводящих корреляций отмечена знаком  $S$  (критерий отбора  $S$ -области - наличие максимума  $E(\Phi)$  при  $0.4 < \Phi/\Phi_0 < 0.6$ ). Значения параметров в отмеченной области близки к тем, при которых исследованная ранее в этом же кластере энергия связи носителей была отрицательна [13].

<sup>1)</sup>Для точной оценки  $x^*$  необходимо рассчитать одночастичную плотность состояний с учетом фазы. Эти результаты будут опубликованы позднее.

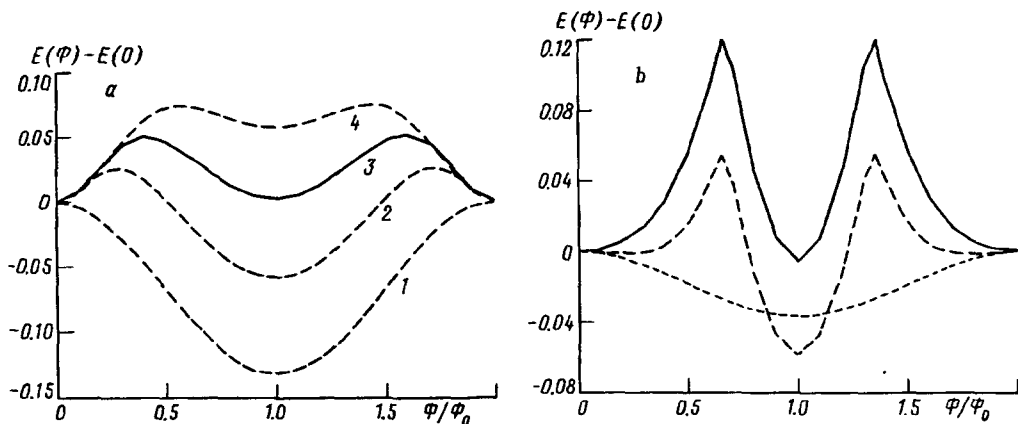


Рис.2. а) Зависимость энергии кластера  $\text{Cu}_4\text{O}_8$  от фазы в "недопированном состоянии";  $N = 4$ ,  $\epsilon = 1$ , кривая 1 -  $U_d = 0$ , 2 - 1, 3 - 2.5, 4 - 6. б) Результаты расчета кластера  $\text{Cu}_{16}\text{O}_{32}$  методом "slave-boson";  $\epsilon = 1$ ,  $U_d = 8$ , пунктирная кривая - концентрация  $n = 1$ , штриховая  $n = 0.75$ , сплошная -  $n = 1.25$

Отметим, что указанная область, конечно, лишь качественно очерчивает границы эффекта, для большой системы эти данные могут быть несколько изменены. Тем не менее, параметры двумерной модели Эмери, исследованные с помощью Монте-Карло в [11], выпадают из области  $S$  (что, может быть, и явилось причиной отрицательного результата в [11]).

Рассмотрим вопрос о влиянии размеров кластера на результаты расчета. Чтобы можно было говорить о термодинамическом пределе, необходимо, чтобы добавка к энергии за счет фазы была мала:  $\Delta E_\Phi \ll t$ , то есть при  $\Phi \sim \Phi_0$  имеем  $L^{-2} \ll 1$ . Конечно, для кластера  $\text{Cu}_4\text{O}_8$  говорить о выполнении этого условия затруднительно (что и выражается в эффекте конечного размера - дополнительном допировании). Тем не менее, абсолютный вклад в энергию системы за счет фазы мал:  $[E(\Phi) - E(0)]/E(0) \sim 10^{-2}$ , что дает уверенность в том, что наблюдаемое куперовское спаривание не является чисто размерным эффектом. Кроме того, для идентификации эффекта в больших кластерах мы провели предварительные расчеты методом "slave-boson" [12] систем с числом ячеек  $\text{CuO}_2$   $4 \times 4$  и  $8 \times 8$ . На рис.2б показаны данные для кластера  $4 \times 4$ , рассчитанные для различной степени допирования <sup>2)</sup>. Виден четкий максимум при  $\Phi \sim \Phi_0/2$  как при электронном, так и при дырочном допировании. В диэлектрической фазе ( $n = 1$ ) зависимость  $E(\Phi)$  довольно слабая, что свидетельствует об отсутствии эффективного допирования для такой достаточно большой системы (при этом для кластера  $8 \times 8$   $E$  уже не зависит от  $\Phi$  при  $n = 1$ ). Кроме того, при увеличении размера кластера до  $8 \times 8$  точка сверхтекучего максимума на зависимости  $E(\Phi)$  все более приближается к значению  $\Phi_0/2$ .

Таким образом, мы представили доказательства существования куперовского спаривания и сверхтекучести в двумерной модели Эмери и локализовали область параметров, где наблюдается эффект. Подчеркнем, что изучалось

<sup>2)</sup>Расчеты этим методом больших систем будут в дальнейшем опубликованы.

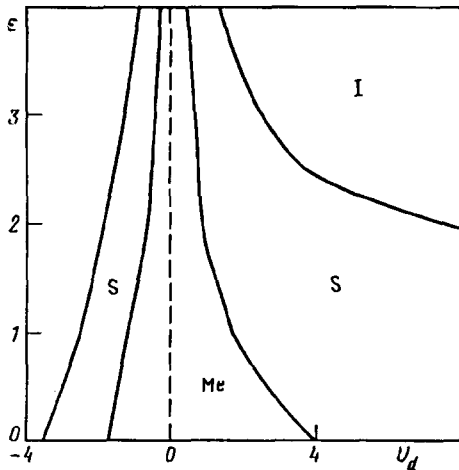


Рис.3. Фазовая диаграмма кластера  $\text{Cu}_4\text{O}_8$ . S – область куперовского спаривания (максимум  $E(\Phi)$  при  $0.4 < \Phi/\Phi_0 < 0.6$ ), I – изолятор, Me – металл

основное состояние при  $T = 0$ . С нашей точки зрения, если абстрагироваться от экспериментальных значений  $T_c$ , то в данной модели при исследованном диапазоне параметров критическая температура может быть и выше масштаба  $0.01t \sim 100$  К, что позволяет надеяться, что методы Монте-Карло могут быть с успехом использованы для тестирования сверхтекучести. Поэтому отрицательный результат работы [11] связан, как мы полагаем, в основном со слишком узким диапазоном исследованных в ней параметров модели Эмери.

Авторы признательны Б.В.Свистуну за полезные дискуссии и обсуждение результатов. Работа выполнена частично благодаря Международному научному фонду (проект М67300), а также поддержана Российской государственной программой "Высокотемпературная сверхпроводимость" (проект 90431) и Российским фондом фундаментальных исследований (проект 94-02-05755).

1. V.J.Emery, Phys. Rev. Lett. **58**, 2794 (1987).
2. D.J.Scalapino, Phys. Reports. **250**, 329 (1995); V.J.Emery, Nature **370**, 598 (1994).
3. В.Ф.Елесин, А.В.Крашенинников, Л.А.Опенев, ЖЭТФ **107**, 2092 (1995).
4. R.T.Scalettar, D.J.Scalapino, R.L.Sugar, and S.R.White, Phys. Rev. **B44**, 770 (1991).
5. А.В.Крашенинников, Л.А.Опенев, В.Ф.Елесин, Письма в ЖЭТФ **62**, 53 (1995).
6. M.Frick, P.C.Pattnaik, I.Morgenstern et al., Phys. Rev. **B42**, 2665 (1990).
7. В.А.Кашурников, ЖЭТФ **108**, 1796 (1995).
8. N.Byers and C.N.Yang, Phys. Rev. Lett. **7**, 46 (1961); C.N.Yang, Rev. Mod. Phys. **34**, 694 (1962).
9. D.J.Scalapino, S.R.White, and S.Z.Lang, Phys. Rev. **B47**, 7995 (1993).
10. A.Sudbo, C.M.Varma, T.Giamarchi et al., Phys. Rev. Lett. **70**, 978 (1993).
11. F.F.Assaad, W.Hanke, and D.J.Scalapino, Phys. Rev. **B50**, 12835 (1994).
12. В.Ф.Елесин, Л.А.Опенев, Е.Г.Холмовский и др., Письма в ЖЭТФ **61**, 941 (1995).
13. В.Ф.Елесин, В.А.Кашурников, Л.А.Опенев, А.И.Подливаев, ЖЭТФ **99**, 237 (1991); ЖЭТФ **101**, 682 (1992).