

## ФАЗОВЫЕ ДИАГРАММЫ $(d_{x^2-y^2} + id_{xy})$ -СВЕРХПРОВОДНИКОВ НА КВАДРАТНОЙ РЕШЕТКЕ

Е.А.Шаповал<sup>1)</sup>

Всероссийский научно-исследовательский институт метрологической службы  
117334 Москва, Россия

Поступила в редакцию 24 декабря 1997 г.

После переработки 28 января 1998 г.

Рассмотрена модель сильно связанных электронов на квадратной решетке с их притяжением на соседних и следующих за соседними узлах решетки. При различных соотношениях соответствующих потенциалов построены фазовые диаграммы этой модели в переменных температуры и химпотенциала, содержащие  $d_{x^2-y^2}$ ,  $d_{xy}$  и  $(d_{x^2-y^2} + id_{xy})$ -состояния.

PACS: 05.70.Fh, 74.72.-h

Вопрос о симметрии параметра порядка остается одной из центральных проблем высокотемпературной сверхпроводимости, при этом особое внимание обращено на второй фазовый переход, сопровождаемый нарушением симметрии относительно инверсии времени и появлением энергетической щели в спектре элементарных возбуждений  $d$ -сверхпроводников. Такой переход, вызванный границами зерен, двойниковыми границами или магнитными примесями, был рассмотрен в ряде работ, смотри, например, [1-4] и ссылки в них. Иному подходу, а именно исследованию возможности такого перехода в объеме беспримесного сверхпроводника, посвящены работы [5-9]. В частности, в работе автора [9] был рассмотрен фазовый переход из  $s$ - в  $(s + id)$ -состояние в модели с цилиндрической поверхностью Ферми. Здесь будет рассмотрена несколько более сложная модель сильно связанных электронов на квадратной решетке с дисперсионной зависимостью их энергии от квазиимпульса:

$$\xi(\mathbf{q}) = -\frac{1}{2}(\cos q_x + \cos q_y). \quad (1)$$

Мы учли возможность перескока электронов лишь на соседний узел решетки, отсчет энергии ведется от середины зоны, где находится особенность ван Хова, за единицу энергии принята полуширина зоны, за единицу длины — постоянная решетки.

Мы будем считать, что взаимодействуют лишь электроны, находящиеся на одном и том же узле или соседних и следующими за соседними узлах, с соответствующими потенциалами  $-u_0$ ,  $-u_1$  и  $-u_2$ . Тогда потенциал БКШ имеет вид

$$U(\mathbf{q}, \mathbf{q}') = u_0 + 2u_1 [\cos(q_x - q'_x) + \cos(q_y - q'_y)] + 2u_2 [\cos(q_x + q_y - q'_x - q'_y) + \cos(q_x - q_y - q'_x + q'_y)]. \quad (2)$$

Далее полагаем, что кулоновское отталкивание электронов, расположенных на одном и том же узле, столь велико, что сверхпроводящее  $s$ -состояние не реализуется, по крайней мере, при разумных температурах. Тогда часть потенциала БКШ,

<sup>1)</sup> e-mail: shap@mics.msu.su и/или shapoval@kapitza.ras.ru

ответственная за синглетное спаривание в  $d_{x^2-y^2}$ - и  $d_{xy}$ -состояниях, равна

$$U(\mathbf{q}, \mathbf{q}') = u_1 \psi_{x^2-y^2}(\mathbf{q}) \psi_{x^2-y^2}(\mathbf{q}') + u_2 \psi_{xy}(\mathbf{q}) \psi_{xy}(\mathbf{q}'), \quad (3)$$

где

$$\psi_{x^2-y^2}(\mathbf{q}) = \cos q_x - \cos q_y, \quad \psi_{xy}(\mathbf{q}) = 4 \sin q_x \sin q_y. \quad (4)$$

Удобно ввести параметрическое описание состояния электронов через их энергию  $\xi$  и положение на изоэнергетической поверхности (в частности, поверхности Ферми)  $\theta$ :

$$\cos q_x = -\xi + (1 - |\xi|) \cos \theta; \quad \cos q_y = -\xi - (1 - |\xi|) \cos \theta. \quad (5)$$

Если  $\xi \leq 0$ , то параметр  $\theta$  совпадает с удвоенным азимутальным углом  $\phi$  волнового вектора  $\mathbf{q}$ , когда  $\phi = 0, \pm\pi/4, \pm\pi/2, \dots$

В новых переменных интегрирование по электронным состояниям зоны Бриллюэна имеет вид

$$\int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dq_x dq_y}{(2\pi)^2} f(q_x, q_y) = \int_{-1}^1 d\xi \nu(\xi) \langle f(\xi, \theta) \rangle, \quad (6)$$

где угловые скобки означают усреднение по изоэнергетической поверхности:

$$\langle f(\xi, \theta) \rangle = \frac{1}{\pi K(k)} \int_0^{\pi} \frac{f(\xi, \theta) d\theta}{\sqrt{1 - k^2 \cos^2 \theta}}, \quad (7)$$

$K(k)$  – полный эллиптический интеграл первого рода,  $k = (1 - |\xi|)/(1 + |\xi|)$ , плотность состояний

$$\nu(\xi) = \frac{4}{\pi^2(1 + |\xi|)} K(k) = \frac{2}{\pi^2} K'(\xi). \quad (8)$$

В новых переменных

$$\psi_{x^2-y^2}(\xi, \theta) = -2(1 - |\xi|) \cos \theta; \quad \psi_{xy}(\xi, \theta) = 2(1 - \xi^2) \sin \theta \sqrt{1 - k^2 \cos^2 \theta}. \quad (9)$$

Так как в силу (3) ядро интегрального уравнения, определяющего сверхпроводящее состояние, вырождено, можно разложить параметр порядка по функциям  $\psi_{x^2-y^2}(\xi, \theta)$  и  $\psi_{xy}(\xi, \theta)$ . Учитывая их ортогональность, можно сразу написать:

$$\Delta(\xi, \theta) = \Delta_{x^2-y^2} \psi_{x^2-y^2}(\xi, \theta) \pm i \Delta_{xy} \psi_{xy}(\xi, \theta), \quad (10)$$

где  $\Delta_{x^2-y^2}$  и  $\Delta_{xy}$  действительны. Утверждение, что в смешанном состоянии относительная фаза двух компонент параметра порядка, описываемых ортогональными функциями, равна  $\pm\pi/2$ , было доказано в работе [10]. Можно показать, что в случае, когда три или более состояний конкурируют, система выбирает из них пару ортогональных состояний с относительной фазой  $\pm\pi/2$ , наиболее выгодную с точки зрения свободной энергии.

Смешанные состояния, когда обе компоненты параметра порядка отличны от нуля, описываются системой уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{u_1}{2} \int_{-1}^1 \nu(\xi) \left\langle \frac{\psi_{x^2-y^2}^2}{\epsilon(\xi, \mu, \theta)} \operatorname{th} \frac{\epsilon(\xi, \mu, \theta)}{2T} \right\rangle d\xi &= 1, \\ \frac{u_2}{2} \int_{-1}^1 \nu(\xi) \left\langle \frac{\psi_{xy}^2}{\epsilon(\xi, \mu, \theta)} \operatorname{th} \frac{\epsilon(\xi, \mu, \theta)}{2T} \right\rangle d\xi &= 1, \end{aligned} \quad (11)$$

где энергия элементарных возбудений

$$\epsilon(\xi, \mu, \theta) = \sqrt{(\xi - \mu)^2 + \Delta_{x^2-y^2}^2 \psi_{x^2-y^2}^2(\xi, \theta) + \Delta_{xy}^2 \psi_{xy}^2(\xi, \theta)}. \quad (12)$$

Следуя работам [5,11], мы не вводим обычного в методе БКШ параметра обрезания энергии взаимодействия электронов (аналога энергии Дебая в теории обычных сверхпроводников). Здесь логарифмическая расходимость устраняется за счет конечной ширины проводящей зоны. Полученные ниже результаты мало изменятся от введения такого дополнительного параметра, если ниже считать единицей измерения температуры и энергетической щели не полуширину зоны, а параметр обрезания.

"Чистые" сверхпроводящие  $d_{x^2-y^2}$ - и  $d_{xy}$ -состояния, когда отлична от нуля лишь одна из компонент параметра порядка, определяются соответственно первым или вторым уравнением системы (11). Границы смешанной и чистых фаз определяются из этой системы, когда одна из компонент обращается в нуль.

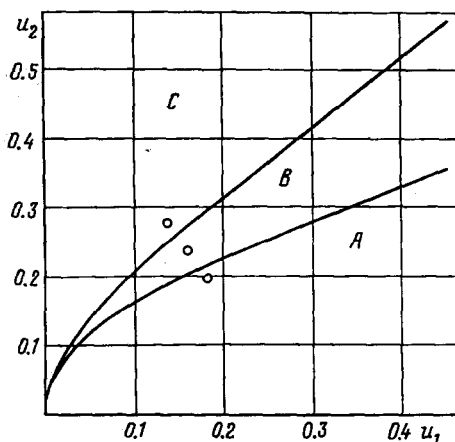


Рис.1. Области потенциалов взаимодействия с различным поведением рассматриваемой модели

Оказывается, что рассматриваемая модель ведет себя различным образом в зависимости от соотношения потенциалов притяжения  $u_1$  и  $u_2$ . На рис.1 показаны три соответствующие области (A, B и C) значений этих потенциалов (в единицах полуширины проводящей зоны), точками указаны те конкретные значения этих потенциалов, которые были использованы при построении фазовых диаграмм, изображенных на рис.2.

На рис.2а показана типичная фазовая диаграмма рассматриваемой модели в переменных температуры  $T$  и химпотенциала  $\mu$  в области A в частном случае, когда  $u_1 = 0.18$  и  $u_2 = 0.2$ . Такое значение  $u_1$  общепринято, в частности, для соединения  $\text{LaSrCuO}_4$  на основе данных о его температуре сверхпроводящего перехода и ширине проводящей зоны [5,8]. Учитывая быстрый спад экранированного кулоновского отталкивания и предполагая сравнительно медленный спад взаимодействия, ответственного за куперовское спаривание, мы полагаем, что в некоторых соединениях  $u_2$  может оказаться больше, чем  $u_1$ . На рис.2 показаны лишь половины диаграмм, так как в силу симметрии задачи относительно изменения знака энергии полные диаграммы симметричны относительно  $\mu = 0$ . Область 1 на этих диаграммах —  $d_{x^2-y^2}$ -фаза, область 2 —  $d_{xy}$ -фаза, область 3 — смешанная ( $d_{x^2-y^2} \pm id_{xy}$ )-фаза, область

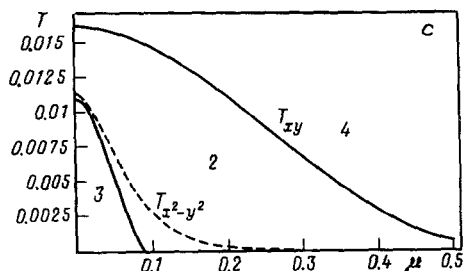
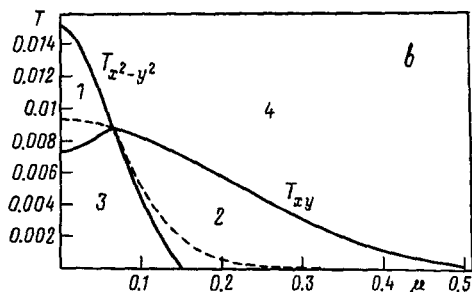
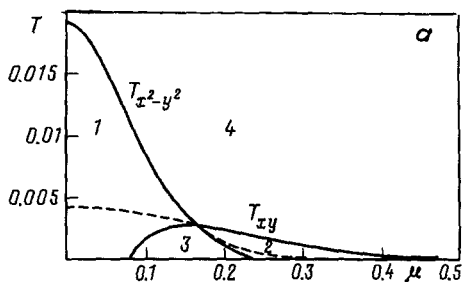


Рис.2. Фазовые диаграммы: а - в области А при  $u_1 = 0.18, u_2 = 0.2$ ; б - в области В при  $u_1 = 0.16, u_2 = 0.14$ ; с - в области С при  $u_1 = 0.14, u_2 = 0.28$ . Область 1 -  $d_{x^2-y^2}$ -фаза, 2 -  $d_{xy}$ -фаза, 3 - смешанная ( $d_{x^2-y^2} \pm id_{xy}$ )-фаза, 4 - нормальное состояние

4 - нормальная фаза, кривые  $T_{x^2-y^2}$  и  $T_{xy}$  - температуры перехода из нормального в соответствующее сверхпроводящее состояние, штриховые кривые - их продолжение в отсутствие другого взаимодействия. При увеличении  $u_2$  или уменьшении  $u_1$  точка пересечения кривых сдвигается вправо и вверх, то есть соответствующий химпотенциал приближается к нулю, а температура, при которой может появиться смешанное ( $d_{x^2-y^2} \pm id_{xy}$ )-состояние, повышается. Обратная картина наблюдается при уменьшении  $u_2$  или увеличении  $u_1$ . Основная особенность области А на рис.1 - отсутствие фазового перехода в смешанное состояние для полузаполненной зоны, когда  $\mu = 0$ , а температура сверхпроводящего перехода максимальна.

Фазовую диаграмму модели в области В значений потенциалов взаимодействия иллюстрирует рис.2б, когда  $u_1 = 0.16$ , а  $u_2 = 0.24$ . Смысл обозначений здесь тот же, что и на рис.2а. Характерная особенность этой области - фазовый переход в смешанное ( $d_{x^2-y^2} \pm id_{xy}$ )-состояние при химпотенциале  $\mu = 0$ , то есть при максимальной для модели температуре сверхпроводящего перехода.

Типичная фазовая диаграмма для области С, когда  $u_1 = 0.14$ , а  $u_2 = 0.28$ , показана на рис.2с. В этом случае, при  $\mu = 0$ , модель с понижением температуры прежде обязательного при любых положительных  $u_1$  перехода в смешанное состояние переходит из нормального в  $d_{xy}$ -состояние.

Из сказанного следует, что граница областей А и В на рис.1 определяется уравнением  $T^*(u_1, u_2) = 0$  при  $\mu = 0$ , где  $T^*$  - температура перехода в смешанное состояние, а граница областей В и С - уравнением  $T_{x^2-y^2}(u_1) = T_{xy}(u_2)$ .

На рис.3 показана зависимость относительных компонент параметра порядка  $\Delta_{x^2-y^2}/\Delta_0$  и  $\Delta_{xy}/\Delta_0$  от относительной температуры  $T/T_c$  при  $u_1 = 0.16, u_2 = 0.24$  (то есть в области В), и химпотенциале  $\mu = 0$  (то есть полузаполненной зоне). Здесь  $T_c = T_{x^2-y^2} = 0.0151$ , а  $\Delta_0 = 0.0158$  - параметр порядка в "чистом"  $d_{x^2-y^2}$ -

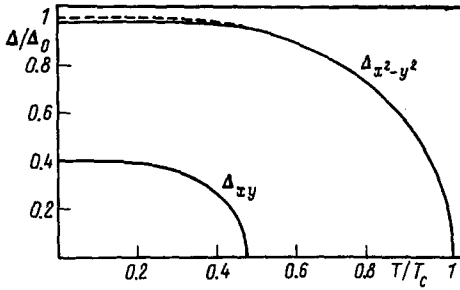


Рис.3. Температурная зависимость компонент параметра порядка при  $u_1 = 0.18, u_2 = 0.2, \mu = 0$ . Штриховой кривой показана температурная зависимость  $\Delta_{x^2-y^2}$  в "чистом"  $d_{x^2-y^2}$ -состоянии

состоянии при данном  $u_1$  и  $T = 0$ . Температура перехода в смешанное состояние  $T^* = 0.00729 = 0.484T_c$ . Штриховая кривая — продолжение температурной зависимости относительного параметра порядка при отсутствии перехода в смешанное состояние. Штриховой кривой показана температурная зависимость  $\Delta_{x^2-y^2}$  в "чистом"  $d_{x^2-y^2}$ -состоянии. Аналогично ведут себя компоненты параметра порядка и при других значениях хипотенциала, соответствующие температуры сверхпроводящего перехода и перехода в смешанное состояние можно определить из фазовых диаграмм на рис.2.

Обратим внимание, что в отличие от рассмотренного в [9] перехода из  $d$ - в  $(d \pm is)$ -состояние, в рассматриваемом случае  $d_{x^2-y^2}$ -компонента параметра порядка слабо отклоняется от своего значения в отсутствие перехода в смешанное состояние. Тем не менее, и здесь такой переход сопровождается появлением и быстрым ростом, как  $\sqrt{T^* - T}$ , щели в спектре элементарных возбуждений. Поэтому для идентификации перехода необходимо исследовать угловую зависимость энергетической щели. Нам кажется, что из-за сильного кулоновского отталкивания переход в  $(d_{x^2-y^2} \pm id_{xy})$ -состояние более вероятен, чем переход в  $(d \pm is)$ -состояние. В частности, известный результат Ма с сотрудниками [12], скачкообразное изменение симметрии при  $T^* \approx 0.8T_c$ , вполне вероятно может относиться к рассмотренному здесь переходу.

Работа поддерживается Научным советом направления "Сверхпроводимость" ГНТП "Актуальные направления физики конденсированных сред" и выполнена в Центре физических исследований им. П.Н.Лебедева в рамках проекта 96024.

1. M.Sigrist, K.Kuboko, P.A.Lee et al., Phys. Rev. B **53**, 2835 (1996).
2. G.E.Volovik, Письма в ЖЭТФ **66**, 492 (1997).
3. R.B.Laughlin, preprint, cond-mat/9709004.
4. A.V.Balatsky, preprint, cond-mat/9709287.
5. C.O'Donovan and J.P.Cabotte, Phys. Rev. B **52**, 16208 (1995); Physica C **252**, 87 (1995).
6. K.A.Musaelian, J.Betouras, A.V.Chubikov, and R.Joynt, Phys. Rev. B **53**, 3598 (1996).
7. Yong Ren, Ji-Hai Xu, and C.S.Ting, Phys. Rev. B **53**, 2249 (1996).
8. D.M.News, C.C. Tsuei, and P.C.Pattnaik, Phys. Rev. B **52**, 13611 (1995).
9. Е.А.Шаповал, Письма в ЖЭТФ **64**, 570 (1996); Physica C **282-287**, 1655 (1997).
10. Э.В.Горбар, В.М.Локтев, В.С.Николаев, СФХТ **7**, 1 (1994).
11. R.Micnas, J.Ranninger, and S.Robaszkiewicz, Rev. Mod. Phys. **62**, 113 (1990).
12. J.Ma, C.Quitmann, R.J.Kelley et al., Science **267**, 862 (1995).