ИЗВЕСТИЯ РАН. СЕРИЯ ФИЗИЧЕСКАЯ, 2016, том 80, № 6, с. 679–682

УДК 538.94;5544.022.244

ВЛИЯНИЕ МЕЖУЗЕЛЬНОГО КУЛОНОВСКОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА РЕАЛИЗАЦИЮ БЕСЩЕЛЕВОЙ СВЕРХПРОВОДЯЩЕЙ ФАЗЫ ФЕРМИОНОВ ХАББАРДА НА ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ

© 2016 г. В. В. Вальков[1], Т. А. Валькова[2], В. А. Мицкан[1, 3]

E-mail: vvv@iph.krasn.ru

В рамках *t-J-V*-модели на треугольной решетке с учетом обменного и кулоновского взаимодействий в двух координационных сферах рассмотрена концентрационная зависимость положения нодальных точек сверхпроводящего параметра порядка и найдены условия реализации квантового топологического перехода.

DOI: 10.7868/S0367676516060399

ВВЕДЕНИЕ

В связи с открытием существования в кобальтите Na_xCoO_2 сверхпроводимости [1] при итеркалировании водой возник значительный интерес к исследованию куперовской неустойчивости и выяснению свойств сверхпроводящей фазы данной системы. Экспериментальные данные по спин-решеточной релаксации [2], измерения удельной теплоемкости [3] и сдвига Найта позволяют сделать вывод о том, что в системе присутствуют антиферромагнитные корреляции, а сверхпроводящий параметр порядка (СПП) является анизотропным и спин-синглетным. Это означает, что в кобальтите натрия может реализоваться фаза с киральным $d_{x^2-y^2} + id_{xy}$ типом симметрии СПП. Важным становится вопрос о наличии щели в спектре фермиевских возбуждений в такой сверхпроводящей фазе. В работе [4] указывалось, что для потенциала спаривания, реализующегося только для ближайших соседей, сверхпроводящая фаза с $d + id$-типом симметрии СПП характеризуется наличием щели во всей области концентраций x. Это противоречило экспериментальным данным. В [4] было показано, что потенциал спаривания только для второй координационной сферы приводит к бесщелевой сверхпроводящей фазе с необходимой симметрией СПП.

Но для того чтобы сверхпроводящие фазы, рассмотренные в [4], удовлетворяли системе уравнений самосогласования, необходимо учитывать взаимодействия и в первой координационной сфере. Это было сделано в работе [5], где были получены дополнительные условия для реализации бесщелевой сверхпроводящей фазы.

В настоящей работе будет рассмотрено влияние кулоновского взаимодействия не только между электронами, находящимися на ближайших узлах, но также и на узлах, следующих за ближайшими.

МОДЕЛЬ

Описание системы будем проводить в рамках *t-J-V*-модели, относящейся к верхней хаббардовской зоне. В представлении операторов Хаббарда [6, 7] гамильтониан модели записывается в виде

$$\begin{aligned} H = &\sum_{f\sigma}(\varepsilon-\mu)X_f^{\sigma\sigma} + \sum_f(2\varepsilon+U-2\mu)X_f^{22} + \\ &+ \sum_{fm\sigma} t_{fm} X_f^{2\bar\sigma} X_m^{\bar\sigma 2} + \\ &+ \sum_{f\neq m,\sigma} J_{fm}\left(X_f^{\uparrow\downarrow}X_m^{\downarrow\uparrow} - X_f^{\uparrow\uparrow}X_m^{\downarrow\downarrow}\right) \\ &+ \frac{1}{2}\sum_{f\neq m} V_{fm}\left(\hat n_f - \langle \hat n_f\rangle\right)\left(\hat n_m - \langle \hat n_m\rangle\right). \end{aligned} \qquad (1)$$

Первые два слагаемых гамильтониана описывают одно- и двухэлектронные состояния на узлах треугольной решетки в атомном представлении, ε – энергия одноэлектронного состояния, μ – химпотенциал ансамбля, U – энергия хаббардовского отталкивания. Недиагональные операторы Хаббарда описывают процессы перехода между одноузельными состояниями. Третий член гамильтониана соответствует перескоку в верхней хаббардовской зоне электрона со спином σ с узла m на узел f. При этом на узле m происходит переход из двухэлектронного состояния $|2\rangle$ в одноэлектрон-

[1] Федеральное государственное бюджетное учреждение науки "Институт физики им. Л.В. Киренского" СО РАН, Красноярск.

[2] Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования "Сибирский федеральный университет", Красноярск.

[3] Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования "Сибирский государственный аэрокосмический университет имени М.Ф. Решетнева" Красноярск.

ное состояние с противоположным спином $|\bar{\sigma}\rangle$, а на узле f наоборот, из состояния $|\bar{\sigma}\rangle$ в состояние $|2\rangle$. Амплитуда вероятности такого перескока электрона определяется параметром t_{fm}. Четвертое слагаемое гамильтониана соответствует обменному взаимодействию t-J-модели в представлении операторов Хаббарда [8], J_{fm} – интеграл обменной связи ионов, находящихся в одноэлектронных состояниях в узлах f и m. Последнее слагаемое гамильтониана отражает наличие в системе зарядовых флуктуаций, обусловленных кулоновским отталкиванием электронов, находящихся на узлах f и m; V_{fm} – параметр, отражающий интенсивность таких флуктуаций.

Для описания сверхпроводящей фазы воспользуемся диаграммной техникой для операторов Хаббарда [7]. Подробно процедура получения уравнения на киральный СПП в рамках t-J-V-модели была описана в работе [5], поэтому приведем лишь окончательное уравнение самосогласования для параметра порядка в сверхпроводящей фазе

$$\Delta(p) = \frac{1}{N}\sum_q \left(J_{p+q} + J_{p-q} - V_{p-q}\right)\Delta(q)\frac{\operatorname{th}(E_q/2T)}{2E_q}, \quad (2)$$

здесь $E_q = \sqrt{\xi_q^2 + |\Delta(q)|^2}$ – спектр возбуждений в сверхпроводящей фазе, $\xi_q = \varepsilon + (N_2 + N_\sigma)t_q - \mu$ – это спектр хаббардовских фермионов, а N_i – числа заполнения одноузельных состояний с двумя электронами (N_2) и с одним электроном с проекцией спина σ (N_σ).

КИРАЛЬНАЯ $d + id$ СВЕРХПРОВОДЯЩАЯ ФАЗА

На треугольной решетке, при учете взаимодействий только из первых двух координационных сверх фурье-образы J_q и V_q будут иметь вид

$$\begin{aligned}
J_q &= 2J_1\left[\cos(q_y) + 2\cos\left(\frac{\sqrt{3}q_x}{2}\right)\cos\left(\frac{q_y}{2}\right)\right] + \\
&+ 2J_2\left[\cos\left(\sqrt{3}q_x\right) + 2\cos\left(\frac{\sqrt{3}q_x}{2}\right)\cos\left(\frac{3q_y}{2}\right)\right], \\
V_q &= 2V_1\left[\cos(q_y) + 2\cos\left(\frac{\sqrt{3}q_x}{2}\right)\cos\left(\frac{q_y}{2}\right)\right] + \\
&+ 2V_2\left[\cos\left(\sqrt{3}q_x\right) + 2\cos\left(\frac{\sqrt{3}q_x}{2}\right)\cos\left(\frac{3q_y}{2}\right)\right].
\end{aligned} \quad (3)$$

Решение уравнения для сверхпроводящего параметра порядка с $d + id$-типом симметрии будем искать в виде

$$\Delta_2(q) = 2\Delta_{21}^0\varphi_{21}(q) + 2\Delta_{22}^0\varphi_{22}(q), \quad (4)$$

где киральные базисные функции

$$\begin{aligned}
\varphi_{21}(q) &= \cos q_y - \cos\left(\frac{\sqrt{3}q_x}{2}\right)\cos\left(\frac{q_y}{2}\right) + \\
&+ i\sqrt{3}\sin\left(\frac{\sqrt{3}q_x}{2}\right)\sin\left(\frac{q_y}{2}\right), \\
\varphi_{22}(q) &= \cos\sqrt{3}q_x - \cos\left(\frac{\sqrt{3}q_x}{2}\right)\cos\left(\frac{3q_y}{2}\right) - \\
&- i\sqrt{3}\sin\left(\frac{\sqrt{3}q_x}{2}\right)\sin\left(\frac{3q_y}{2}\right).
\end{aligned} \quad (5)$$

соответствуют первой и второй координационным сферам [4].

Система уравнений для нахождения температурной зависимости кирального параметра примет вид

$$\begin{aligned}
&\left(1 - A_{11}\right)\Delta_{21}^0 - A_{12}\Delta_{22}^0 = 0, \\
&-A_{21}\Delta_{21}^0 + \left(1 - A_{22}\right)\Delta_{22}^0 = 0.
\end{aligned} \quad (6)$$

Входящие в эти уравнения функции A_{ij} определяются выражениями

$$\begin{aligned}
A_{11} &= \frac{2J_1 - V_1}{N}\sum_q \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}q_x + \frac{1}{2}q_y\right) \times \\
&\times \left[\cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}q_x + \frac{1}{2}q_y\right) - \cos q_y\right]\frac{\operatorname{th}\left(E_q/2T\right)}{E_q}, \\
A_{12} &= \frac{2J_1 - V_1}{N}\sum_q \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}q_x + \frac{1}{2}q_y\right) \times \\
&\times \left[\cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}q_x - \frac{3}{2}q_y\right) - \cos\sqrt{3}q_x\right]\frac{\operatorname{th}\left(E_q/2T\right)}{E_q}, \\
A_{22} &= \frac{2J_2 - V_2}{N}\sum_q \cos\left(\sqrt{3}q_x\right) \times \\
&\times \left[\cos\left(\sqrt{3}q_x\right) - \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}q_x + \frac{3}{2}q_y\right)\right]\frac{\operatorname{th}\left(E_q/2T\right)}{E_q}, \\
A_{21} &= \frac{2J_2 - V_2}{N}\sum_q \cos\left(\sqrt{3}q_x\right) \times \\
&\times \left[\cos q_y - \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}q_x + \frac{1}{2}q_y\right)\right]\frac{\operatorname{th}\left(E_q/2T\right)}{E_q}.
\end{aligned} \quad (7)$$

ВЛИЯНИЕ КУЛОНОВСКИХ КОРРЕЛЯЦИЙ

Для описания топологических особенностей сверхпроводящей фазы используется индекс $Q = \frac{1}{8\pi}\sum_\Delta \vec{m}_1[\vec{m}_2 \times \vec{m}_3]$ [4], где суммирование проводится по всем треугольным плакетам, а векторы $\vec{m}_1$, $\vec{m}_2$, $\vec{m}_3$ вычисляются в вершинах таких плаке-

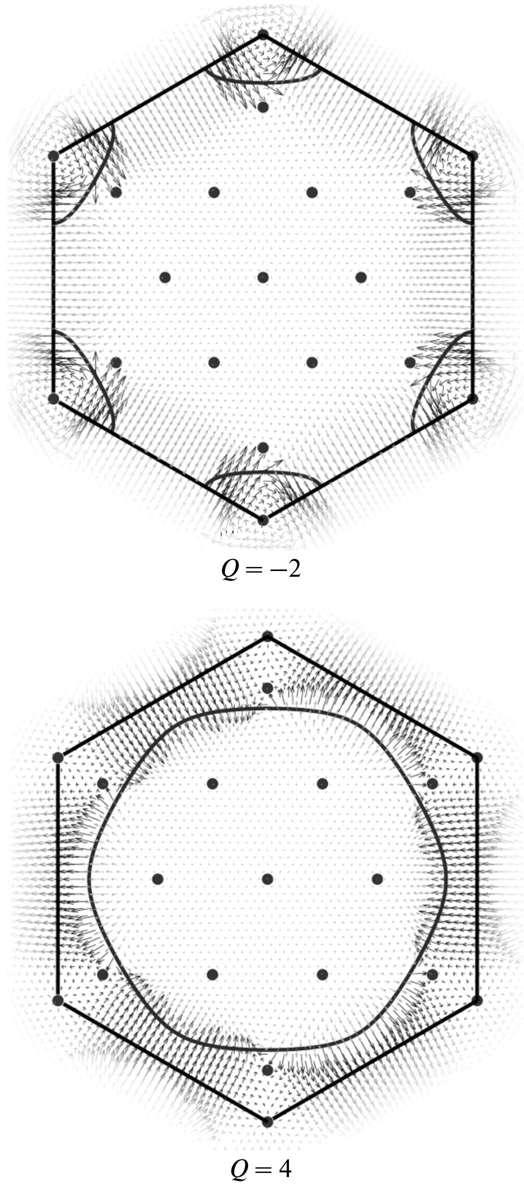

Рис. 1. Поведение вектора $\vec{m}$ при различном расположении нодальных точек СПП и поверхности Ферми.

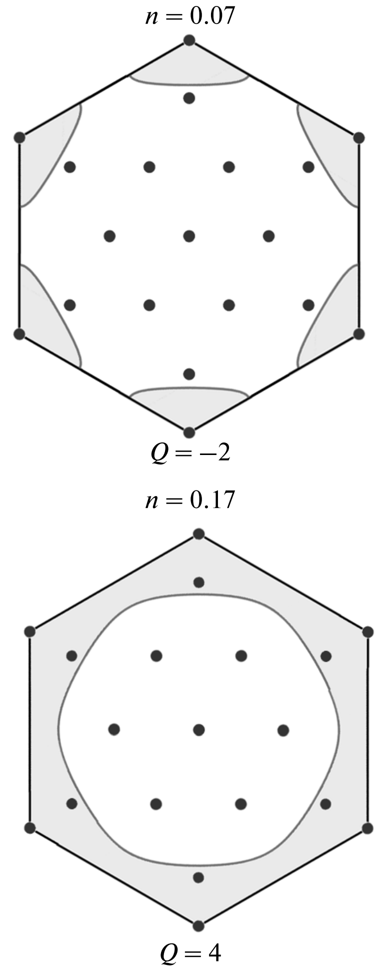

Рис. 2. Положение нодальных точек для различных значенияй концентрации при параметрах системы $t_1 = 1$, $t_2 = t_3 = 0$, $J_1 = 0.3$, $J_2 = 0.2$, $V_1 = 0.35$, $V_2 = 0.1$.

тов; $\vec{m} = \left\{\frac{Re\Delta_2(q)}{E_q}, \frac{-Im\Delta_2(q)}{E_q}, \frac{\xi_q}{E_q}\right\}$ [9]. Значение Q отражает топологическую структуру сверхпроводящей фазы и связано с расположением нодальных точек $\Delta_2(q)$. При изменении концентрации, если происходит пересечение контуром Ферми нормальной фазы нодальных точек, то реализуется топологический квантовый переход (см. рис. 1, 2).

Учет кулоновских корреляций может привести к индуцированию топологического перехода при изменении концентрации электронов x. При учете двух инвариантов положение нулей зависит от отношения амплитуд Δ_{21}^0 и Δ_{22}^0 комплексного параметра $\Delta_2(q) = 2\Delta_{21}^0\varphi_{21}(q) + 2\Delta_{22}^0\varphi_{22}(q)$. В работе [5] были рассмотрены возможные сценарии эволюции системы нодальных точек при изменении концентрации электронов в зависимости от соотношения интенсивности взаимодействия в первой $(2J_1 - V_1)$ и второй $(2J_2)$ координационных сферах.

Включение кулоновского отталкивания V_2 приводит к тому, что интенсивность взаимодействия во второй координационной сфере задается уже параметром $(2J_2 - V_2)$. Тогда при слабом значении V_2 $(V_2 \le J_2)$ будет изменяться область параметров, в которой может наблюдаться квантовый топологический переход.

При $V_2 \ge 2J_2$ сверхпроводящая фаза либо будет полностью подавляться, либо в СПП основном вклад будет вносить инвариант $\varphi_{21}(q)$, который не имеет нодальных точек внутри зоны, и, следовательно, сверхпроводящая фаза будет щелевой.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для *t*-*J*-*V*-модели на треугольной решетке показано, что кулоновское отталкивание между электронами, находящимися на следующих за ближайшими узлами приводит к уменьшению области параметров, при которых реализуется бесщелевая сверхпроводящая фаза.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты № 13-02-00523 и 14-02-31237).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Takada K., Sakurai H., Takayama-Muromachi E., Izumi F., Dilanian R.A., Sasaki T.* // Nature. 2003. V. 422. № 6. P. 53.
2. *Zheng G.-q., Matano K., Meng R.L., Cmaidalka J., Chu C.W.* // J. Physics: Condens. Matter. 2006. V. 18. № 5. P. L63.
3. *Yang H.D., Lin J.-Y., Sun C.P., Kang Y.C., Huang C.L., Takada K., Sasaki T., Sakurai H., and Takayama-Muromachi E.* // Phys. Rev. B. 2005. V. 71. № 2. 020504R.
4. *Zhou S., Wang Z.* // Phys. Rev. Lett. 2008. V. 100. № 21. P. 217002.
5. *Вальков В.В., Валькова Т.А., Мицкан В.А.* // Письма в ЖЭТФ. 2015. Т. 102. № 6. С. 399.
6. *Зайцев Р.О.* // ЖЭТФ. 1975. Т. 68. № 1. С. 207; 1976. Т. 70. № 3. С. 1100.
7. *Зайцев Р.О.* // Диаграммные методы в теории сверхпроводимости и ферромагнетизма. М.: Едиториал УРСС, 2004. С. 176.
8. *Plakida N.M.* // High-temperature superconductivity. Berlin: Springer. 1995. P. 230.
9. *Anderson P.W.* // Phys.Rev. 1958. V. 110. № 4. P. 827; 1958. V. 112. № 6. P. 1900.