

МЕХАНИЗМ КОНА – ЛАТТИНЖЕРА И ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО СОСТОЯНИЯ В МОДЕЛИ ШУБИНА – ВОНСОВСКОГО

М. Ю. Каган^{a,}, В. В. Вальков^{b,c}, В. А. Мицкан^{b,c}, М. М. Коровушкин^{b,c}*

^a *Институт физических проблем им. П. Л. Капицы Российской академии наук
119334, Москва, Россия*

^b *Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук
660036, Красноярск, Россия*

^c *Сибирский государственный аэрокосмический университет им. М. Ф. Решетнёва
660014, Красноярск, Россия*

Поступила в редакцию 27 марта 2013 г.

В рамках модели Шубина – Вонсовского для режима слабой связи $W > U > V$ (W — ширина зоны, U — хаббардовское отталкивание на узле, V — кулоновское взаимодействие на соседних узлах) на основе механизма Кона – Латтинжера определены области реализации сверхпроводящих фаз с d_{xy} -, p -, s - и $d_{x^2-y^2}$ -типами симметрии параметра порядка. Показано, что для эффективного взаимодействия в куперовском канале существенную роль играют не только одноузельные, но и межузельные кулоновские корреляции. Этот факт продемонстрирован на примере качественного изменения и усложнения фазовой диаграммы сверхпроводящего состояния. Вскрыт механизм индуцирования сверхпроводящей фазы при учете поляризационных вкладов во втором порядке теории возмущений по кулоновскому взаимодействию. Проведено сравнение полученных результатов по угловой зависимости сверхпроводящей щели в различных каналах с экспериментальными данными по фотоэмиссии с угловым разрешением (ARPES). Проанализировано влияние дальних перескоков на фазовую диаграмму и критическую температуру сверхпроводящего перехода в различных каналах. Определены условия возникновения сверхпроводимости Кона – Латтинжера с $d_{x^2-y^2}$ -типом симметрии и высокими значениями критической температуры $T_c \sim 100$ К вблизи половинного заполнения.

DOI: 10.7868/S0044451013100155

Интенсивные исследования сверхтекучести в ^3He и ультрахолодных квантовых ферми-газах, сверхпроводимости в купратах, тяжелофермионных интерметаллидах, полуметаллах и сверхрешетках стимулировали интерес к нетрадиционным механизмам куперовского спаривания. Одним из наиболее популярных нефононных механизмов сверхпроводимости является механизм Кона – Латтинжера [1], предложенный в 1965 г. В работе [1] было показано, что благодаря наличию дальнедействующей составляющей в эффективном потенциале взаимодействия частиц через ферми-фон, любая трехмерная элек-

тронная система с затравочным отталкивательным взаимодействием между частицами является заведомо неустойчивой по отношению к переходу в сверхпроводящее состояние с большим орбитальным моментом относительного движения куперовской пары ($l \gg 1$).

Механизм Кона – Латтинжера тесно связан с Фриделевскими осцилляциями [2]. Хорошо известно, что из-за наличия резкой границы $2k_F$ в функции распределения электронной плотности в импульсном пространстве на уровне Ферми примесные потенциалы в металле не убывают монотонно, а испытывают осцилляции (осцилляции Фриделя [3]). Кон и Латтинжер показали [1], что подобные осцилляции возникают в эффективном электрон-электронном взаимодействии, приводя к притяжению между двумя электронами при усреднении

*E-mail: kagan@kapitza.ras.ru

по потенциальному рельефу из фриделевских максимумов и минимумов. Данное притяжение, в свою очередь, может привести к куперовской неустойчивости в канале с $l \neq 0$.

Однако проведенные в работе [1] оценки величины критической температуры для реалистичных параметров электронных систем в металле дали очень низкие значения критической температуры ($T_c \sim 10^{-16}$ К для ${}^3\text{He}$ и $T_c \sim 10^{-11}$ К для металлической плазмы при $l = 2$). Такая низкая величина T_c явилась одной из причин, по которой механизм Кона–Латтинжера не вызывал интереса у исследователей в течение достаточно долгого времени.

Позднее в работах [4–6] асимптотические результаты Кона и Латтинжера, полученные для больших значений орбитального момента $l \gg 1$, были обобщены на случай произвольного значения l , и, более того, было показано, что ферми-газ малой плотности с отталкиванием неустойчив относительно сверхпроводящего p -спаривания ($l = 1$) [4–6]. При этом обобщение подхода работ [4, 5] на случай сверхтекучего ${}^3\text{He}$ [7–11] и электронной плазмы в металлах [5, 12] привело к оценкам для критической температуры $T_c \sim 1$ мК в ${}^3\text{He}$ [5, 13] и $T_c \sim 10$ мК в сверхчистых металлах [12].

Кроме того, в работах [12, 14, 15] был получен ряд важных результатов, таких как каскадные сверхпроводящие переходы с различными значениями l в трехмерной плотной кулоновской плазме [12], сверхпроводимость в трехмерной и двумерной модели Хаббарда [16, 17] с малой плотностью электронов, а также аномальная сверхпроводимость в тяжелофермионных системах [18]. Наконец, в работах [19, 20] было показано, что в двумерных или в слоистых системах можно резко повысить критическую температуру сверхпроводящего p -спаривания уже при малой плотности носителей, рассматривая двухзонную или спин-поляризованную ситуацию. В этом случае можно ожидать сверхпроводящий переход в гетероструктурах и в слоистых материалах [14, 19, 20] (органические сверхпроводники, полуметаллы, сверхрешетки) в интервале температур $T_c = 1$ –5 К.

После появления отмеченных работ и в связи с открытием ВТСП-систем механизм Кона–Латтинжера привлек к себе значительное внимание как перспективный нефононный механизм сверхпроводимости в купратных оксидах. Поскольку экспериментальные данные указывали на то, что сверхпроводящий параметр порядка в данных соединениях соответствует $d_{x^2-y^2}$ -типу симметрии, в рамках отмеченного механизма активно изучалась конкуренция различных типов симметрии параметра порядка на

фазовой диаграмме модели Хаббарда [21], близкой к половинному заполнению [22–26]. В настоящий момент популярность механизма Кона–Латтинжера продолжает нарастать в связи с возможностью его реализации и в других актуальных физических системах. Например, недавно обсуждался вопрос об условиях его возникновения в легированном графене [27, 28], а также в связи с изучением топологических сверхтекучих жидкостей [29].

Недавно в работе [30] был поднят вопрос о роли совместного влияния одноузельного U и межузельного V кулоновского взаимодействия на сверхпроводимость в купратах в рамках механизма Кона–Латтинжера. Возрастание интереса к проблеме учета дальних межузельных кулоновских корреляций при описании фазовой диаграммы слаболегированных мотт-хаббардовских систем [31], привело к значительной популярности расширенной модели Хаббарда, включающей взаимодействие электронов, находящихся на разных узлах кристаллической решетки (в отечественной литературе такая модель обычно называется моделью Шубина–Вонсовского [32, 33]). Эта модель активно использовалась при исследовании полярных состояний в твердом теле [34], перехода металл–диэлектрик [35], а также при изучении влияния межузельного кулоновского взаимодействия на сверхпроводящие свойства сильнокоррелированных систем [36–38].

В работе [39] на основе этой модели была построена фазовая диаграмма в рамках механизма Кона–Латтинжера, наглядно отражающая результат конкуренции сверхпроводящих фаз с различными типами симметрии параметра порядка. При расчетах эффективной константы связи в аналитических выражениях для диаграмм Кона–Латтинжера учитывались только вклады порядка U^2 , а энергетический спектр электронов определялся приближением ближайших соседей. Эти ограничения привели к значительному упрощению фазовой диаграммы сверхпроводящего состояния.

Как уже отмечалось, механизм неустойчивости Кона–Латтинжера связан с фриделевскими осцилляциями, которые индуцируются процессами второго порядка по затравочному взаимодействию. При этом возможность реализации сверхпроводящего состояния определяется матричными элементами разложения эффективного взаимодействия электронов в куперовском канале по базисным функциям неприводимых представлений двумерной квадратной решетки. Следовательно, учет слагаемых порядка V^2 из-за усложнения импульсной зависимости может инициировать вклады тех представлений, которые

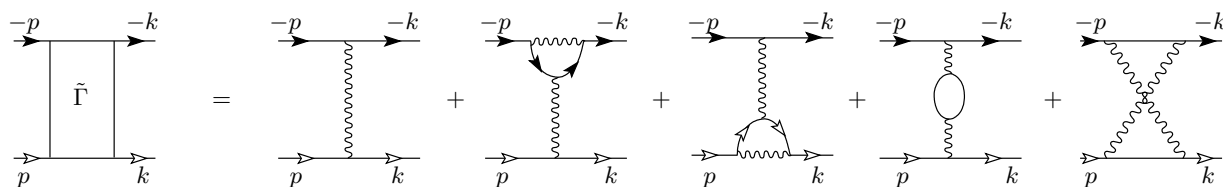


Рис. 1. Диаграммы первого и второго порядков для эффективного взаимодействия. Сплошной линии со светлой (темной) стрелкой соответствуют функции Грина электронов с проекцией спина 1/2 (−1/2). Волнистые линии отражают затравочное взаимодействие

в пренебрежении таким учетом давали бы относительно малый вклад или вовсе отсутствовали. Это делает актуальным исследование условий реализации неустойчивости Кона–Латтинжера при учете вкладов второго порядка по межузельному кулоновскому взаимодействию. Поскольку интерференционные эффекты, обусловленные пространственной разнесенностью взаимодействующих электронов, влияют как на эффективную константу связи для конкретного типа симметрии параметра порядка, так и на коэффициенты, определяющие набор базисных функций неприводимого представления, становится важным учет взаимодействия электронов, находящихся друг от друга на расстояниях, соответствующих не только первой, но и второй координационной сфере. Одновременно с этим, при моделировании энергетического спектра электронов существенным становится и выход за рамки приближения ближайших соседей. Это связано с тем, что главный вклад в эффективную константу связи набирается от взаимодействия электронов, находящихся вблизи поверхности Ферми, геометрия которой зависит от структуры энергетического спектра. В представлении Ванье эта структура определяется как числом учитываемых интегралов перескока, так и их относительной интенсивностью. Поэтому включение дальних перескоков может приводить к модификации фазовой диаграммы, определяющей области реализации сверхпроводящих состояний с различными типами симметрии параметра порядка.

Рассмотрению отмеченных эффектов посвящена данная работа. В ней для модели Шубина–Вонсовского куперовская неустойчивость исследуется в борновском приближении слабой связи $W > U > V$ (W — ширина зоны) при учете дальних перескоков, а также кулоновского взаимодействия электронов из первой и второй координационных сфер. Соответственно этому, при нахождении амплитуды рассеяния в куперовском канале в качестве эффективного взаимодействия двух электронов с противоположны-

ми значениями квазиимпульса и спина используется эффективное взаимодействие $\tilde{\Gamma}(p, k)$, которое в графической форме определяется суммой пяти диаграмм (рис. 1). Первый график на рисунке соответствует затравочному взаимодействию двух электронов в куперовском канале и в аналитическом виде определяется выражением $U + V_{\mathbf{p}-\mathbf{k}}$. Следующие четыре диаграммы (диаграммы Кона–Латтинжера) происходят от процессов рассеяния второго порядка и учитывают поляризационные эффекты заполненной ферми-сферы. Видно, что во втором порядке эффективное взаимодействие для двух электронов в куперовском канале формируется за счет процессов, в которых участвуют также и электроны, имеющие одинаковые проекции спиновых моментов. Интенсивность таких процессов зависит только от межузельного кулоновского взаимодействия.

В работе показано, что учет дальних кулоновских корреляций и дальних электронных перескоков существенно влияет на условия реализации куперовского спаривания с s -, p - и d -типами симметрии параметра порядка и обеспечивает, в частности, возможность реализации $d_{x^2-y^2}$ -спаривания в довольно широких интервалах плотностей.

Изложение результатов в статье построено следующим образом. В разд. 2 обсуждается физика, лежащая в основе модели Шубина–Вонсовского, и основные приближения, в рамках которых исследуется механизм сверхпроводимости Кона–Латтинжера. В разд. 3 при учете вкладов от диаграмм Кона–Латтинжера до второго порядка теории возмущений включительно получено выражение для эффективного взаимодействия электронов в куперовском канале. Раздел 4 посвящен краткому изложению методики решения интегрального уравнения Бете–Солпитера на двумерной квадратной решетке, в которое входит ренормированное эффективное взаимодействие. В разд. 5 приводятся детали численного анализа рассматриваемой системы. В разд. 6 представлены результаты численных расче-

тов для сверхпроводящей фазовой диаграммы модели Шубина–Вонсовского, полученные при учете как дальних кулоновских взаимодействий во втором порядке теории возмущений, так и при включении дальних электронных перескоков. Проведено сравнение угловой зависимости параметра порядка для *s*-типа спаривания с результатами недавних экспериментов по фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением для одного из железосодержащих семейств сверхпроводников KFe_2As_2 . В заключительном разделе обсуждаются полученные результаты.

В однозонном приближении гамильтониан модели Шубина–Вонсовского для квадратной решетки записывается в виде

$$\hat{H}' = \sum_{f\sigma} (\varepsilon - \mu) c_{f\sigma}^\dagger c_{f\sigma} + \sum_{fm\sigma} t_{fm} c_{f\sigma}^\dagger c_{m\sigma} + U \sum_f \hat{n}_{f\uparrow} \hat{n}_{f\downarrow} + \frac{V_1}{2} \sum_{f\delta_1} \hat{n}_f \hat{n}_{f+\delta_1} + \frac{V_2}{2} \sum_{f\delta_2} \hat{n}_f \hat{n}_{f+\delta_2}, \quad (1)$$

где два первых слагаемых описывают ансамбль невзаимодействующих электронов в представлении Ванье; $c_{f\sigma}^\dagger$ ($c_{f\sigma}$) — оператор рождения (уничтожения) электрона на узле f с проекцией спина $\sigma = 1/2$; ε — одноузловая энергия электрона; μ — химический потенциал системы; t_{fm} — матричный элемент (интеграл перескока), соответствующий интенсивности процесса, когда электрон уничтожается на узле m и рождается на узле f . Третье слагаемое описывает одноузловое отталкивание электронов. посредством $\hat{n}_{f\sigma} = c_{f\sigma}^\dagger c_{f\sigma}$ обозначен оператор плотности числа электронов на узле f с проекцией спина σ , а $\hat{n}_f = \hat{n}_{f\uparrow} + \hat{n}_{f\downarrow}$ — оператор полной плотности электронов на узле f . Четвертое слагаемое гамильтониана соответствует учету энергии V_1 кулоновского взаимодействия электронов, находящихся на ближайших узлах f и $f + \delta_1$. Наконец, последнее слагаемое гамильтониана учитывает взаимодействие электронов, находящихся на узлах, следующих за ближайшими. Энергия такого взаимодействия задается параметром V_2 .

В совокупности три последних слагаемых гамильтониана (1) отражают тот факт, что в рассматриваемых системах радиус экранирования составляет единицы параметра элементарной ячейки [35].

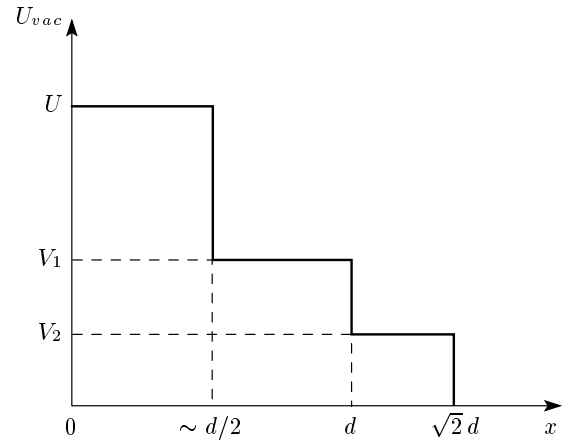


Рис. 2. Затравочное взаимодействие в модели Шубина–Вонсовского с хаббардовским отталкиванием U и дополнительным кулоновским отталкиванием V_1 и V_2 электронов, находящихся на ближайших и на следующих за ближайшими узлах

В модели Шубина–Вонсовского межузельное кулоновское взаимодействие учитывается в пределах небольшого числа координационных сфер. Затравочное взаимодействие U_{vac} в этой модели качественно изображено на рис. 2. Существенно, что фурье-образ затравочного потенциала $U_{vac}(\mathbf{q}) = U + V_{\mathbf{q}}$, где

$$V_{\mathbf{q}} = 2V_1 (\cos q_x d + \cos q_y d) + 4V_2 \cos q_x d \cos q_y d,$$

\mathbf{q} — переданный импульс, d — расстояние между узлами. Отметим, что только в области $\mathbf{q} \cdot \mathbf{d} \ll 1$ потенциал $U_{vac}(\mathbf{q})$ характеризуется квадратичной по квазиимпульсу зависимостью. За ее пределами становится важным тот факт, что импульсная зависимость $V_{\mathbf{q}}$ определяется периодическими функциями. В результате поведение потенциала $U_{vac}(\mathbf{q})$ значительно модифицируется по сравнению с импульсной зависимостью фурье-образа потенциала Юкавы. Эти факторы существенно сказываются на условиях реализации куперовской неустойчивости при больших значениях плотности электронов, когда поверхности Ферми не обладают сферической симметрией. Поэтому следует ожидать, что условия реализации сверхпроводящего спаривания в рамках механизма Кона–Латтинжера будут определяться не только динамическими эффектами, обусловленными кулоновскими взаимодействиями, но и влиянием зоны Бриллюэна.

Переходя к квазиимпульсному представлению, получим

$$\hat{H}' = \sum_{\mathbf{p}\sigma} (\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu) c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{p}\sigma} + U \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'\mathbf{q}} c_{\mathbf{p}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\downarrow} c_{\mathbf{p}'\uparrow} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'\mathbf{q}\sigma\sigma'} V_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'} c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\sigma'} c_{\mathbf{p}'\sigma}, \quad (2)$$

где затравочный спектр электронов с учетом дальних перескоков, интенсивность которых определяется параметрами t_2 и t_3 , описывается выражением

$$\varepsilon_{\mathbf{p}} = 2t_1(\cos p_x d + \cos p_y d) + 4t_2 \cos p_x d \cos p_y d + 2t_3(\cos 2p_x d + \cos 2p_y d). \quad (3)$$

Использование отмеченного выше борновского приближения слабой связи позволяет при вычислении эффективного взаимодействия для куперовского канала ограничиться диаграммами не выше второго порядка по затравочному взаимодействию U_{vac} . При этом реальным малым параметром задачи является параметр

$$U_{vac}(q=0)\rho(\mu) < 1, \quad (4)$$

где $\rho(\mu)$ – плотность состояний на уровне Ферми. Отметим, что в предыдущей работе [31] мы рассматривали противоположный предел сильной связи $U > V > W$. В этом случае учет только диаграмм первого и второго порядков для эффективного взаимодействия $\tilde{\Gamma}$ является оправданным лишь в пределе малой электронной плотности $n \ll 1$, когда применимо ферми-газовое разложение Галицко–Блюма [40, 41]. В данной работе, как и в работе [31], мы вычисляем лишь главную экспоненту для T_c . Точные вычисления предэкспоненты требуют учета диаграмм третьего и четвертого порядков [15]. В то же время использование в настоящей работе борновского приближения дает возможность рассматривать произвольные электронные плотности $0 < n < 1$.

Поправка второго порядка для эффективного взаимодействия в куперовском канале, $\delta\tilde{\Gamma}(p, k)$, определяется четырьмя диаграммами Кона–Латтинжера, представленными на рис. 1. Наличие в диаграмме двух сплошных линий без стрелок подразумевает проведение суммирования по значению проекции спина. Рассеянию электронов с одинаковыми проекциями спина соответствует только межзельный вклад. Если взаимодействуют электроны с противоположными спинами, то амплитуда рассеяния определяется суммой хаббардовского и

межзельного взаимодействий. В случае только хаббардовского отталкивания первые три диаграммы Кона–Латтинжера взаимно сокращаются при суммировании по спину и поправка $\delta\tilde{\Gamma}(p, k)$ для эффективного взаимодействия определяется лишь последней обменной диаграммой [1, 4, 5]. При включении кулоновского отталкивания на соседних узлах вклад в ренормированную амплитуду дают все диаграммы на рис. 1.

Сопоставляя диаграммам, изображенным на рис. 1, аналитические выражения, находим поправку второго порядка для ренормированного взаимодействия:

$$\begin{aligned} \delta\tilde{\Gamma}^{(2)}(p, k) = & -T \sum_{\mathbf{p}_1, i\omega_l} (U + V_{\mathbf{p}-\mathbf{k}}) \times \\ & \times (V_{\mathbf{p}_1+\mathbf{p}} - 2V_{\mathbf{p}-\mathbf{k}} + V_{\mathbf{p}_1-\mathbf{k}}) \times \\ & \times G_0(\mathbf{p}_1, i\omega_l) G_0(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p} - \mathbf{k}, i\omega_l + i\omega_n - i\omega_m) - \\ & - T \sum_{\mathbf{p}_1, i\omega_l} (U + V_{\mathbf{p}_1-\mathbf{p}})(U + V_{\mathbf{p}_1-\mathbf{k}}) \times \\ & \times G_0(\mathbf{p}_1, i\omega_l) G_0(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p} - \mathbf{k}, i\omega_l - i\omega_n - i\omega_m). \quad (5) \end{aligned}$$

Выполняя суммирование по мадубаровским частотам, получаем

$$\tilde{\Gamma}(p, k) = U + V_{\mathbf{p}-\mathbf{k}} + \delta\tilde{\Gamma}(p, k), \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \delta\tilde{\Gamma}(p, k) = & \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}_1} (U + V_{\mathbf{p}-\mathbf{k}}) \times \\ & \times (2V_{\mathbf{p}-\mathbf{k}} - V_{\mathbf{p}_1+\mathbf{p}} - V_{\mathbf{p}_1-\mathbf{k}}) \times \\ & \times \frac{f(\varepsilon_{\mathbf{p}_1}) - f(\varepsilon_{\mathbf{p}_1+\mathbf{p}-\mathbf{k}})}{i\omega_n - i\omega_m + \varepsilon_{\mathbf{p}_1} - \varepsilon_{\mathbf{p}_1+\mathbf{p}-\mathbf{k}}} + \\ & + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}_1} (U + V_{\mathbf{p}_1-\mathbf{p}})(U + V_{\mathbf{p}_1-\mathbf{k}}) \times \\ & \times \frac{f(\varepsilon_{\mathbf{p}_1}) - f(\varepsilon_{\mathbf{p}_1-\mathbf{p}-\mathbf{k}})}{i\omega_n + i\omega_m - \varepsilon_{\mathbf{p}_1} + \varepsilon_{\mathbf{p}_1-\mathbf{p}-\mathbf{k}}}, \quad (7) \end{aligned}$$

где $f(x) = \{\exp[(x - \mu)/T] + 1\}^{-1}$ – функция Ферми–Дирака. В выражениях (5)–(7) вводятся 4-импульсы и мадубаровские частоты

$$p \equiv (\mathbf{p}, i\omega_n), \quad \omega_n = (2n + 1)\pi T, \quad n = 0, \pm 1, \dots,$$

$$k \equiv (\mathbf{k}, i\omega_m), \quad \omega_m = (2m + 1)\pi T, \quad m = 0, \pm 1, \dots$$

Знание ренормированного выражения для эффективного взаимодействия позволяет перейти к анализу условий реализации куперовской неустойчивости в рассматриваемой модели. Для решения этой

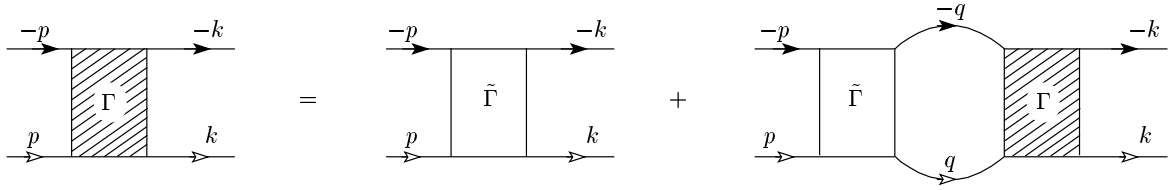


Рис. 3. Уравнение Бете–Солпитера для двух электронов в куперовском канале

задачи, как обычно, найдем полную амплитуду рассеяния $\Gamma(p, k)$ двух электронов с противоположными значениями импульсов и проекций спина (куперовская амплитуда) с энергиями, близкими к энергии Ферми. В лестничном приближении эта амплитуда удовлетворяет уравнению Бете–Солпитера, в котором в качестве «затравочного» взаимодействия выступает ренормированное взаимодействие (неприводимая вершина для куперовского канала) $\tilde{\Gamma}(p, k)$. Диаграммная форма этого уравнения показана на рис. 3. В аналитическом виде уравнение Бете–Солпитера записывается следующим образом:

$$\Gamma(p, k) = \tilde{\Gamma}(p, k) + \frac{T}{N} \sum_q \tilde{\Gamma}(p, q) \frac{\Gamma(q, k)}{\omega_q^2 + \xi_q^2}, \quad (8)$$

где $q \equiv (\mathbf{q}, \omega_q)$ и $\xi_q = \varepsilon_q - \mu$. При проведении суммирования по промежуточным мацубаровским частотам ω_q учтем, что в куперовском канале главный вклад в амплитуду рассеяния $\Gamma(p, k)$ набирается от рассеяния электронов, обладающих энергиями, близкими к энергии Ферми. Это позволяет в уравнении (8) пренебречь зависимостью $\tilde{\Gamma}$ от мацубаровской частоты. При этом полная амплитуда $\Gamma(p, k)$ также не зависит от мацубаровских частот и уравнение Бете–Солпитера упрощается:

$$\Gamma(\mathbf{p}, \mathbf{k}) = \tilde{\Gamma}(\mathbf{p}, \mathbf{k}) - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \tilde{\Gamma}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) L(\xi_{\mathbf{q}}) \Gamma(\mathbf{q}, \mathbf{k}), \quad (9)$$

где $L(\xi_{\mathbf{q}}) = \text{th}(\xi_{\mathbf{q}}/2T)/2\xi_{\mathbf{q}}$ — стандартное выражение для куперовской петли.

Известно [42], что возникновение куперовской неустойчивости можно обнаружить из анализа однородной части уравнения (9). При этом зависимость от импульса \mathbf{k} факторизуется, и ее можно не обсуждать. В результате возникает интегральное уравнение для величины $\Gamma(\mathbf{p}, \mathbf{k})$ или сверхпроводящей щели $\Delta(\mathbf{p})$. Переходя к интегрированию по изоэнергетическим контурам (двумерный случай), получим, что возможность куперовского спаривания определяется характеристиками энергетического спектра в окрестности уровня Ферми и ренормированным взаимодействием $\tilde{\Gamma}(\mathbf{p}, \mathbf{k})$ электронов,

находящихся вблизи поверхности Ферми $\varepsilon_{\mathbf{q}} = \mu$ [13, 16, 22, 24–26, 30]. В результате исследование куперовской неустойчивости сводится к решению задачи на собственные значения,

$$\frac{1}{(2\pi)^2} \oint_{\varepsilon_{\mathbf{q}}=\mu} \frac{d\hat{\mathbf{q}}}{v_F(\hat{\mathbf{q}})} \tilde{\Gamma}(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{q}}) \Delta(\hat{\mathbf{q}}) = \lambda \Delta(\hat{\mathbf{p}}), \quad (10)$$

в которой сверхпроводящий параметр порядка $\Delta(\hat{\mathbf{q}})$ выступает в роли собственного вектора, а для собственных значений выполняется соотношение $\lambda^{-1} \approx \ln(T_c/W)$. При этом квазиимпульсы $\hat{\mathbf{p}}$ и $\hat{\mathbf{q}}$ находятся на поверхности Ферми, и $v_F(\hat{\mathbf{q}})$ — скорость Ферми. Видно, что допустимые решения уравнения (10) с $\lambda < 0$ определяются не только эффективным взаимодействием $\tilde{\Gamma}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$, но и видом изоэнергетических контуров. Поскольку конкретная структура этих контуров тесно связана с энергетическим спектром, очевидно, что выход за рамки приближения ближайших соседей, когда учитываются перескоки на узлы из дальних координационных сфер, может существенно повлиять на условия реализации куперовской неустойчивости и заметно модифицировать структуру фазовой диаграммы сверхпроводящего состояния (см. ниже).

Для решения уравнения (10) представим его ядро в виде суперпозиции функций, каждая из которых относится к одному из неприводимых представлений группы симметрии C_{4v} квадратной решетки. Как известно, эта группа имеет пять неприводимых представлений [43], и для каждого из представлений уравнение (10) имеет свое решение с соответствующей эффективной константой связи λ . В дальнейшем для симметрии параметра порядка используется следующая классификация: представление A_1 соответствует s -типу симметрии, A_2 — расширенному s -типу симметрии (s_{ext}); B_1 — d_{xy} -типу симметрии; B_2 — $d_{x^2-y^2}$ -типу симметрии; E — p -типу симметрии.

Для неприводимого представления α решение уравнения (10) ищется в виде

$$\Delta^{(\alpha)}(\phi) = \sum_m \Delta_m^{(\alpha)} g_m^{(\alpha)}(\phi), \quad (11)$$

где m — номер базисной функции представления α , а ϕ — угол, характеризующий направление импульса $\hat{\mathbf{p}}$ по отношению к оси p_x . Явный вид ортонормированных функций $g_m^{(\alpha)}(\phi)$ определяется выражениями

$$\begin{aligned} A_1 \rightarrow g_m^{(s)}(\phi) &= \frac{1}{\sqrt{(1 + \delta_{m0})\pi}} \cos 4m\phi, \\ & m \in [0, \infty), \\ A_2 \rightarrow g_m^{(sext)}(\phi) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin 4(m + 1)\phi, \\ B_1 \rightarrow g_m^{(d_{xy})}(\phi) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin(4m + 2)\phi, \\ B_2 \rightarrow g_m^{(d_{x^2-y^2})}(\phi) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos(4m + 2)\phi, \\ E \rightarrow g_m^{(p)}(\phi) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} (A \sin(2m + 1)\phi + \\ & + B \cos(2m + 1)\phi). \end{aligned} \quad (12)$$

Базисные функции удовлетворяют условиям ортонормированности

$$\int_0^{2\pi} d\phi g_m^{(\alpha)}(\phi) g_n^{(\beta)}(\phi) = \delta_{\alpha\beta} \delta_{mn}. \quad (13)$$

Подставляя (11) в уравнение (10), проводя интегрирование по углам и используя условие ортонормированности функций $g_m^{(\alpha)}(\phi)$, получаем

$$\sum_n \Lambda_{mn}^{(\alpha)} \Delta_n^{(\alpha)} = \lambda_\alpha \Delta_m^{(\alpha)}, \quad (14)$$

где

$$\begin{aligned} \Lambda_{mn}^{(\alpha)} &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} d\phi_{\mathbf{p}} \int_0^{2\pi} d\phi_{\mathbf{q}} \frac{d\hat{\mathbf{q}}}{d\phi_{\mathbf{q}} v_F(\hat{\mathbf{q}})} \tilde{\Gamma}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \times \\ & \times g_m^{(\alpha)}(\phi_{\mathbf{p}}) g_n^{(\alpha)}(\phi_{\mathbf{q}}). \end{aligned} \quad (15)$$

Поскольку $T_c \sim W \exp(1/\lambda)$, каждому отрицательному собственному значению λ_α соответствует сверхпроводящая фаза с симметрией параметра порядка типа α . Разложение параметра порядка $\Delta^{(\alpha)}(\phi)$ по базисным функциям включает, вообще говоря, множество гармоник, но главный вклад определяется лишь несколькими слагаемыми (см. ниже). Большому значению критической температуры соответствует наибольшее по абсолютной величине значение λ_α .

При численном решении уравнения (14) контур Ферми разбивался на 300 интервалов, а зона Бриллюэна делилась на 10^6 квадратов с линейным размером $2\pi 10^{-3}$. Установлено, что выбранный способ разбиения является достаточным для корректного описания зависимости эффективной константы связи λ от плотности электронов n [44]. На основе найденных зависимостей $\lambda(n)$ для различных значений межузельных кулоновских взаимодействий V_1 и V_2 были построены фазовые диаграммы модели Шубина–Вонсовского, отражающие конкуренцию между сверхпроводящими фазами с различными типами симметрии параметра порядка.

Для удобства изложения результатов и демонстрации относительных вкладов различных компонент эффективного взаимодействия в первом и втором порядках теории возмущений в развитие куперовской неустойчивости представим выражение для $\tilde{\Gamma}$ в виде суммы четырех слагаемых

$$\begin{aligned} \tilde{\Gamma}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) &= \tilde{\Gamma}_I(\mathbf{p}, \mathbf{q}) + \tilde{\Gamma}_{U^2}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) + \\ & + \tilde{\Gamma}_{UV}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) + \tilde{\Gamma}_{V^2}(\mathbf{p}, \mathbf{q}), \end{aligned} \quad (16)$$

где

$$\tilde{\Gamma}_I(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = U + V \gamma_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} = U_{vac}(\mathbf{p} - \mathbf{q}),$$

$$\tilde{\Gamma}_{U^2}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{U^2}{N} \sum_{\mathbf{p}_1} \chi_{\mathbf{p}_1 - \mathbf{p} - \mathbf{q}},$$

$$\begin{aligned} \tilde{\Gamma}_{UV}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) &= \\ & = \frac{UV_1}{N} \sum_{\mathbf{p}_1} \left((2\gamma_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} - \gamma_{\mathbf{p}_1+\mathbf{p}} - \gamma_{\mathbf{p}_1-\mathbf{q}}) \chi_{\mathbf{p}_1+\mathbf{p}-\mathbf{q}} + \right. \\ & \left. + (\gamma_{\mathbf{p}_1-\mathbf{q}} + \gamma_{\mathbf{p}_1-\mathbf{p}}) \chi_{\mathbf{p}_1-\mathbf{p}-\mathbf{q}} \right), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{\Gamma}_{V^2}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) &= \\ & = \frac{V_1^2}{N} \sum_{\mathbf{p}_1} \left(\gamma_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} (2\gamma_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} - \gamma_{\mathbf{p}_1+\mathbf{p}} - \gamma_{\mathbf{p}_1-\mathbf{q}}) \chi_{\mathbf{p}_1+\mathbf{p}-\mathbf{q}} + \right. \\ & \left. + \gamma_{\mathbf{p}_1-\mathbf{q}} \gamma_{\mathbf{p}_1-\mathbf{p}} \chi_{\mathbf{p}_1-\mathbf{p}-\mathbf{q}} \right). \end{aligned}$$

Входящие в эти выражения функции импульсов имеют вид

$$\begin{aligned} \gamma_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} &= 2 [\cos(p_x - q_x) d + \cos(p_y - q_y) d] + \\ & + 4v \cos(p_x - q_x) d \cos(p_y - q_y) d, \end{aligned} \quad (17)$$

где $v = V_2/V_1$, а обобщенные восприимчивости (поляризационные петли) записываются как

$$\chi_{\mathbf{p}_1 \pm \mathbf{p} - \mathbf{q}} = \frac{f(\varepsilon_{\mathbf{p}_1}) - f(\varepsilon_{\mathbf{p}_1 \pm \mathbf{p} - \mathbf{q}})}{\mp(\varepsilon_{\mathbf{p}_1 \pm \mathbf{p} - \mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{p}_1})}. \quad (18)$$

Поскольку первый порядок теории возмущений по межузельному кулоновскому взаимодействию всегда имеет тенденцию к подавлению сверхпроводящего спаривания, возможность реализации куперовской неустойчивости на основе механизма Кона–Латтинжера связывается с появлением во втором порядке теории возмущений таких вкладов в матрицу эффективного взаимодействия для куперовского канала (16), которые соответствуют притяжению и обладают достаточной интенсивностью. Необходимые условия реализации сверхпроводящей фазы с заданным типом симметрии параметра порядка $\Delta^{(\alpha)}(\phi)$ могут быть получены на основе анализа матричных элементов эффективного взаимодействия $\tilde{\Gamma}$ для этого же типа симметрии. При этом, если провести такой же анализ для каждого парциального вклада, можно определить и главные слагаемые второго порядка для эффективного взаимодействия в (16), формирующие куперовское спаривание. С этой целью представим результирующее эффективное взаимодействие $\tilde{\Gamma}$ для каждого неприводимого представления α в виде суммы матричных элементов в представлении базисных функций (12):

$$\{\tilde{\Gamma}^{(\alpha)}\}_{mn} = \{\tilde{\Gamma}_I^{(\alpha)}\}_{mn} + \{\tilde{\Gamma}_{U^2}^{(\alpha)}\}_{mn} + \{\tilde{\Gamma}_{UV}^{(\alpha)}\}_{mn} + \{\tilde{\Gamma}_{V^2}^{(\alpha)}\}_{mn}, \quad (19)$$

где

$$\{\tilde{\Gamma}_I^{(\alpha)}\}_{mn} = \frac{1}{(2\pi)^2} \oint_0^{2\pi} d\phi_{\mathbf{p}} \oint_0^{2\pi} d\phi_{\mathbf{q}} \tilde{\Gamma}_I(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{q}}) \times g_m^{(\alpha)}(\phi_{\mathbf{p}}) g_n^{(\alpha)}(\phi_{\mathbf{q}}), \quad (20)$$

$$\{\tilde{\Gamma}_{U^2}^{(\alpha)}\}_{mn} = \frac{1}{(2\pi)^2} \oint_0^{2\pi} d\phi_{\mathbf{p}} \oint_0^{2\pi} d\phi_{\mathbf{q}} \tilde{\Gamma}_{U^2}(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{q}}) \times g_m^{(\alpha)}(\phi_{\mathbf{p}}) g_n^{(\alpha)}(\phi_{\mathbf{q}}), \quad (21)$$

$$\{\tilde{\Gamma}_{UV}^{(\alpha)}\}_{mn} = \frac{1}{(2\pi)^2} \oint_0^{2\pi} d\phi_{\mathbf{p}} \oint_0^{2\pi} d\phi_{\mathbf{q}} \tilde{\Gamma}_{UV}(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{q}}) \times g_m^{(\alpha)}(\phi_{\mathbf{p}}) g_n^{(\alpha)}(\phi_{\mathbf{q}}), \quad (22)$$

$$\{\tilde{\Gamma}_{V^2}^{(\alpha)}\}_{mn} = \frac{1}{(2\pi)^2} \oint_0^{2\pi} d\phi_{\mathbf{p}} \oint_0^{2\pi} d\phi_{\mathbf{q}} \tilde{\Gamma}_{V^2}(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{q}}) \times g_m^{(\alpha)}(\phi_{\mathbf{p}}) g_n^{(\alpha)}(\phi_{\mathbf{q}}). \quad (23)$$

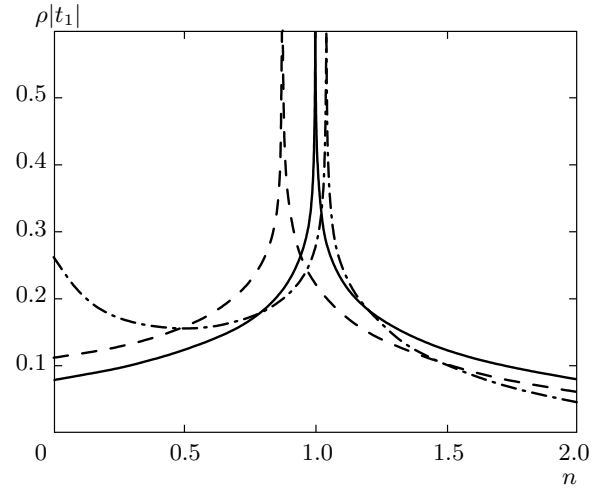


Рис. 4. Плотность электронных состояний, рассчитанная для наборов параметров $t_2 = t_3 = 0$ (сплошная кривая), $t_2 = 0.15|t_1|$, $t_3 = 0$ (штриховая кривая), $t_2 = 0.15|t_1|$, $t_3 = 0.10|t_1|$ (штрихпунктирная кривая)

Как уже отмечалось, важную роль также играет включение дальних электронных перескоков, позволяющих смещать особенность ван Хова в плотности состояний от половинного заполнения ($n = 1$) в область меньших (или больших) электронных плотностей (рис. 4). В данной работе, чтобы избежать суммирования паркетных диаграмм [45], анализ концентрационных зависимостей эффективных констант связи проводится только при электронных плотностях, не очень близких к особенности ван Хова, для которых $U_{vac}(q = 0)\rho(\mu) < 1$.

6.1. Первый порядок по V

Если межузельное кулоновское взаимодействие учитывается только для электронов, находящихся на ближайших узлах ($V_1 \neq 0, V_2 = 0$), а спектр возбуждений описывается одним параметром перескока ($t_1 \neq 0, t_2 = t_3 = 0$), то при $U = |t_1|$ фазовая диаграмма сверхпроводящих состояний содержит пять областей (рис. 5). При ее получении в выражении для эффективного взаимодействия электронов в куперовском канале принимались во внимание вклады только первого порядка по V ,

$$\tilde{\Gamma}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \tilde{\Gamma}_I(\mathbf{p}, \mathbf{q}) + \tilde{\Gamma}_{U^2}(\mathbf{p}, \mathbf{q}), \quad (24)$$

и игнорировались вклады, пропорциональные UV и V^2 .

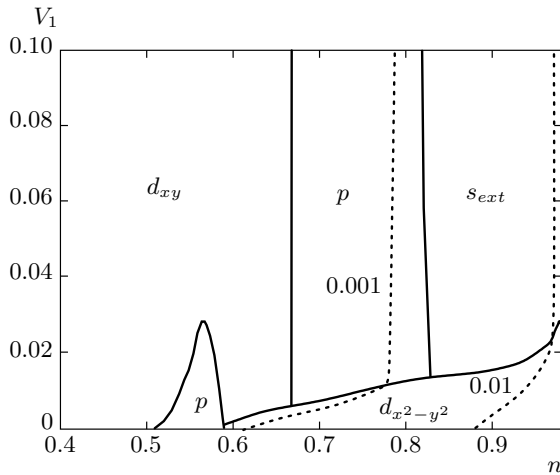


Рис. 5. Фазовая диаграмма модели Шубина–Вонсовского в переменных « $n-V_1$ » при $t_1 = -1, t_2 = t_3 = 0, U = |t_1|$ и $V_2/V_1 = 0$. Межузельное кулоновское взаимодействие учтено только в первом порядке теории возмущений. Для всех точек, принадлежащих одной пунктирной линии, значение λ постоянно и отмечено соответствующим числом

Участки фазовой диаграммы, лежащие на оси абсцисс ($V_1 = 0$), хорошо согласуются с областями на фазовой диаграмме, полученной в работе [24]. В области малых плотностей электронов $n = 0-0.52$ в первых двух порядках теории возмущений реализуется сверхпроводимость с d_{xy} -типом симметрии параметра порядка [13, 16]; в интервале $n = 0.52-0.58$ основному состоянию соответствует фаза с p -типом спаривания, но при этом величина λ_p незначительно превосходит по модулю величину $\lambda_{d_{xy}}$. При $n > 0.58$ возникает $d_{x^2-y^2}$ -тип сверхпроводимости.

Необходимо отметить, что включение в первом порядке теории возмущений кулоновского взаимодействия V_1 электронов, находящихся на соседних узлах, приводит к уменьшению абсолютной величины λ для всех типов симметрии. При этом сверхпроводящая $d_{x^2-y^2}$ -фаза подавляется наиболее интенсивно, и с ростом V_1 при тех же концентрациях начинают реализовываться фазы с другими типами симметрии параметра порядка.

6.2. Фазовая диаграмма при учете вкладов второго порядка по V

Как уже отмечалось, поляризационные эффекты проявляются через вклады второго порядка по V в эффективное взаимодействие электронов в куперовском канале. Поэтому при учете эффектов

Кона–Латтинжера по межузельному кулоновскому взаимодействию необходимо использовать не усеченное выражение (24) для $\tilde{\Gamma}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$, а полное выражение (16). При таком подходе поляризационные эффекты, пропорциональные UV и V^2 , даже при небольших значениях V_1 существенно изменяют и усложняют структуру фазовой диаграммы (рис. 6a). В частности, при значении $V_1/|t_1| = 0-0.2$ имеет место сильная конкуренция между d_{xy} -, p -, s -, и s_{ext} -типами сверхпроводимости во всей области электронных плотностей. При этом результат этой конкуренции приходится определять из сравнения малых значений эффективной константы связи λ . Для демонстрации этого факта на рис. 6 приведены пунктирные линии, являющиеся линиями постоянного значения λ . С увеличением параметра межузельного кулоновского взаимодействия V_1 происходит возрастание величины λ . При этом стабилизируются только три фазы, соответствующие d_{xy} -, p - и s -типам симметрии сверхпроводящего параметра порядка. Отметим, что в области высоких концентраций электронов и при $V_1/|t_1| = 0.25-0.5$ поляризационные эффекты Кона–Латтинжера приводят к появлению сверхпроводящей s -фазы. Этот качественный эффект наглядно демонстрирует важность процессов второго порядка при вычислении эффективного взаимодействия электронов в куперовском канале и при построении усложненной фазовой диаграммы на рис. 6.

Проведем количественное сравнение различных парциальных вкладов в полное эффективное взаимодействие и продемонстрируем существенную роль вкладов в $\tilde{\Gamma}$ слагаемых второго порядка по V . Для этого ниже в виде таблицы представлены результаты вычислений матричных элементов $\{\tilde{\Gamma}\}_{mn}$ (20)–(23) при небольших значениях m и n . Значения матричных элементов для $n, m > 2$ не приводятся в силу их малости. Таблица отражает результаты для точки фазовой диаграммы, в которой сверхпроводящая фаза с s -типом симметрии параметра порядка соответствует основному состоянию. Из таблицы видно, что при выбранных параметрах вклады первого $\tilde{\Gamma}_I$ и второго $\tilde{\Gamma}_{U^2}$ порядков дают только положительные значения матричных элементов. Отсюда следует, что учет только этих процессов не привел бы к сверхпроводящей фазе с s -типом симметрии параметра порядка. Аналогично этому вклады второго порядка $\tilde{\Gamma}_{UV}$ также не привели бы к реализации сверхпроводящей s -фазы, и только вклады второго порядка $\tilde{\Gamma}_{V^2}$ (четвертая строка таблицы) обеспечивают такие значения отрицательных матричных элементов $\{\tilde{\Gamma}\}_{mn}$ (и

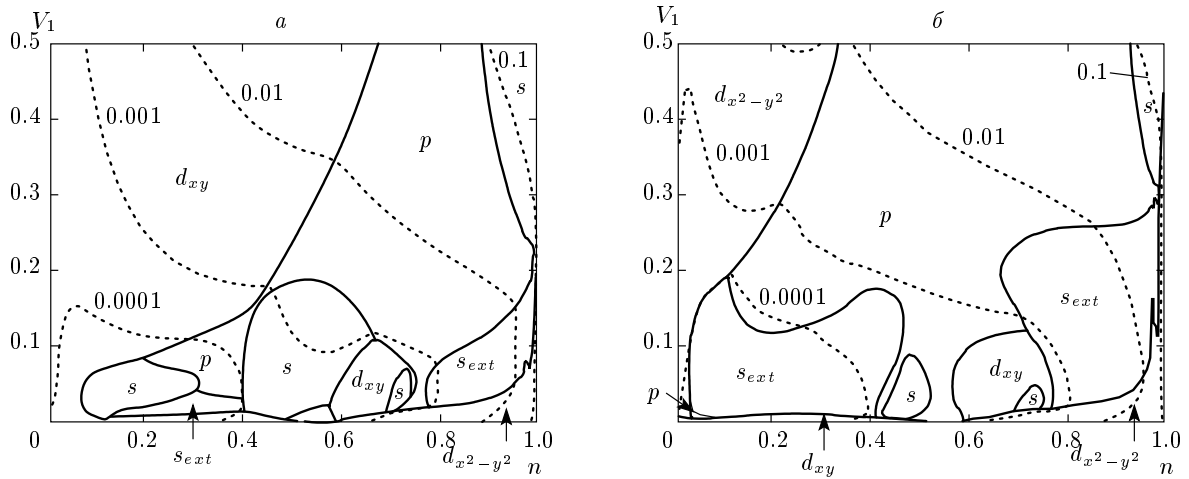


Рис. 6. Фазовые диаграммы модели Шубина–Вонсовского в переменных « $n-V_1$ », построенные при учете вкладов второго порядка по V для набора параметров $t_1 = -1, t_2 = t_3 = 0, U = |t_1|$ и соотношения $V_2/V_1 = 0$ (а) и $V_2/V_1 = 0.5$ (б). Пунктиром показаны линии постоянного значения λ

Таблица. Величины матричных элементов для парциальных вкладов $\{\tilde{\Gamma}_I^{(s)}\}_{mn}, \{\tilde{\Gamma}_{U^2}^{(s)}\}_{mn}, \{\tilde{\Gamma}_{UV}^{(s)}\}_{mn}, \{\tilde{\Gamma}_{V^2}^{(s)}\}_{mn}$ и результирующего эффективного взаимодействия $\{\tilde{\Gamma}^{(s)}\}_{mn}$, а также значения коэффициентов разложения параметра порядка $\Delta_m^{(s)}$. Вычисления проведены для значений параметров $t_1 = -1, t_2 = t_3 = 0, U = |t_1|, V_1 = 0.5|t_1|, V_2 = 0, n = 0.95$

(m, n)	(0,0)	(1,1)	(1,0)	(2,2)	(2,1)	(2,0)
$\{\tilde{\Gamma}_I^{(s)}\}_{mn}$	6.288	0	0.001	0	0	0.001
$\{\tilde{\Gamma}_{U^2}^{(s)}\}_{mn}$	1.972	0.106	0.058	0.036	0.006	0.030
$\{\tilde{\Gamma}_{UV}^{(s)}\}_{mn}$	1.758	0.763	-0.245	0.214	0.136	-0.090
$\{\tilde{\Gamma}_{V^2}^{(s)}\}_{mn}$	-6.589	-3.684	-0.324	-0.481	-0.494	-0.111
$\{\tilde{\Gamma}^{(s)}\}_{mn}$	3.429	-2.815	-0.509	-0.231	-0.353	-0.170
m	0	1	2	3	4	5
$\Delta_m^{(s)}$	-0.188	0.968	0.163	0.039	0.010	0.003

тем самым отрицательных собственных значений λ), которые ведут к реализации сверхпроводящей s -фазы. При этом главный вклад в угловую зависимость сверхпроводящего параметра порядка дает гармоника $g_1^{(s)}(\phi) = (1/\sqrt{\pi}) \cos 4\phi$ (последняя строка таблицы). В этой связи необходимо отметить, что несмотря на большое значение матричного элемента $\{\tilde{\Gamma}_{V^2}^{(s)}\}_{00}$ для $g_0^{(s)}(\phi) = 1/\sqrt{2\pi}$, другие парциальные вклады подавляют тенденцию к сверхпроводимости в канале с отсутствием угловой зависимости у параметра порядка ($\Delta_0^{(s)} \sim g_0^{(s)} = \text{const}$).

Сделаем замечание относительно представленных в таблице значений $\Delta_m^{(s)}$. В рассматриваемом

подходе куперовская неустойчивость определялась из анализа однородной части уравнения Бете–Солпитера. В этом случае, как известно, параметр порядка определяется с точностью до общего множителя Δ , который в окрестности критической точки при $T < T_c$ пропорционален $\sqrt{(T_c - T)/T_c}$ в модели слабой связи (в модели БКШ). Поэтому представленные в таблице значения отражают лишь относительный вклад каждой из гармоник в угловую зависимость параметра порядка.

Отмеченный сценарий реализации сверхпроводящего s -спаривания за счет высших гармоник хорошо коррелирует с недавно полученными эксперимен-

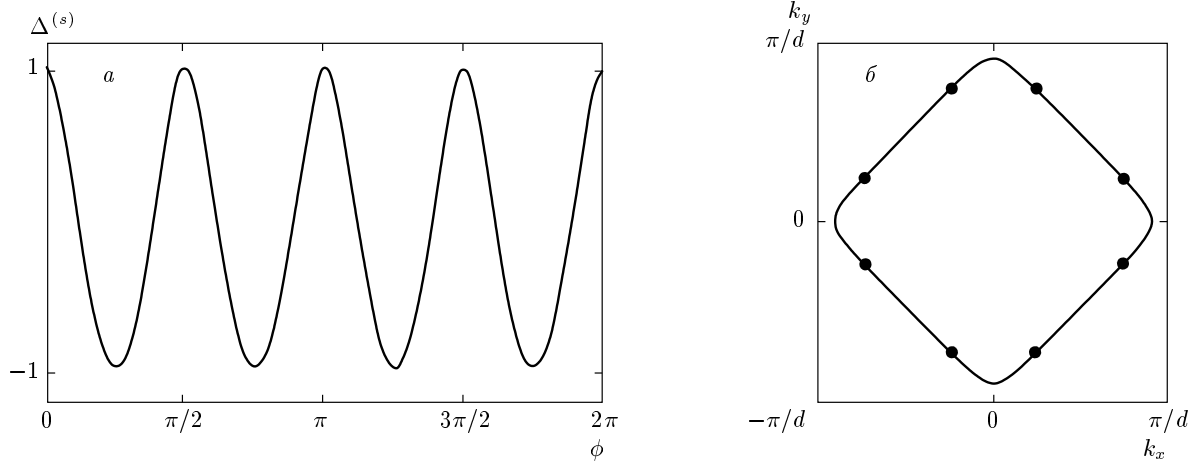


Рис. 7. Угловая зависимость сверхпроводящего параметра порядка $\Delta^{(s)}(\phi)$ (а) и расположение нодальных точек обращения щели $\Delta^{(s)}(\phi)$ в нуль на контуре Ферми (б), рассчитанные для параметров $t_1 = -1, t_2 = t_3 = 0, U = |t_1|, V_1 = 0.5|t_1|, V_2 = 0, n = 0.95$

тальными данными работы [46]. В ней были представлены результаты исследований сверхпроводника на основе арсенида железа KFe_2As_2 , выполненных методом фотоэмиссионной спектроскопии с ультравысоким угловым разрешением. Исследования показали, что данное соединение является нодальным (содержащим нули щели) сверхпроводником с s -типом симметрии параметра порядка, который имеет восемь точек обращения щели в нуль.

Для сравнения на рис. 7 представлены результаты нашего расчета, выполненного для обсуждавшейся выше точки фазовой диаграммы, в которой сверхпроводящая фаза с s -типом симметрии параметра порядка соответствует основному состоянию при больших электронных плотностях. Разложение параметра порядка $\Delta^{(s)}$ по угловым гармоникам для данного случая описывается выражением

$$\Delta^{(s)}(\phi) = \frac{\Delta_0^{(s)}}{\sqrt{2}} + \Delta_1^{(s)} \cos 4\phi + \Delta_2^{(s)} \cos 8\phi + \Delta_3^{(s)} \cos 12\phi + \Delta_4^{(s)} \cos 16\phi \quad (25)$$

с коэффициентами $\Delta_m^{(s)}$, представленными в последней строке таблицы. Отметим, что начиная с $\Delta_3^{(s)}$ коэффициенты разложения малы, так что щель хорошо описывается первыми тремя слагаемыми. На рис. 7а приведена соответствующая угловая зависимость сверхпроводящего параметра порядка $\Delta^{(s)}(\phi)$, демонстрирующая наличие восьми нодальных точек, в которых щель обращается в нуль. Необходимо отметить, что расположение нодальных точек $\Delta^{(s)}(\phi)$ на контуре Ферми (рис. 7б) в нашем рас-

чете качественно согласуется с картиной, представленной в работе [46].

Сценарий реализации сверхпроводимости, схожий с описанным выше сценарием возникновения s -спаривания, наблюдается также и в p -канале: сверхпроводимость, полученная при учете второго порядка теории возмущений по кулоновскому взаимодействию, подавляется затравочным отталкиванием $\tilde{\Gamma}_I$ только для первой гармоники $g_0^{(p)}$. При этом основной вклад в $\Delta^{(p)}(\hat{p})$ вносит функция следующей гармоники p -спаривания $g_1^{(p)}(\phi) = (1/\sqrt{\pi})(A \sin 3\phi + B \cos 3\phi)$.

Значительную модификацию фазовой диаграммы модели Шубина–Вонсовского вызывает включение межузельного кулоновского взаимодействия электронов из второй координационной сферы V_2 . Это отражено на рис. 6б, который получен для соотношения $V_2/V_1 = 0.5$. При этом остальные параметры оставлены без изменений. При малых значениях V_1 фазовая диаграмма изменяется существенно (оставаясь при этом столь же сложной, как и на рис. 6а), однако величины константы эффективного взаимодействия λ в этой области по-прежнему малы. По этой причине мы не будем останавливаться подробно на рассмотрении области малых V_1 . При больших значениях V_1 происходит расширение области реализации p -спаривания, а в области малых плотностей электронов вместо d_{xy} -фазы для параметра порядка реализуется $d_{x^2-y^2}$ -тип спаривания.

Необходимо отметить, что в области больших электронных плотностей ($n > 0.6$) и при малых V_1 главный вклад в реализацию куперовского спа-

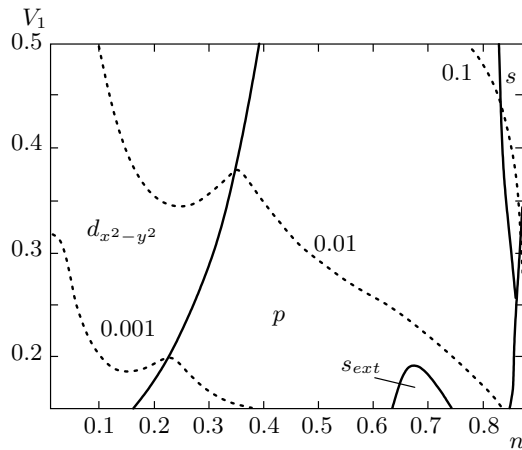


Рис. 8. Фазовая диаграмма модели Шубина–Вонсовского в переменных « $n-V_1$ », построенная при $U = |t_1|$, $V_2/V_1 = 0.5$ для параметров электронных перескоков $t_1 = -1$, $t_2 = 0.15|t_1|$, $t_3 = 0$. Пунктиром показаны линии постоянного значения λ

ривания с $d_{x^2-y^2}$ -типом симметрии параметра порядка вносит матрица $\tilde{\Gamma}_{U^2}$. При увеличении параметра V_1 этот вклад подавляется затравочным взаимодействием $\tilde{\Gamma}_I^{(d_{x^2-y^2})}$. Одновременно с этим начинает нарастать сверхпроводящий вклад, обусловленный матрицей $\tilde{\Gamma}_{UV}^{(d_{x^2-y^2})}$ со второй гармоникой d -спаривания $g_1^{(d_{x^2-y^2})}(\phi) = (1/\sqrt{\pi}) \cos 6\phi$, но соответствующее ему значение константы связи λ все еще сравнительно мало. По этой причине учет взаимодействий, пропорциональных V_2 , слабо изменяет эту область фазовой диаграммы.

В случае $V_1 \neq 0$, $V_2 \neq 0$ вклад в $d_{x^2-y^2}$ -спаривание в области малых концентраций полностью индуцируется матрицей $\tilde{\Gamma}_{V^2}$ с доминирующей ролью первой гармоники d -спаривания $g_0^{(d_{x^2-y^2})}(\phi) = (1/\sqrt{\pi}) \cos 2\phi$, причем его интенсивность превосходит вклад, соответствующий затравочному отталкиванию.

Существенное влияние на конкуренцию различных сверхпроводящих фаз оказывает включение перескоков электронов на узлы, находящиеся за пределами первой координационной сферы. Это продемонстрировано на рис. 8, где представлена фазовая диаграмма модели, полученная для значений параметров $U = |t_1|$, $V_2/V_1 = 0.5$ и при учете электронных перескоков в пределах первых двух ($t_2 = 0.15|t_1|$, $t_3 = 0$) координационных сфер. При выбранном наборе параметров электронных перескоков происходит смещение критической плотности электронов n_{vH} , при которой реализуется особенность ван Хофа, из области половинного запол-

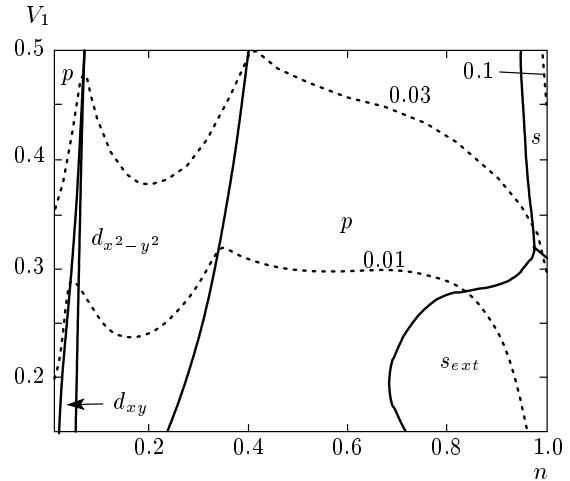


Рис. 9. Фазовая диаграмма модели Шубина–Вонсовского в переменных « $n-V_1$ », построенная при $U = |t_1|$, $V_2/V_1 = 0.5$ для параметров электронных перескоков $t_1 = -1$, $t_2 = 0.15|t_1|$, $t_3 = 0.1|t_1|$. Пунктиром показаны линии постоянного значения λ

нения ($n_{vH} = 1$) в область меньших электронных плотностей (см. рис. 4). Из сравнения рис. 6б и рис. 8 видно, что включение перескока t_2 приводит к расширению области реализации $d_{x^2-y^2}$ -спаривания в области малых электронных плотностей и увеличению абсолютных значений λ в этой области (нами было показано, что в области малых значений V_1 величины константы эффективного взаимодействия λ пренебрежимо малы. Поэтому здесь и далее фазовые диаграммы модели строятся для интервалов V_1 с большими λ).

Отметим, что при больших значениях V_1 ($V_1 \gtrsim 0.2|t_1|$) фазовые диаграммы как на рис. 6, так и на рис. 8 заметно упрощаются.

На рис. 9 показана фазовая диаграмма, рассчитанная при дополнительном включении электронных перескоков в третью координационную сферу. Из сравнения фазовых диаграмм на рис. 9 и на рис. 8 видно, что включение перескоков $t_3 > 0$ приводит к увеличению эффективного взаимодействия в области малых плотностей и к дополнительному расширению области реализации $d_{x^2-y^2}$ -спаривания. Отметим, что включение перескоков $t_3 < 0$ приводит к противоположному эффекту.

Подчеркнем, что в разд. 6.1 учитывались поправки Кона–Латтинжера для эффективного взаимодействия, только пропорциональные $\tilde{\Gamma}_{U^2}$. В этом случае фазовая диаграмма зависела только от одного параметра VW/U^2 . Однако при учете вкладов $\tilde{\Gamma}_{UV}$ и $\tilde{\Gamma}_{V^2}$ зависимость фазовой диаграммы от пара-

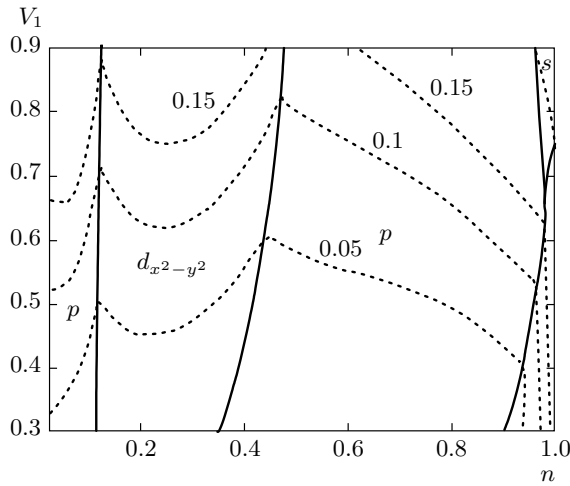


Рис. 10. Фазовая диаграмма модели Шубина–Вонсовского в переменных « $n-V_1$ », полученная для параметров $t_1 = -1$, $t_2 = 0.15|t_1|$, $t_3 = 0.1|t_1|$, $U = 2|t_1|$, $V_2/V_1 = 0.5$. Пунктиром показаны линии постоянного значения λ

метров кулоновского взаимодействия вновь усложняется даже при не очень малых V_1 . На рис. 10 показана модификация фазовой диаграммы модели Шубина–Вонсовского, происходящая при увеличении параметра хаббардовского отталкивания U . Расчеты выполнены для набора параметров $t_2 = 0.15|t_1|$, $t_3 = 0.1|t_1|$, $V_2/V_1 = 0.5$, как и на рис. 9, но с $U = 2$. Видно, что в области малых электронных плотностей, а также в области плотностей, близких к особенности ван Хофа, реализуется сверхпроводящая фаза с $d_{x^2-y^2}$ -симметрией параметра порядка с достаточно большими значениями $|\lambda| \sim 0.1-0.2$. Данный результат представляется актуальным при рассмотрении возможности реализации механизма Кона–Латтинжера в высокотемпературных сверхпроводниках. Отметим, что при $|\lambda| \approx 0.2$ критические температуры перехода в сверхпроводящую фазу могут достигать реалистичных значений $T_c \sim 100$ К.

Представленные в работе результаты по исследованию механизма сверхпроводимости Кона–Латтинжера и характера сверхпроводящей фазовой диаграммы в модели Шубина–Вонсовского демонстрируют ряд качественно новых эффектов.

Первый из них связан с тем, что в режиме слабой связи $W > U > V$ учет вкладов второго поряд-

ка теории возмущений по межузельному кулоновскому взаимодействию V приводит к существенной ренормировке эффективного взаимодействия для двух электронов в куперовском канале. Такая ренормировка связана с поляризационными эффектами Кона–Латтинжера, приводящими к эффективному притяжению электронов в различных каналах на двумерной квадратной решетке. Подчеркнем, что затравочное кулоновское взаимодействие V всегда имеет тенденцию к подавлению куперовского спаривания, тогда как поляризационные эффекты второго порядка по V «играют» в пользу эффективного притяжения. Главное состоит в том, что затравочное взаимодействие подавляет сверхпроводимость в одних каналах (в каналах с одними угловыми функциями), тогда как вклады второго порядка Кона–Латтинжера порождают сверхпроводимость в каналах с другими угловыми функциями. Поэтому, несмотря на свою параметрическую малость, эффекты второго порядка по V вносят решающий вклад в механизм сверхпроводимости в модели Шубина–Вонсовского [39, 44].

Второй эффект связан с модификацией фазовой диаграммы сверхпроводящего состояния при включении кулоновского взаимодействия. В отсутствие кулоновских взаимодействий ($V_1 = 0, V_2 = 0$) фазовая диаграмма $2D$ модели Хаббарда весьма проста и содержит лишь три области p -, d_{xy} - и $d_{x^2-y^2}$ -спаривания [44] при различных электронных плотностях $0 < n < 1$. При учете вкладов первого порядка по кулоновскому взаимодействию на соседних узлах V_1 фазовая диаграмма сверхпроводящего состояния в модели Шубина–Вонсовского усложняется незначительно. К перечисленным трем типам спаривания добавляется еще одно расширенное s -спаривание (s_{ext}), а сама фазовая диаграмма суммарно содержит пять областей (две области p -спаривания и по одной области d_{xy} -, $d_{x^2-y^2}$ - и s_{ext} -спаривания).

Однако при учете вкладов второго порядка по кулоновскому взаимодействию на ближайших узлах V_1 и взаимодействию на узлах, следующих за ближайшими V_2 , сверхпроводящая фазовая диаграмма резко усложняется и начинает содержать более десяти областей с различными типами спаривания $s, s_{ext}, p, d_{xy}, d_{x^2-y^2}$. Особенно сложна фазовая диаграмма при малых V_1 (рис. 6). При больших значениях V_1 фазовая диаграмма вновь упрощается (см. рис. 8, 9). Тем не менее для нее при возрастании V_1 становится характерным наличие участков с аномальным s -спариванием $\Delta^{(s)}(\phi) \sim \Delta_1^{(s)} \cos 4\phi$ при больших электронных плотностях $n \rightarrow 1$. Отметим,

что такая угловая зависимость сверхпроводящей щели с восемью точками на ферми-поверхности, где щель обращается в нуль (см. рис. 7), хорошо совпадает с недавними экспериментальными результатами японской группы по фотоэмиссии с угловым разрешением (ARPES) для одного из семейств сверхпроводников на основе арсенида железа KFe_2As_2 [46].

Отметим также, что учет дальних перескоков ($t_2 \neq 0, t_3 \neq 0$) смещает особенность ван Хова в плотности состояний от половинного заполнения $n_{vH} = 1$ в области меньших (или больших) электронных плотностей и, вообще говоря, существенно меняет форму ферми-контура и скорость Ферми v_F на контуре. Тем не менее такой учет радикально не меняет фазовую диаграмму при больших значениях V_1 , сохраняя доминирующую роль областей $d_{x^2-y^2}$ -, p - и аномального s -спаривания при $V_1 \gtrsim 0.3|t_1|$ (см. рис. 8, 9) и типичные значения критической температуры (констант связи λ в разных каналах).

Наконец последний, и весьма существенный, эффект проявляется в том, что при увеличении параметра хаббардовского отталкивания U значительно расширяется область реализации сверхпроводящей фазы с $d_{x^2-y^2}$ -симметрией параметра порядка (см. рис. 10) и при $U/|t_1| = 2-3$ вблизи половинного заполнения $n \rightarrow 1$ критическая температура может достигать реалистичных значений $T_c \sim 100$ К. Этот результат представляет особый интерес, поскольку открывает реальный путь для использования механизма Кона–Латтинжера в проблеме высокотемпературной сверхпроводимости.

Более детальный анализ фазовой диаграммы сверхпроводящего состояния при температурах ниже T_c требует построения функционала свободной энергии Гинзбурга–Ландау и определения всех его локальных и глобальных экстремумов с учетом поправок сильной связи [47, 48] к четверным (по параметру порядка Δ) членам и вычисления предэкспоненты (учета диаграмм третьего и четвертого порядков) для T_c [8, 15, 28]. При этом может возникнуть ситуация, когда, по крайней мере до учета поправок сильной связи, значения свободной энергии, соответствующие некоторым локальным минимумам функционала Гинзбурга–Ландау, могут быть очень близки друг к другу. Так, для некоторых типов кристаллических решеток могут, например, зацепляться фазы с d_{xy} - и $d_{x^2-y^2}$ -типами симметрии параметра порядка [28, 49]. В результате при учете поправок сильной связи вблизи T_c (или в случае реализации второго фазового перехода внутри сверхпроводящей фазы при $\tilde{T}_c < T_c$) в принципе могут возникнуть со-

стояния с суперпозицией двух параметров порядка для p - или d -спаривания (типа $A\Delta_{xy} + B\Delta_{x^2-y^2}$). В частности (см. обсуждение в работе [28]), интересной представляется возможность реализации кирального состояния $p + ip$ или $d + id$, когда один из коэффициентов, A или B , в этой суперпозиции является мнимым. Экспериментально показано, что киральное состояние с p -типом симметрии параметра порядка $p_x + ip_y$ реализуется в анизотропной сверхтекучей A -фазе в 3He [8–10] и, по-видимому, в сверхпроводящих рутенатах Sr_2RuO_4 [50, 51].

В заключение отметим, что развитие идеологии Кона–Латтинжера для режима сильной связи при заполнении, близком к половинному, представляет собой одно из актуальнейших направлений теории сверхпроводимости в сильнокоррелированных системах. Однако решение этой задачи сопряжено с необходимостью учета сильных одноузельных корреляций во всех порядках теории возмущений. При этом межузельные корреляции должны описываться с учетом вкладов второго порядка. Один из сценариев развития теории в этом направлении связан с использованием атомного представления [52]. При этом актуальными моделями, в рамках которых можно включить ренормировки Кона–Латтинжера, являются t - J -модель [53–56] и обобщенная t - J - V -модель [57], представляющие собой эффективные низкоэнергетические варианты модели Шубина–Вонсовского.

Авторы выражают благодарность А. С. Александрову, Д. В. Ефремову, В. В. Кабанову, Ю. В. Копаеву, К. И. Кугелю, М. С. Марьяненко, Н. М. Плакиде, А. В. Чубукову за многочисленные дискуссии и постоянное внимание к работе.

Работа выполнена при поддержке Программы Президиума РАН «Квантовые мезоскопические и неупорядоченные структуры» 20.7, РФФИ (гранты №№ 11-02-00741, 12-02-31130), Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009–2013 гг.» (ГК № 16.740.11.0644) и гранта Президента РФ МК-526.2013.2. Один из авторов (М. М. К.) благодарит Фонд «Династия» за оказанную поддержку.

ЛИТЕРАТУРА

- W. Kohn and J. M. Luttinger, Phys. Rev. Lett. , 524 (1965).

- . W. Kohn, Phys. Rev. Lett. , 393 (1959); E. J. Woll, Jr. and W. Kohn, Phys. Rev. , 1693 (1962).
- . J. Friedel, Adv. Phys. , 446 (1954); Nuovo Cim. Suppl. , 287 (1958).
- . D. Fay and A. Layzer, Phys. Rev. Lett. , 187 (1968).
- . М. Ю. Каган, А. В. Чубуков, Письма в ЖЭТФ , 525 (1988); , 483 (1989).
- . М. А. Баранов, М. Ю. Каган, Ю. Каган, Письма в ЖЭТФ , 273 (1996).
- . М. Ю. Каган, УФН , 77 (1994).
- . D. Vollhardt and P. Woelfle, *The Superfluid Phases of Helium 3*, Taylor and Francis, London (1990).
- . G. E. Volovik, *Exotic Properties of Superfluid ^3He* , World Sci., Singapore (1992).
- . G. E. Volovik, *The Universe in a Helium Droplet*, Clarendon Press, Oxford (2003).
- . N. B. Kopnin, T. T. Heikkilä, and G. E. Volovik, Phys. Rev. B , 220503(R) (2011).
- . A. V. Chubukov and M. Yu. Kagan, J. Phys.: Condens. Matter , 3135 (1989).
- . М. А. Баранов, А. В. Чубуков, and М. Ю. Каган, Int. J. Mod. Phys. B , 2471 (1992).
- . М. Ю. Каган, Phys. Lett. A , 303 (1991).
- . Д. В. Ефремов, М. С. Марьенко, М. А. Баранов, М. Ю. Каган, ЖЭТФ , 990 (2000).
- . М. А. Баранов and М. Ю. Каган, Z. Phys. B , 237 (1992).
- . A. V. Chubukov, Phys. Rev. B , 1097 (1993).
- . K. Miyake, S. Schmitt-Rink, and C. M. Varma, Phys. Rev. B , 6554 (1986).
- . М. Ю. Каган, М. А. Баранов, and Д. В. Ефремов, Physica C , 75 (1993).
- . М. Ю. Каган and V. V. Val'kov, ЖЭТФ , 179 (2011).
- . J. C. Hubbard, Proc. Roy. Soc. London A , 238 (1963).
- . D. J. Scalapino, E. Loh, Jr., and J. E. Hirsch, Phys. Rev. B , 8190 (1986); , 6694 (1987).
- . D. Zanchi and H. J. Schulz, Phys. Rev. B , 9509 (1996).
- . R. Hlubina, Phys. Rev. B , 9600 (1999); J. Mráz and R. Hlubina, Phys. Rev. B , 174518 (2003).
- . F. Guinea, R. S. Markiewicz, and M. A. H. Vozmediano, Phys. Rev. B , 054509 (2004).
- . S. Raghu, S. A. Kivelson, and D. J. Scalapino, Phys. Rev. B , 224505 (2010).
- . J. González, Phys. Rev. B , 205431 (2008).
- . R. Nandkishore, L. S. Levitov, and A. V. Chubukov, Nature Physics, doi:10.1038/nphys2208 (2012).
- . M. S. Marienko, J. D. Sau, and S. Tewari, arXiv: 1202.5784v1.
- . A. S. Alexandrov and V. V. Kabanov, Phys. Rev. Lett. , 136403 (2011).
- . М. Ю. Каган, Д. В. Ефремов, М. С. Марьенко, and V. V. Val'kov, Письма в ЖЭТФ , 807 (2011).
- . S. Shubin and S. Vonsowsky, Proc. Roy. Soc. London A , 159 (1934).
- . S. Shubin and S. Vonsowsky, Phys. Zs. UdSSR , 292 (1935); , 348 (1936).
- . S. V. Vonsowsky and M. I. Katsnelson, J. Phys. C , 2043 (1979); 2055 (1979).
- . Р. О. Зайцев, ЖЭТФ , 1132 (1980).
- . Р. О. Зайцев, В. А. Иванов, Ю. В. Михайлова, ФММ , 1032 (1988); 1108 (1989).
- . Р. О. Зайцев, ЖЭТФ , 891 (2004).
- . В. В. Вальков, М. М. Коровушкин, ЖЭТФ , 126 (2011).
- . S. Raghu, E. Berg, A. V. Chubukov, and S. A. Kivelson, Phys. Rev. B , 024516 (2012).
- . В. М. Галицкий, ЖЭТФ , 151 (1958).
- . P. Bloom, Phys. Rev. B , 125 (1975).
- . Л. П. Горьков, Т. К. Мелик-Бархударов, ЖЭТФ , 1452 (1961).
- . Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика: нерелятивистская теория*, Наука, Москва (1989).
- . М. Ю. Каган, В. В. Вальков, В. А. Мицкан, М. М. Коровушкин, Письма в ЖЭТФ , 253 (2013).
- . И. Е. Дзялошинский, В. М. Яковенко, ЖЭТФ (4), 344 (1988); И. Е. Дзялошинский, И. М. Кричевер, Я. Хронек, ЖЭТФ (7), 344 (1988).
- . K. Okazaki, Y. Ota, Y. Kotani et al., Science , 1314 (2012).

- . D. Rainer and J. W. Serene, Phys. Rev. B , 4745 (1976).
- . М. А. Баранов, Д. В. Ефремов, М. Ю. Каган и др., Письма в ЖЭТФ , 268 (1994).
- . R. Nandkishore and A. V. Chubukov, Phys. Rev. B , 115426 (2012).
- . M. Sigrist and K. Ueda, Rev. Mod. Phys. , 239 (1991).
- . A. P. Mackenzie and Y. Maeno, Rev. Mod. Phys. , 657 (2003).
- . J. C. Hubbard, Proc. Roy. Soc. London A , 542 (1965).
- . P. W. Anderson, Science , 1196 (1987).
- . M. Yu. Kagan and T. M. Rice, J. Phys.: Condens. Matter , 3771 (1994).
- . Ю. А. Изюмов, УФН , 465 (1997).
- . Н. М. Плакида, Письма в ЖЭТФ , 38 (2001); Н. М. Плакида, Л. Антон, С. Адам, Г. Адам, ЖЭТФ , 367 (2003).
- . N. M. Plakida and V. S. Oudovenko, Eur. Phys. J. B , 115 (2013); arXiv:1301.4347v1.