

УДК 537.9

УСЛОВИЯ РЕАЛИЗАЦИИ СВЕРХПРОВОДЯЩЕЙ ФАЗЫ ОКСИДОВ МЕДИ ПРИ УЧЕТЕ ТРЕХЦЕНТРОВЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ И СПИНОВЫХ ФЛУКТУАЦИЙ

© 2007 г. В. В. Вальков^{1,2,3}, А. А. Головня¹

E-mail: vvv@iph.krasn.ru

В рамках $t - t' - t'' - J^*$ -модели, учитывающей трехцентровые взаимодействия, рассчитана концентрационная зависимость температуры перехода в сверхпроводящую фазу. Показано, что процессы рассеяния на спиновых флуктуациях качественно меняют характер концентрационных зависимостей $T_c(n)$. Эти же процессы рассеяния в нормальной фазе существенно модифицируют функцию распределения хаббардовских фермионов, обусловливая ярко выраженное неферми-жидкостное поведение системы.

Развитие микроскопической теории высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) для медно-оксидных соединений часто происходит в рамках модельных гамильтонианов, отражающих наличие в системе сильных электронных корреляций (СЭК). Этим объясняется высокая популярность модели Хаббарда. После работы Андерсона повышенный интерес вызывает, так называемая, $t - J$ -модель, способная, как известно, описать обменный и спин-флуктуационный механизм синглетного спаривания электронов с $d_{x^2-y^2}$ -типом симметрии параметра порядка [1]. Было показано, что трехцентровые взаимодействия $H_{(3)}$ оказывают существенное влияние на условия формирования сверхпроводящей d -фазы [2], поэтому в последнее время предпочтение стали отдавать $t - J^*$ -модели, учитывающей $H_{(3)}$.

Описание сверхпроводящей фазы проводится несколькими методами. Один из них связан с использованием графической формы теории возмущений для мацубаровских функций в атомном представлении. В этом случае сильные внутриатомные взаимодействия включаются в гамильтониан нулевого приближения, а в качестве оператора возмущения выступают межатомные взаимодействия и перескоки. Второй метод заключается в применении неприводимых функций Грина (ФГ), построенных на операторах Хаббарда. В основе первого подхода лежит диаграммная техника для операторов Хаббарда (ДТХ) [3–5]. В рамках отмеченных подходов структура уравнений для сверхпроводящей фазы качественно аналогична структуре соответствующих уравнений теории БКШ.

¹ Институт физики СО РАН, Красноярск.

² Красноярский государственный университет.

³ Красноярский государственный технический университет.

Построение теории сверхпроводящей фазы на основе диаграммной техники обычно связывается с введением класса диаграмм, соответствующих аномальным компонентам массового оператора $\Sigma_{0\sigma, \bar{0}0}(\vec{k})$. Однако в идеологии атомного представления, когда используется ДТХ, имеет место важная особенность, обусловленная наличием концептуальных диаграмм. Их полная совокупность формирует силовой оператор. В работе показано, что при описании сверхпроводящей фазы методом ДТХ в диаграммном ряду возникают аномальные концептуальные диаграммы для аномальных компонент силового оператора $P_{0\sigma, \bar{0}0}(\vec{k}, i\omega_n)$. До недавнего времени это обстоятельство не учитывалось при описании сверхпроводящей фазы. В этой связи представлялось актуальным исследовать влияния аномальных компонент силового оператора на условия реализации сверхпроводящей фазы с различной симметрией параметра порядка в системах с СЭК.

В работе для $t - t' - t'' - J^*$ -модели при учете аномальных компонент массового и силового операторов получено точное представление для матричной одночастичной функции Грина. В однопетлевом приближении вычислены все аналитические вклады для нормальных ($\Sigma_{0\sigma, 0\sigma}^{(1)}(\vec{k}), P_{0\sigma, 0\sigma}^{(1)}(\vec{k}, i\omega_n)$) и аномальных компонент ($\Sigma_{0\sigma, \bar{0}0}^{(1)}(\vec{k}), P_{0\sigma, \bar{0}0}^{(1)}(\vec{k}, i\omega_n)$) массового и силового операторов. Зависимость компонент силового оператора от мацубаровских частот привела к тому, что сверхпроводящая фаза стала описываться бесконечной системой интегральных уравнений:

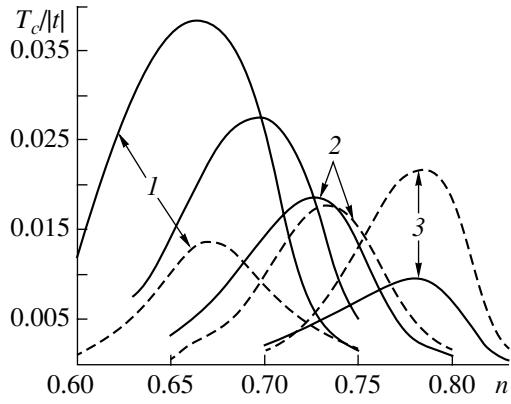


Рис. 1. Концентрационные зависимости критической температуры T_c для $d_{x^2-y^2}$ -типа симметрии параметра порядка (сплошными линиями указаны кривые с учетом аномальных компонент силового оператора, пунктиром – без учета).

$$\Sigma_{12}(\vec{k}) = -\frac{T}{N} \sum_{\vec{q}, \omega_l} A_{\vec{k}}(\vec{q}) \frac{2\Sigma_{12}(\vec{q}) - t_q P(\vec{q}, i\omega_l)}{\det(\vec{q}, i\omega_l)},$$

$$P(\vec{k}, i\omega_m) = -\frac{\beta}{N} \sum_{\vec{q}} B_{\vec{k}}(\vec{q}) \frac{2\Sigma_{12}(\vec{q}) - t_q P(\vec{q}, i\omega_m)}{\det(\vec{q}, i\omega_m)},$$

где

$$B_{\vec{k}}(\vec{q}) = t_{\vec{q}} + \frac{1}{2} \left(1 + \frac{n}{2}\right) J_{\vec{k}-\vec{q}} + \left(1 - \frac{n}{2}\right) \frac{t_{\vec{k}} t_{\vec{q}}}{U} - \frac{n}{2} \left(\frac{t_{\vec{q}}^2}{U} - \frac{J_0}{2}\right),$$

$$A_{\vec{k}}(\vec{q}) = t_{\vec{q}} + \frac{n}{2} J_{\vec{k}-\vec{q}} + 2 \left(1 - \frac{n}{2}\right) \frac{t_{\vec{k}} t_{\vec{q}}}{U} - n \left(\frac{t_{\vec{q}}^2}{U} - \frac{J_0}{2}\right),$$

$$\beta = (3\chi T - C_n/4),$$

$$\det(\vec{k}) = [i\omega_m + \varepsilon - \mu + t_{\vec{k}} P_{22}(k) - \Sigma_{22}(k)] \times \\ \times [i\omega_m - \varepsilon + \mu - t_{\vec{k}} P_{11}(k) - \Sigma_{11}(k)] - \\ - [\Sigma_{12}(k) - t_{\vec{k}} P_{12}(k)][\Sigma_{21}(k) + t_{\vec{k}} P_{21}(k)].$$

Анализ этой системы проведен при учете перескоков между узлами, находящимися в пределах трех координационных сфер (параметры перескока t , t' и t''). При выводе уравнения, определяющего влияние трехцентровых взаимодействий на концентрационную зависимость $T_c(n)$, отмеченная бесконечная система интегральных уравнений решена точно.

На рис. 1 показано влияние аномальных компонент силового оператора на условия реализации сверхпроводящей фазы. Представленные графики отражают результаты численного расчета зависимости температуры перехода T_c в сверхпроводящее состояние с типом симметрии параметра порядка от концентрации n электронов. Графики, по-

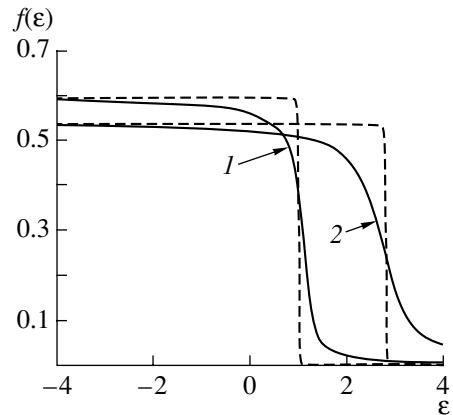


Рис. 2. Функции распределения хаббардовских фермионов (сплошными линиями указаны кривые с учетом однопетлевых поправок к нормальным компонентам силового оператора, пунктиром – без учета).

казанные сплошными линиями, получены при учете аномальных компонент силового оператора $P_{0\sigma, \bar{\sigma}0}(\vec{k}, i\omega_n)$. Пунктирные линии соответствуют результатам, полученным без учета $P_{0\sigma, \bar{\sigma}0}(\vec{k}, i\omega_n)$. Во всех случаях $t' = 0.2|t|$, а $t'' = 0.1|t|, 0.2|t|, 0.3|t|$ для графиков, помеченных цифрами 1, 2 и 3 соответственно; сплошная линия без номера – это $t'' = 0.15|t|$. Видно, что без $P_{0\sigma, \bar{\sigma}0}(\vec{k}, i\omega_n)$ увеличение параметра t'' приводит к смещению максимума в зависимости $T_c(n)$ в сторону больших n и увеличению максимального значения критической температуры. Если же теория сверхпроводящей фазы строится при учете аномальной компоненты силового оператора, то возникает качественно иная ситуация. При малых значениях параметра t'' включение $P_{0\sigma, \bar{\sigma}0}(\vec{k}, i\omega_n)$ приводит к значительному возрастанию T_c . С ростом t'' максимальное значение быстро падает, т.е. имеет место качественно противоположная, по сравнению с предыдущим случаем, картина влияния t'' на область реализации сверхпроводящей фазы.

На рис. 2 проиллюстрировано неферми-жидкостное поведение рассматриваемой системы сильно коррелированных электронов, возникающее при учете нормальных компонент силового оператора. Представленные графики отражают зависимости функции распределения хаббардовских фермионов $f(\varepsilon)$ от их энергии ε , измеренной в единицах $|t|$, при двух значениях концентрации носителей тока: $n = 0.83$ (кривая 1), $n = 0.91$ (кривая 2). Расчеты проводили в однопетлевом приближении, выходящем за рамки приближения Хаббард-І. Так как в рассмотренной теории силовой оператор становится зависящим от мацубаровской частоты ω_n ,

функция распределения находилась при самосогласованном решении интегрального уравнения для $P_{0\sigma,0\sigma}(\vec{k}, i\omega_n)$, при каждом значении мацубаровской частоты, а также при выполнимости уравнения на химпотенциал. Видно, что при учете вкладов от $P_{0\sigma,0\sigma}(\vec{k}, i\omega_n)$, функция $f(\varepsilon)$ становится сильно размытой (в приближении Хаббард-І получались обычные “ферми-ступеньки” – пунктирные линии), несмотря на то, что температура системы существенно меньше энергии Ферми.

Работа выполнена при поддержке Программы Президиума РАН “Квантовая макрофизи-

ка”, РФФИ (грант № 06-02-16100), Интеграционного проекта СО РАН и Лаврентьевского конкурса СО РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Изюмов Ю.А. // Успехи физ. наук. 1997. Т. 167. Вып. 5. С. 465.
2. Вальков В.В., Дзебисашвили Д.М. // ЖЭТФ. 2005. Т. 127. С. 686.
3. Зайцев Р.О. // ЖЭТФ. 1975. Т. 41. С. 100.
4. Зайцев Р.О. // ЖЭТФ. 1976. Т. 43. С. 574.
5. Овчинников С.Г., Вальков В.В. // Квазичастицы в сильно коррелированных системах. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2001.