

ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА 2D МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ С ПЕРЕМЕННЫМ ЧИСЛОМ НОСИТЕЛЕЙ

В.П.Гусынин, В.М.Локтев ¹⁾, С.Г.Шарапов

*Институт теоретической физики им. Н.Н.Боголюбова НАН Украины
252143 Киев, Украина*

Поступила в редакцию 28 октября 1996 г.

После переработки 17 декабря 1996 г.

Показано, что фазовая диаграмма 2D металла, испытывающего сверхпроводящий переход, состоит из областей нормальной фазы, где модуль параметра порядка отсутствует, фазы, названной "аномальной нормальной", где он отличен от нуля, но его фаза есть случайная величина, и фазы Березинского-Костерлица-Таулесса. Найдены характерные температуры переходов между ними и поведение химического потенциала в зависимости от плотности фермионов и температуры.

PACS: 67.20.+k, 74.20.-z, 74.25.-q, 74.72.-h,

1. Кроссовер между предельными случаями сверхпроводимости куперовских пар и сверхтекучести составных бозонов привлекает внимание как сам по себе, так и в связи с проблемой описания высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) (см., например, [1]). К настоящему моменту достигнуто понимание кроссоверной области для 3D систем при произвольных температурах [2], рассмотрен, хотя и не полно, кроссовер в квазидвумерных системах [3], в то время как для 2D систем изучен только случай $T = 0$ [2, 4]. Последнее, как известно, связано с тем, что флуктуации фазы заряженного (комплексного) параметра порядка (ПП) в 2D системах столь велики, что делают невозможным установление в них дальнего порядка при любых конечных T (теорема Мермина-Вагнера-Хоэнберга ²⁾). Описание же появления неоднородного конденсата со степенным убыванием корреляций (так называемой фазы Березинского-Костерлица-Таулесса ³⁾ (БКТ)) сопряжено с целым рядом сложностей. Тем не менее, и в этом направлении сделан ряд шагов. Например, в [5] изучен переход БКТ в релятивистской $(2 + 1)$ -теории, а в [6] рассматривался и кроссовер по величине плотности носителей n_f от сверхпроводимости к сверхтекучести. Вместе с тем, способ получения температуры T_{BKT} перехода БКТ в [6] имеет ряд недостатков. В частности, уравнение для T_{BKT} получено без учета существования нейтрального (действительного) ПП ρ , появление которого при конечных T , будучи связано с нарушением лишь дискретной симметрии, не противоречит упомянутой теореме. Как будет видно, величина ρ задает модуль многозначного комплексного ПП 2D системы в целом, причем только последний определяет возможность формирования в ней неоднородных (в том числе вихревых) конфигураций. В результате же учета нейтрального ПП на фазовой диаграмме системы появляется область постепенного убывания ρ до нуля, разделяющая обычную нормальную фазу (НФ) с $\rho = 0$ и фазу БКТ. Несмотря на экспоненциальное спадание корреляций в этой новой области состояний, она, вполне вероятно, обладает необычными свойствами, поскольку величина ρ входит во все выражения таким же

¹⁾ e-mail: vloktev@gluk.apc.org

²⁾ Mermin - Wagner - Hohenberg.

³⁾ Berezinskii - Kosterlitz - Thouless.

образом, как энергетическая щель Δ в теории обычных сверхпроводников, хотя расчет наблюдаемого одночастичного спектра, разумеется, требует учета затухания носителей вследствие их рассеяния на флуктуациях фазы ПП, а также, если иметь в виду реальные системы, на допантах [7]. Не исключено, что возможность существования такой, в известном смысле тоже нормальной, фазы позволит глубже разобраться в зачастую аномальном (см., например, [1]) поведении нормального состояния ВТСП, а именно: температурных зависимостях спиновой восприимчивости, удельного электрического сопротивления, теплоемкости, фотоэмиссионных спектров и т.д. (см. [8, 9]), для объяснения которых в настоящее время широко используется представление о псевдощели (а также спиновой щели), формирующейся в области $T > T_c$.

Цель нашей работы – установить фазовую диаграмму в переменных $n_f - T$ 2D металла, носители которого притягиваются друг к другу, и рассчитать функции n_f температуры T_{BKT} и T_c^{MF} (T_c^{MF} – температура, где $\rho \rightarrow 0$), между которыми лежит область "аномальной нормальной" фазы (АНФ).

2. Запишем наиболее простой модельный гамильтониан, описывающий фермионы 2D в объеме v :

$$H = \psi_\sigma^\dagger(x) \left[-\frac{\nabla^2}{2m} - \mu \right] \psi_\sigma(x) - V \psi_\uparrow^\dagger(x) \psi_\downarrow^\dagger(x) \psi_\downarrow(x) \psi_\uparrow(x). \quad (1)$$

Здесь $x \equiv r, \tau$; $\psi_\sigma(x)$ – ферми-поле, m – эффективная масса фермионов, σ – их спин, μ – химический потенциал, V – константа притяжения и положено $\hbar = k_B = 1$.

Расчет искомой фазовой диаграммы выполнялся с использованием метода Хаббарда–Стратоновича (см., например, [4]), ставшего в подобных задачах стандартным; в нем статистическая сумма $Z(v, \mu, T)$ представляется функциональным интегралом по ферми-полям (спинорам Намбу) и вспомогательному полю $\Phi = V \psi_\uparrow^\dagger \psi_\downarrow^\dagger$. Однако в 2D случае принятый способ вычисления Z в переменных Φ , Φ^* целесообразнее заменить вычислением в переменных модуль–фаза, вводя согласно [10] параметризацию $\Phi(x) = \rho(x) \exp[-i2\theta(x)]$, соответствующую очевидному преобразованию: $\psi_\sigma(x) = \chi_\sigma(x) \exp[i\theta(x)]$, где полевой оператор $\chi_\sigma(x)$ описывает нейтральные фермионы, а $\exp[i\theta(x)]$ отвечает зарядовой степени свободы. В результате соответствующей замены в (1) и интегрирования по χ -полям приходим к выражению $Z = \int \rho \mathcal{D}\rho \mathcal{D}\theta \exp[-\beta \Omega(\rho, \partial\theta)]$, в котором

$$\Omega(\rho, \partial\theta) = \frac{T}{V} \int_0^\beta d\tau \int d\mathbf{r} \rho^2 - T \text{Tr} \ln \mathcal{G}^{-1} \quad (2)$$

– эффективный термодинамический потенциал системы, а \mathcal{G} – ее одночастичная функция Грина, так что

$$\begin{aligned} \mathcal{G}^{-1} &= -\hat{I} \partial_\tau + \tau_3 \left(\frac{\nabla^2}{2m} + \mu \right) + \tau_1 \rho - \tau_3 \left(i\partial_\tau \theta + \frac{(\nabla\theta)^2}{2m} \right) + \hat{I} \left(\frac{i\nabla^2 \theta}{2m} + \frac{i\nabla\theta \nabla}{m} \right) \equiv \\ &\equiv G^{-1}(\rho) - \Sigma(\partial\theta); \end{aligned} \quad (3)$$

при этом Tr в (2) берется по пространству \mathbf{r} , мнимому времени τ ($\leq \beta \equiv 1/T$) и индексам Намбу, входящим в матрицы Паули τ_j . Важно отметить, что при получении (3) не предполагались ни малость, ни медленность изменений фазы ПП.

Считая, что низкоэнергетическая динамика в фазах, где $\rho \neq 0$, определяется в основном длинноволновыми флуктуациями $\theta(x)$, можно ограничиться разложением $\Omega(\rho, \partial\theta)$ только по нижайшим производным, представив

$$\begin{aligned}\Omega(\rho, \partial\theta) &= \Omega_{kin}(\rho, \partial\theta) + \Omega_{pot}(\rho); \quad \Omega_{kin}(\rho, \partial\theta) = T \text{Tr} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} (G\Sigma)^n \Big|_{\rho=\text{const}}; \\ \Omega_{pot}(\rho) &= \frac{1}{V} \int d\mathbf{r} \rho^2 - T \text{Tr} \text{Ln} G^{-1} \Big|_{\rho=\text{const}}.\end{aligned}\quad (4)$$

3. В разложении Ω_{kin} вплоть до членов $\sim (\nabla\theta)^2$ достаточно в (4) ограничиться слагаемыми с $n=1, 2$. Схема вычислений аналогична использованной в [11], где рассмотрен лишь случай высоких плотностей n_f при $T=0$, и дает ⁴⁾

$$\Omega_{kin} = \frac{T}{2} \int_0^\beta d\tau \int d\mathbf{r} J(\mu, T, \rho(\mu, T)) (\nabla\theta)^2, \quad (5)$$

где

$$J(\mu, T, \rho) = \frac{1}{m} n_F(\mu, T, \rho) - \frac{T}{\pi} \int_{-\mu/2T}^{\infty} dx \frac{x + \mu/2T}{\cosh^2 \sqrt{x^2 + \frac{\rho^2}{4T^2}}}, \quad (6)$$

а функция

$$n_F(\mu, T, \rho) = \frac{m}{2\pi} \left\{ \sqrt{\mu^2 + \rho^2} + \mu + 2T \ln \left[1 + \exp \left(-\frac{\sqrt{\mu^2 + \rho^2}}{T} \right) \right] \right\} \quad (7)$$

соответствует плотности ферми-квазичастиц (при $\rho=0$ выражение (7) ни что иное, как плотность свободных фермионов). Непосредственное сравнение (5) с гамильтонианом XY-модели [12] и близость физических ситуаций (двухкомпонентный ПП в 2D системе) позволяют записать уравнение для T_{BKT} :

$$\frac{\pi}{2} J(\mu, T_{BKT}, \rho(\mu, T_{BKT})) = T_{BKT}. \quad (8)$$

Хотя математически задача сведена к известной, аналогия нельзя считать полной. Действительно, в стандартной XY-модели (а также нелинейной σ -модели) упорядочивающийся вектор (спин) считается единичным вне зависимости ⁵⁾ от T . В исследуемом случае это принципиально не так, и самосогласованное вычисление T_{BKT} как функции n_f требует дополнительных уравнений для ρ и μ , образующих с (8) полную систему. (В теории БКШ, справедливой, напомним, для обычных металлов, считается, что $\mu = \epsilon_F$, ϵ_F – энергии Ферми, и тем самым химический потенциал неизвестной величиной не является.)

4. Эффективный потенциал Ω_{pot} (см. (4)) после вычислений приобретает вид

$$\Omega_{pot}(\rho) = v \left[\frac{\rho^2}{V} - \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \left\{ 2T \ln \cosh \frac{\sqrt{\xi^2(\mathbf{k}) + \rho^2}}{2T} - \xi(\mathbf{k}) \right\} \right], \quad (9)$$

⁴⁾ Опущены полная производная по τ и слагаемые, не существенные для дальнейших расчетов.

⁵⁾ При этом не вызывает сомнений, что в определенных ситуациях (например, очень высокие T) он также может стать термодинамической, то есть зависящей от T , переменной, как это имеет место в задачах о фазовых переходах между упорядоченной (магнитной) и разупорядоченной (парамагнитной) фазами, когда исчезает сам спин. В частности, для квазидвумерных спиновых систем практически очевидно: если идти из области высоких T , сначала сформируется модуль спина в 2D кластерах конечного размера и лишь затем произойдет глобальное (3D) упорядочение.

где $\xi(\mathbf{k}) = \mathbf{k}^2/2m - \mu$. Тогда искомые недостающие уравнения суть условие $\partial\Omega_{pot}(\rho)/\partial\rho = 0$ минимальности (9) и равенство $v^{-1}\partial\Omega_{pot}/\partial\mu = -n_f$, фиксирующее n_f ; для них имеем, соответственно:

$$\frac{1}{V} = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{1}{2\sqrt{\xi^2(\mathbf{k}) + \rho^2}} \tanh \frac{\sqrt{\xi^2(\mathbf{k}) + \rho^2}}{2T}, \quad (10)$$

$$n_F(\mu, T, \rho) = n_f. \quad (11)$$

Полученные уравнения (10) и (11) составляют самосогласованную систему для определения модуля ПП ρ ⁶⁾ и химического потенциала μ в приближении среднего поля при заданных T и n_f . Они же (ρ и μ), как говорилось, служат исходными значениями при вычислении T_{BKT} . Тот факт, что потенциал (9) явно зависит от ρ^2 , есть следствие лишь определенной симметрии спектра собственных значений оператора (3).

Если в (10) и (11) положить $\rho = 0$, то приходим (в том же приближении) к уравнениям для критической температуры T_c^{MF} и соответствующего ей значения μ :

$$\ln \frac{|\epsilon_b|}{T_c^{MF}} \frac{\gamma}{\pi} = - \int_0^{\mu/2T_c^{MF}} du \frac{\tanh u}{u} \quad (\gamma = 1.781), \quad (12)$$

$$T_c^{MF} \ln \left[1 + \exp \left(\frac{\mu}{T_c^{MF}} \right) \right] = \epsilon_F. \quad (13)$$

Здесь $\epsilon_b = -2W \exp(-4\pi/mV)$ – энергия двухчастичных связанных состояний, в которой W – ширина зоны проводимости, $\epsilon_F = \pi n_f/m$, а переход к ϵ_b означает перенормировку или, другими словами, переход к пределу $W \rightarrow \infty$ и $V \rightarrow 0$. Параметр ϵ_b физически эквивалентен четырехфермионной константе V , но значительно более удобен для использования; например, уравнение (10) после перенормировки приобретает вид

$$\ln \frac{|\epsilon_b|}{\sqrt{\mu^2 + \rho^2} - \mu} = 2 \int_{-\mu/T}^{\infty} du \frac{1}{\sqrt{u^2 + (\frac{\rho}{T})^2} [\exp \sqrt{u^2 + (\frac{\rho}{T})^2} + 1]}. \quad (14)$$

Легко убедиться, что при $T = 0$ система (14), (11) имеет точное решение [2, 4] $\rho = \sqrt{2|\epsilon_b|\epsilon_F}$ и $\mu = -|\epsilon_b|/2 + \epsilon_F$, которое показывает, что как величина, так и знак μ определяются соотношением между ϵ_F и $|\epsilon_b|$. Иначе возникает естественное разделение металлических систем на системы с малыми ($\epsilon_F \ll |\epsilon_b|$), большими ($\epsilon_F \gg |\epsilon_b|$) и промежуточными ($\epsilon_F \sim |\epsilon_b|$) концентрациями. Первым соответствует формирование локальных пар и сценарий конденсации по типу сверхтекучести, вторым – куперовских пар и сверхпроводимости типа БКШ, наконец, третьим – составных бозонов промежуточного (порядка среднего расстояния между фермионами) радиуса и кроссоверный тип конденсата. Отметим также, что на (и выше) среднеполевой критической линии, разграничивающей НФ и АНФ, величина (6) обращается в нуль.

Подчеркнем, наконец, что в уравнении для переменной ρ мы ограничились приближением среднего поля, поскольку учет ее флуктуаций не является принципиальным для окончательных выводов. Что же касается фазы ПП, то ее неоднозначность учтена последовательно – малыми считались лишь $\nabla\theta(\mathbf{x})$.

⁶⁾ Следует иметь в виду, что в режиме локальных пар ($\mu < 0$), щель Δ в спектре квазичастичных возбуждений равна не ρ (как при $\mu > 0$), а $\sqrt{\mu^2 + \rho^2}$ (см. обзор [2] и цитируемую в нем литературу).

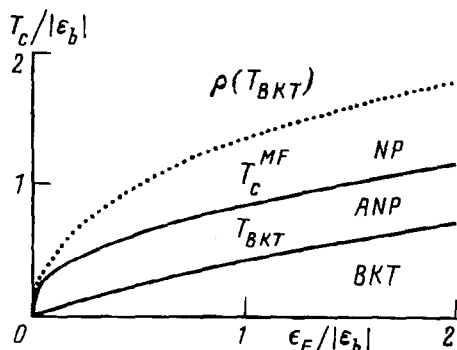


Рис.1. Зависимости T_{BKT} и T_c^{MF} от плотности затравочных фермионов. Точками изображена зависимость $\rho(\epsilon_F)$ при $T = T_{BKT}$. Отмечены области НФ (NP), АНФ (ANP) и фазы БКТ (BKT)

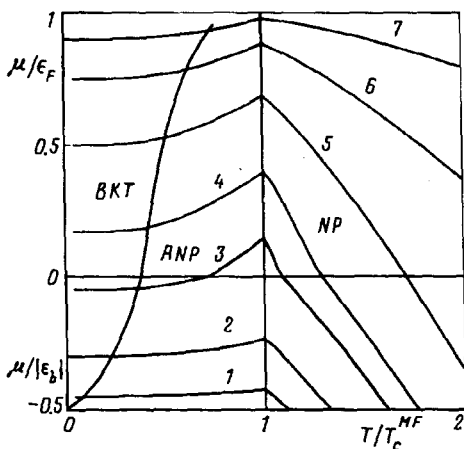


Рис.2. Функция $\mu(T)$ при различных $\epsilon_F/|\epsilon_b|$: 1 — 0.05; 2 — 0.2; 3 — 0.45; 4 — 0.6; 5 — 1; 6 — 2; 7 — 5. (При $\mu > 0$ и $\mu < 0$ обезразмеривание осуществлялось с помощью ϵ_F и $|\epsilon_b|$, соответственно.) Жирными линиями разграничены области фазы БКТ, АНФ и НФ

5. Численное исследование систем (8), (11), (14) и (12), (13) дает следующие наиболее интересные результаты, представленные графически. а) Область АНФ (см. рис. 1) в данной модели соизмерима с областью БКТ. Но не исключено, что в случае косвенного взаимодействия либо квазидвумерной модели эта область будет сужаться по мере роста n_f . б) При малых $\epsilon_F (\ll |\epsilon_b|)$ зависимость $T_{BKT}(\epsilon_F)$ линейна, что подтверждается и аналитическим решением системы (8), (11) и (14), дающим $T_{BKT} = \epsilon_F/2$. Заметим, что и для квазидвумерной модели [3] в пределе малых n_f температура формирования однородного ПП $T_c = \epsilon_F/(2\alpha)$ (где $\alpha \gg 1$). Это показывает, что слабая трехмеризация может сохранить (во всяком случае, для малых n_f) области АНФ и фазы БКТ, что, к примеру, имеет место в релятивистской квазидвумерной модели [13]. В то же время, по мере роста параметра трехмеризации фаза БКТ может исчезнуть при сохранении, однако, области АНФ и обеих T_c^{MF} и T_c — температур. в) Рис. 2 показывает, при каких n_f величина μ существенно отлична от ϵ_F и, другими словами, теория ферми-жидкости Ландау становится непригодной для описания металлов с низкой либо промежуточной плотностью носителей. Излом μ при $T = T_c^{MF}$, эксперименты по наблюдению которого обсуждались в [14] и уже интерпретировались для купрата 1 — 2 — 3 [15], с ростом ϵ_F становится, как можно было ожидать, все менее выражен. Но в данном случае обращает на себя внимание то, что в использованном приближении он имеет место на границе НФ — АНФ, или до фактического появления сверхпроводимости. Поэтому проведение экспериментов, выявляющих зависимость $\mu(T)$, особенно для сильно анизотропных (квазидвумерных) и относительно слабодопированных купратов, представляло бы большой интерес. г) Из кривой 3 рис. 2 следует, что переход (смена знака μ) от локальных пар к куперовским возможен не только при увеличении ϵ_F , что более или менее очевидно, но и (для некоторых n_f) с ростом T . д) Наконец, расчеты показали,

что отношение $2\Delta/T_{BKT}$ всегда больше 4.4; значение же $2\Delta/T_c^{MF}$ несколько меньше и выходит на предел 3.52 теории БКШ лишь при $\epsilon_F \gg |\epsilon_b|$. Интересно, что подобное поведение не противоречит многочисленным измерениям этого отношения в ВТСП [16, 17].

6. Найденная фазовая диаграмма, хотя и получена в рамках упрощающих предположений (последовательно, например, учтены флуктуации лишь фазы ПП), показывает, сколь чувствительны параметры ее критических линий к величине n_f . Вместе с тем, следует иметь в виду, что в отличие от 3D перехода, происходящего при $\rho = 0$, переход БКТ имеет место в состоянии, где $\rho \neq 0$, а потому флуктуации модуля ПП здесь, как отмечалось, должны быть менее существенны, не приводя к полному подавлению T_c^{MF} . Их учет вряд ли отразится на качественной картине, но, несомненно, было бы интересным отдельно оценить роль соответствующих вкладов флуктуаций ρ и θ . При этом можно думать, что скоррелированные и нескоррелированные пары, существование которых в ВТСП широко обсуждается (см. обзоры [1, 8, 9]), могут быть качественно сопоставлены областям рассчитанной фазовой диаграммы: так, при $T < T_{BKT}$ пары являются скоррелированными, в то время как при $T > T_{BKT}$ они нескоррелированы. В области НФ важны уже не столько флуктуации θ , сколько ρ , и следует говорить не о корреляции различных пар, а о флуктуациях числа пар.

Выше установлено существование и рассчитаны лишь границы АНФ; ее же физические свойства, в первую очередь спектр, нуждаются в специальном изучении. Хотя очевидно, что АНФ, не проявляя сверхпроводящих свойств, имеет щель (псевдощель) в спектре ферми-возбуждений.

Один из нас (В.М.Л.) благодарит В.А. Гаспарова за обсуждение возможностей наблюдения фазы БКТ в ВТСП, а также В.Ф. Гантмахера за внимание к работе и поддержку.

-
1. В.М.Локтев, ФНТ **22**, 3, 490 (1996).
 2. M.Randeria, in *Bose Einstein Condensation*, Eds. by A.Griffin, D.W.Snoko, and S.Stringari, Cambridge U.P., New Yourk, 1995, p.355.
 3. E.V.Gorbar, V.M.Loktev, and S.G.Sharapov, *Physica C* **257**, 355 (1996).
 4. Э.В.Горбар, В.П.Гусынин, В.М.Локтев, СФХТ **6**, 483 (1992); ФНТ **19**, 1171 (1993); Preprint ITP-92-54E (1992).
 5. R.MacKenzie, P.K.Panigrahi, and S.Sakhi, *Int. J. Mod. Phys. A9*, 3603 (1994).
 6. M.Drechsler and W.Zwergger, *Ann. Phys. (Germany)* **1**, 15 (1992).
 7. В.М.Локтев, Ю.Г.Погорелов, ФНТ **22**, 1018 (1996).
 8. B.G.Levi, *Physics Today* **49**, 17 (1996).
 9. H.Ding, T.Yokoya, I.C.Campuzano et al., *Nature* **382**, 51 (1996).
 10. I.J.R.Aitchison, P.Ao, D.J.Thouless, and X.-M.Zhu, Preprint CERN-TH.7385/94 (1994).
 11. A.M.J.Schakel, *Mod. Phys. Lett. B4*, 927 (1990).
 12. Ю.А.Изюмов, Ю.Н.Скрябин, *Статистическая механика магнитоупорядоченных систем*, М.: Наука, 1987, гл.15.
 13. H.Yamamoto and I.Ichinose, *Nucl. Phys. B370*, 695 (1992).
 14. D.van der Marel, *Physica C* **165**, 35 (1990).
 15. A.V.Dotsenko and O.P.Sushkov, Preprint cond-mat/9601031.
 16. T.P.Devereaux, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 4313 (1995).
 17. C.Kendziora et al., *Phys. Rev. Lett.* **77**, 727 (1996).