

Федеральное государственное бюджетное научное учреждение
«Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр
Сибирского отделения Российской академии наук» (ФИЦ КНЦ СО РАН) —
Обособленное подразделение «Институт физики им. Л. В. Киренского
Сибирского отделения Российской академии наук» (ИФ СО РАН)



На правах рукописи

Комаров Константин Константинович

**ЛОНДОНОВСКАЯ ГЛУБИНА ПРОНИКНОВЕНИЯ
В АНСАМБЛЕ СПИН-ПОЛЯРОННЫХ
КВАЗИЧАСТИЦ В КУПРАТНЫХ
ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ
СВЕРХПРОВОДНИКАХ**

Специальность 01.04.07 —

«Физика конденсированного состояния»

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук
Дзедзисашвили Дмитрий Михайлович

Красноярск — 2020

Оглавление

	Стр.
Введение	4
Глава 1. Современное состояние исследований	12
1.1 Купратные высокотемпературные сверхпроводники	12
1.2 Электронное строение купратов	14
1.3 Теоретические модели для купратов	16
1.3.1 Трех зонная $p-d$ модель Эмери	18
1.3.2 Спин-фермионная модель	21
1.4 Концепция спин-поляронной квазичастицы	25
1.4.1 Реализация концепции спинового полярона на основе проекционной техники	27
1.4.2 Успехи спин-поляронной концепции	29
1.5 Резюме	32
Глава 2. Отклик спин-поляронной квазичастицы на слабое магнитное поле в сверхпроводящей фазе	34
2.1 Введение	34
2.2 Спин-фермионная модель с учетом векторного потенциала магнитного поля	36
2.3 Сверхпроводящая плотность тока в поле векторного потенциала .	39
2.4 Резюме	41
Глава 3. Лондоновская глубина в ансамбле спиновых поляронов в купратных сверхпроводниках	42
3.1 Введение	42
3.2 Уравнения для функций Грина с учетом поля векторного потенциала и спин-поляронный спектр в нормальной-фазе	45
3.3 Спектр спиновых поляронов в сверхпроводящей фазе с учетом магнитного поля	49
3.4 $d_{x^2-y^2}$ -волновой сверхпроводящий параметр порядка	53
3.5 Уравнения самосогласования	54

	Стр.
3.6 Лондоновская глубина проникновения: результаты и обсуждения	56
3.6.1 Точка перегиба в температурной зависимости лондоновской глубины	58
3.7 Резюме	62
Глава 4. Влияние кулоновского взаимодействия на лондоновскую глубину в купратных сверхпроводниках	64
4.1 Введение	64
4.2 Спин-фермионная модель с учетом кулоновского взаимодействия	67
4.3 Компоненты сверхпроводящего параметра порядка и спин-поляронный спектр в магнитном поле с учетом кулоновского взаимодействия	69
4.4 Сверхпроводящий d -волновой параметр порядка. Самосогласованные уравнения	72
4.5 Влияние кулоновского взаимодействия на температурную зависимость лондоновской глубины	74
4.5.1 Количественное сопоставление теоретической и экспериментальной температурных зависимостей лондоновской глубины в купратах	76
4.6 Резюме	79
Заключение	81
Список литературы	83
Список рисунков	103
Список таблиц	105
Приложение А. Расчет элементов энергетической матрицы $D(k)$	106
Приложение Б. Дополнительные функции	110
Б.1 Миноры матриц $M^{(3)}(k, \omega)$ и $\bar{M}^{(3)}(k, \omega)$	110
Б.2 Определение функции $\mathfrak{R}(k, \omega)$	111
Б.3 Определение переменных, входящих в функции Грина	112
Б.4 Определение матрицы $w(k, \omega)$	115

Введение

Существующая потребность в исследованиях необычных свойств купратных высокотемпературных сверхпроводников обусловлена постоянным расширением области их практического применения. Одним из важнейших нерешенных вопросов, стимулирующих поисковые работы как теоретическими, так и экспериментальными методами, является вопрос о механизме куперовской неустойчивости в этих системах. Полезная информация о природе сверхпроводимости в купратах может быть получена при изучении, например, факторов, приводящих к изменению критической температуры, таких как химическое легирование, давление. Так, экспериментально установлено, что изменение концентрации носителей тока приводит к модификации амплитуды парного взаимодействия.

Эффективный экспериментальный метод, позволяющий изучать детали механизма нетрадиционной сверхпроводимости, основан на анализе модификации температурной зависимости лондоновской глубины (или глубины проникновения магнитного поля) при легировании. Температурная и концентрационная зависимости обратного квадрата глубины проникновения позволяет, в частности, судить о типе симметрии сверхпроводящего параметра порядка, а наличие особенностей в температурном поведении может указывать на проявление микроскопических механизмов куперовского спаривания.

Теоретическое описание свойств купратных высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) должно непременно учитывать сильные электронные корреляции (СЭК). К настоящему времени достигнуто понимание того, что именно СЭК индуцируют значительную связь между зарядовыми и спиновыми степенями свободы и, как следствие, играют особую роль в установлении фазы сверхпроводимости в купратах. Однако вопрос о конкретном микроскопическом механизме куперовского спаривания до сих пор остается дискуссионным. Ранее в работах А. Ф. Барабанова с соавторами в рамках микроскопического подхода была предложена спин-поляронная концепция для описания свойств дырочно-легированных купратных ВТСП. Этот подход, корректно учитывающий отмеченную выше сильную спин-фермионную связь, оказался весьма успешным при описании купратных ВТСП как в нормальной, так и в сверхпроводящей фазе.

В данной диссертационной работе в рамках спин-поляронного механизма высокотемпературной сверхпроводимости купратов исследуется модификация температурной зависимости лондоновской глубины при легировании. С учетом сказанного выше тема исследования представляется **актуальной**.

Целью данной работы является исследование особенностей температурной и концентрационной зависимостей лондоновской глубины в дырочно-легированных купратных высокотемпературных сверхпроводниках в рамках спин-поляронной концепции.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие **задачи**:

1. разработать подход для расчета отклика спин-поляронных квазичастиц на слабое магнитное поле в сверхпроводящей фазе;
2. получить самосогласованные уравнения для сверхпроводящего параметра порядка и химического потенциала в слабом магнитном поле;
3. рассчитать и проанализировать температурную зависимость лондоновской глубины в ансамбле спин-поляронных квазичастиц;
4. изучить влияние кулоновского взаимодействия на температурную зависимость лондоновской глубины в ансамбле спин-поляронных квазичастиц.

Научная новизна:

1. Впервые в рамках спин-поляронной концепции получено выражение для сверхпроводящей плотности тока спин-поляронных квазичастиц.
2. Впервые показано, что из сопоставления теоретической и экспериментальной зависимостей лондоновской глубины от температуры могут быть получены количественные оценки величины параметра спин-фермионной связи.
3. Впервые показано, что точка перегиба в температурной зависимости обратного квадрата лондоновской глубины обусловлена особенностями спин-поляронного спектра, связанными с наличием дырочного кармана на поверхности Ферми.
4. Впервые показано, что учет кулоновского взаимодействия в спин-поляронном подходе не приводит к функциональному изменению температурной зависимости лондоновской глубины.

5. Впервые в рамках спин-поляронного подхода получено общее выражение для квадрата функции щели в сверхпроводящей фазе через сумму квадратов модулей всех возможных амплитуд параметра порядка.

Практическая значимость результатов, полученных в ходе выполнения исследования, предполагает их использование не только в лабораториях университетов и академических институтов, но и послужит основой для поиска новых материалов с расширенными функциональными возможностями для использования в электронных устройствах нового поколения. В частности, обнаружение точки перегиба в расчетной температурной зависимости лондоновской глубины позволит стимулировать постановку соответствующих экспериментов не только в ВТСП медно-оксидной группы, но и в других системах с сильной связью между спиновыми и зарядовыми степенями свободы.

Методология и методы исследования. Для решения задач исследования предполагается использование метода уравнений движения для запаздывающих двухвременных температурных функций Грина и проекционной техники Цванцига-Мори с введением расширенного набора базисных операторов. Особенность использования этой техники в данном случае заключается в получении замкнутой системы уравнений для функций Грина, построенных на операторах, корректно учитывающих сильную спин-фермионную связь квази-частиц в CuO_2 -плоскости.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Выражение для сверхпроводящей плотности тока спин-поляронных квази-частиц.
2. Количественная оценка параметра спин-фермионной связи может быть получена при сопоставлении теоретической и экспериментальной зависимостей лондоновской глубины от температуры.
3. Причина появления точки перегиба в температурной зависимости обратного квадрата лондоновской глубины, наблюдаемая во многих экспериментах, обусловлена особенностями спин-поляронного спектра, связанными с наличием дырочного кармана на поверхности Ферми.
4. Кулоновское взаимодействие не влияет качественно на вид температурной зависимости обратного квадрата лондоновской глубины, а количественно проявляется только в уменьшении критической температуры сверхпроводимости.

5. Аналитическое выражение для функции сверхпроводящей щели, выражающееся через сумму квадратов всех возможных амплитуд параметра порядка.

Достоверность результатов, научных положений, выводов и рекомендаций, полученных и сформулированных в диссертации, обоснована корректностью использования математического аппарата, контролируемостью применяемых приближений, их согласием с результатами исследований других авторов, правильностью предельных переходов к известным результатам, а также находятся в согласии с имеющимися экспериментальным данным.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались на: Конкурс-конференции ФИЦ КНЦ СО РАН для молодых ученых, аспирантов и студентов, Секция «Физика», Красноярск, 2018, 2019; Двадцать четвертой Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых, ВНКСФ-24, Томск, 2018; V Международной молодежной научной конференции. Физика. Технологии. Инновации. ФТИ-2018, Екатеринбург, 2018; International Conference for Professionals & Young Scientists "LOW TEMPERATURE PHYSICS", Kharkiv, Ukraine, 2018, 2019; 9th JEMS Conference 2018, Mainz, Germany, 2018; VII Euro-Asian Symposium "Trends in Magnetism", Ekaterinburg, 2019.

Личное участие автора в получении результатов, изложенных в диссертации, выразилось в постановке части задач исследования; в проведении всех аналитических и численных расчетов, в анализе и интерпретации всех полученных данных; в подготовке научных статей по теме исследования; в формулировке научных положений и выводов.

Объем, структура и содержание работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и двух приложений. Полный объем диссертации составляет 116 страниц, включая 18 рисунков и 4 таблицы. Список литературы содержит 198 наименований.

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 11 печатных изданиях, 3 из которых изданы в журналах, рекомендованных ВАК, в том числе 3 — в периодических научных журналах, индексируемых Web of Science и Scopus, 8 — в тезисах докладов.

Публикации в журналах из перечня ВАК:

1. Dzebisashvili, D. M. London penetration depth in the ensemble of spin polarons of cuprate superconductors / D. M. Dzebisashvili, **К. К. Комаров** // European Physical Journal B. — 2018. — Vol. 91. — P. 278.
2. Val'kov, V. V. Strong spin-charge coupling and its manifestation in the quasiparticle structure, cooper instability, and electromagnetic properties of cuprates / V. V. Val'kov, D. M. Dzebisashvili, M. M. Korovushkin, **К. К. Комаров**, A. F. Barabanov // Journal of Experimental and Theoretical Physics. — 2019. — Vol. 128. — P. 885.
3. Komarov, K. K. Effect of Coulomb repulsion on the London penetration depth in cuprate superconductors / **К. К. Комаров**, D. M. Dzebisashvili // Physica Scripta. — 2020. — Vol. 95. — P. 065806.

Публикации в сборниках трудов и тезисов конференций:

1. **Комаров, К. К.**, Дзедбисашвили, Д. М. Температурная зависимость магнитной глубины проникновения в купратах в рамках спин-поляронного подхода // Конкурс-конференции ФИЦ КНЦ СО РАН для молодых ученых, аспирантов и студентов, Секция «Физика» (5 апреля 2018, Красноярск, Россия). Сборник тезисов. 2018. — С. 15.
2. **Комаров, К. К.**, Дзедбисашвили, Д. М. Особенности температурной зависимости магнитной глубины проникновения в ансамбле спиновых поляронов // Двадцать четвертая Всероссийская научная конференция студентов-физиков и молодых ученых, ВНКСФ-24 (31 марта – 7 апреля 2018, Томск, Россия). Сборник тезисов. 2018. — С. 236.
3. **Комаров, К. К.**, Дзедбисашвили, Д. М. Лондоновская глубина проникновения в ансамбле спин-поляронных квазичастиц купратных сверхпроводников // V Международная молодежная научная конференция, посвященная памяти Почетного профессора УрФУ В.С. Кортова. Физика. Технологии. Инновации. ФТИ-2018 (18-24 мая 2018, Екатеринбург, Россия). Сборник тезисов. 2018. — С. 86.
4. **Komarov, K. K.**, Dzebisashvili, D. M. Magnetic penetration depth in cuprates within the spin polaron approach // IX International Conference for Professionals & Young Scientists "LOW TEMPERATURE PHYSICS" dedicated to the 100th anniversary of the National Academy of Sciences of Ukraine (4-8 июня 2018, Харьков, Украина). Conference Program & Book of Abstracts. 2018. — P. 61.

5. **Комаров, К. К.**, Dzebisashvili, D. M. Temperature dependence of the magnetic penetration depth in the ensemble of spin polarons // 9th JEMS Conference 2018 (3-7 сентября 2018, Майнц, Германия). Book of Abstracts. 2018. — P. 431.
6. **Комаров, К. К.**, Дзедзисашвили, Д. М. Влияние кулоновского отталкивания на лондоновскую глубину в купратных сверхпроводниках // Конкурс-конференция ФИЦ КНЦ СО РАН для молодых ученых, аспирантов и студентов, Секция «Физика» (4 апреля 2019, Красноярск, Россия). Сборник тезисов. 2019. — С. 8.
7. **Комаров, К. К.**, Dzebisashvili, D. M. Effect of Coulomb interaction on the London penetration depth in an ensemble of spin polarons in cuprate HTSCs // X International Conference for Professionals & Young Scientists "LOW TEMPERATURE PHYSICS" dedicated to the 100th anniversary of the National Academy of Sciences of Ukraine (3-7 июня 2018, Харьков, Украина). Conference Program & Book of Abstracts. 2019. — P. 51.
8. **Комаров, К. К.**, Dzebisashvili, D. M. The effect of Coulomb repulsion on the London penetration depth in cuprate superconductors // VII Euro-Asian Symposium "Trends in Magnetism" (8-13 сентября 2019, Екатеринбург, Россия). 2019. — P. 76.

Во **введении** обосновывается актуальность темы диссертационного исследования, формулируется цель работы, перечисляются основные положения, выносимые на защиту, отмечается новизна и практическая ценность полученных результатов. Введение также содержит информацию о содержании диссертации по главам, об апробации материалов диссертации и публикациях результатов диссертационных исследований.

Первая глава посвящена литературному обзору современного состояния исследований купратных ВТСП. В разделе **1.1** приводится историческая справка и обзор известных свойств и особенностей купратов, что дает общее представление о том, насколько интенсивно и в каких направлениях изучаются эти материалы. Электронное строение купратных сверхпроводников обсуждается в разделе **1.2**. Затем в разделе **1.3** оцениваются достоинства и недостатки некоторых популярных теоретических моделей для купратов, на основе чего обосновывается выбор трех зонной $p-d$ модели. Далее рассматривается спин-фермионная модель, которая эффективно возникает из $p-d$ модели в режиме СЭК. Концепция спин-поляронной квазичастицы, сформулированная на

базе спин-фермионной модели, рассматривается в разделе 1.4. Обсуждается идея этой концепции, а также проекционная техника, на основе которой спин-поляронный подход реализуются. Затем обсуждаются последние достижения концепции спинового полярона в описании нормальной и сверхпроводящей фазы купратных ВТСП. Завершается глава кратким резюме в разделе 1.5.

Вторая глава направлена на разработку подхода для расчета отклика спин-поляронных квазичастиц на слабое магнитное поле в сверхпроводящей фазе. Для этого в разделе 2.1 приводится краткий обзор эффекта Мейснера и его теоретическое толкование братьями Лондонами, основанное на теории линейного отклика. Обсуждаются известные теоретические подходы к моделированию температурной зависимости лондоновской глубины и возможности, которые дает эта зависимость для анализа состояния сверхпроводимости. Затем в разделе 2.2 представленный в обзорной главе гамильтониан спин-фермионной модели обобщается для учета слабого магнитного поля и в разделе 2.3 вычисляется выражение для сверхпроводящей плотности тока ансамбля спин-поляронных квазичастиц в поле векторного потенциала магнитного поля. Достоинства и особенности разработанного подхода и полученного выражения кратко резюмируются в заключительном разделе 2.4.

В **третьей главе** рассчитывается и анализируется температурная зависимость лондоновской глубины в ансамбле спин-поляронных квазичастиц в купратных ВТСП. Сначала в разделе 3.1 приводится обзор современного состояния экспериментальных исследований температурной и концентрационной зависимостей магнитной глубины проникновения в дырочно-легированных купратах. Далее в разделе 3.2 решается система уравнений для функций Грина и находится спин-поляронный спектр в нормальной фазе. Выражение для спектра спиновых поляронов в сверхпроводящей фазе с учетом магнитного поля выводится в разделе 3.3 и в разделе 3.4 анализируется уравнение на параметр сверхпроводящего порядка. Затем вычисляются выражение для сверхтока и самосогласованные уравнения на параметр порядка и химический потенциал в разделе 3.5. В следующем разделе (разд. 3.6) приводятся и обсуждаются результаты численных расчетов температурной зависимости лондоновской глубины проникновения в ансамбле спин-поляронных квазичастиц. Завершается глава кратким резюме в разделе 3.7.

Четвертая глава диссертации посвящена исследованию влияния кулоновского взаимодействия на лондоновскую глубину в рамках спин-поляронного

подхода к изучению высокотемпературной сверхпроводимости купратов. Во введении этой главы (разд. 4.1) обсуждается проблема учета кулоновского взаимодействия в различных популярных для купратов моделях, после чего формулируется решаемая проблема. Далее в разделе 4.2 гамильтониан спин-фермионной модели обобщается для учета кулоновского отталкивания в системе и, подобно главе 3, вычисляются компоненты сверхпроводящего параметра порядка в магнитном поле и с учетом кулоновского взаимодействия в разделе 4.3. Заканчивается аналитическая часть этой главы разделом 4.4 с выражениями для сверхпроводящей плотности тока и системой самосогласованных уравнений на сверхпроводящий параметр порядка и химический потенциал. В разделе 4.5 представлены результаты численных расчетов, которые демонстрируют эффект учета кулоновского взаимодействия в системе на температурной зависимости обратного квадрата лондоновской глубины. Приводится итоговый анализ спин-поляронной концепции на основе сопоставления теоретических и экспериментальных данных температурной и концентрационной зависимости лондоновской глубины в купратных ВТСП. Глава завершается кратким резюме в разделе 4.6.

В **заклучении** обобщаются основные результаты диссертационной работы.

Глава 1. Современное состояние исследований

1.1 Купратные высокотемпературные сверхпроводники

Класс купратов был открыт Ж. Беднорцом и К. Мюллером [1] в 1986 году. На тот момент полученное соединение имело самую высокую критическую температуру сверхпроводимости (T_c), около 30 К. На рисунке 1.1 показана эволюция T_c с момента открытия сверхпроводимости. На рисунке хорошо отслеживается революционный момент в истории сверхпроводимости после открытия класса купратных соединений. Преодолев температуру кипения жидкого азота (77 К — на рисунке 1.1 горизонтальная кривая "Liquid Nitrogen"), такие сверхпроводники стали именоваться высокотемпературными сверхпроводниками (ВТСП).

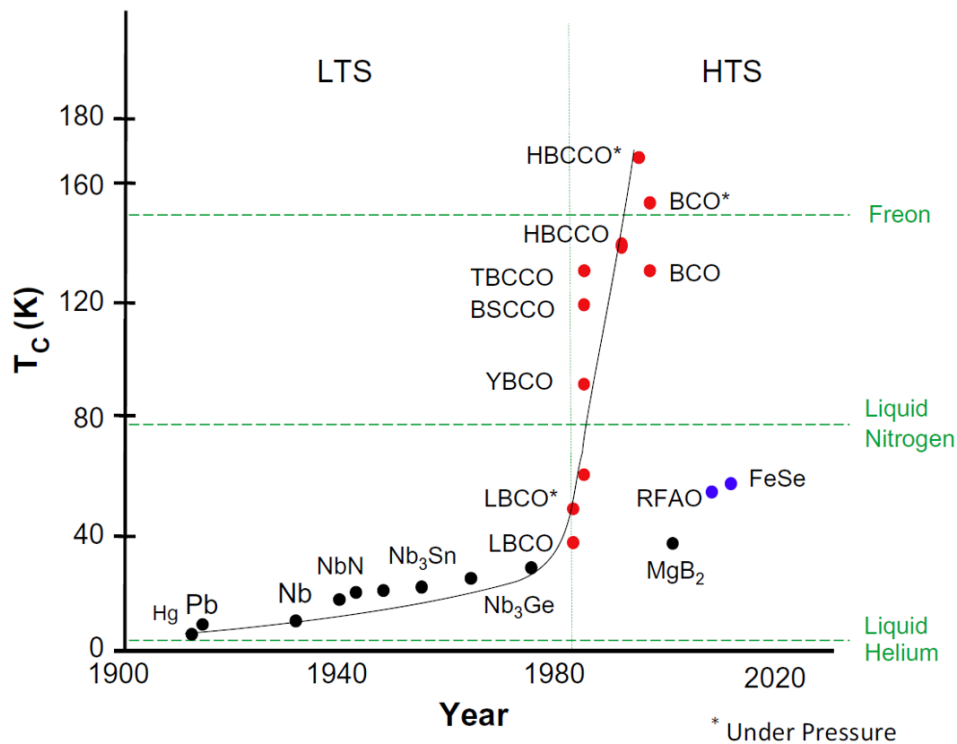


Рисунок 1.1 — (Цветной онлайн) Эволюция критических температур с момента открытия сверхпроводимости (см. обзоры [2; 3]).

На сегодняшний день только купратам удалось достичь значительной величины T_c , например, в соединении $\text{HgBa}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{6+x}$ [4] в нормальных условиях $T_c = 133$ К, в $\text{HgBa}_2\text{Ca}_{m-1}\text{Cu}_m\text{O}_{2m+2+\delta}$ ($m = 1, 2, 3$) [5] при давлении 45 ГПа

$T_c = 164$ К. Благодаря этому купратные сверхпроводники стали наиболее востребованными в прикладной физике [6]. В частности, купратные ВТСП нашли свое применение в электроэнергетическом секторе промышленности [7; 8].

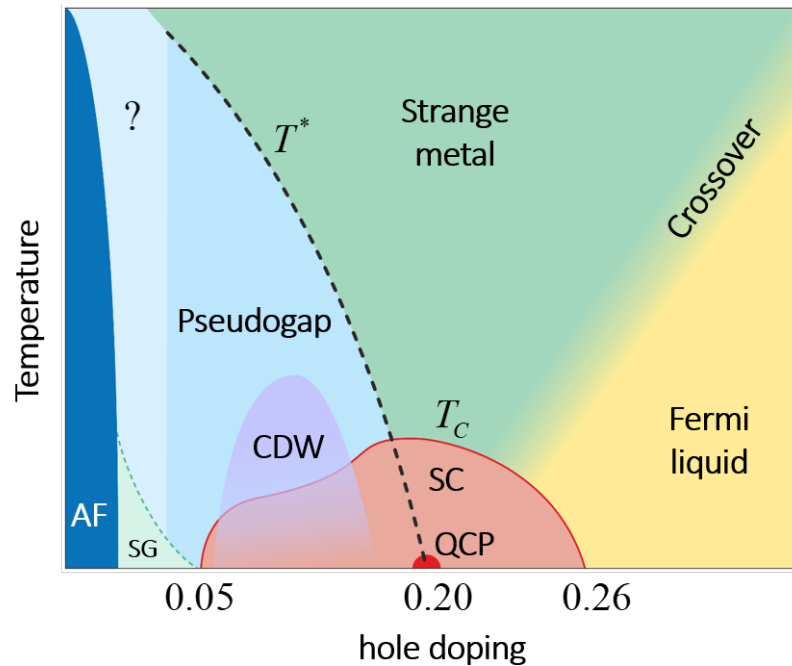


Рисунок 1.2 — (Цветной онлайн) Фазовая диаграмма купратов. При очень низких уровнях дырочного легирования купраты являются изоляторами и антиферромагнетиками (AF). При повышении уровня легирования (в области низких температур) сначала возникает фаза спинового стекла (SG), а затем соединение становится проводящим. В этой области легирования значение температуры определяет, в какой фазе оно будет находиться. При температурах ниже T_c соединение становится сверхпроводящим (SC), при температурах выше T_c , но ниже T^* , оно попадает в фазу псевдощели (Pseudogap). Граница области псевдощели при низких уровнях легирования точно неизвестна ("?"). В псевдощелевой и сверхпроводящей областях также находят фазу волны зарядовой плотности (CDW). Переход между Ферми-жидкостной фазой (Fermi liquid) и фазой странного металла (Strange metal) происходит постепенно (путем кроссовера (Crossover)). "QCP" обозначает квантовую критическую точку, в которой температура T^* стремится к абсолютному нулю. Схематическая фазовая диаграмма построена на основе имеющихся данных [7; 9–18].

С фундаментальной точки зрения повышенный интерес к купратам объясняется наличием в этих материалах ряда необычных свойств, которое формируется, прежде всего, из-за особенностей строения кристаллической структуры этих соединений. Купратные сверхпроводники имеют слоистую структуру,

состоящую из одной или нескольких сверхпроводящих CuO_2 -плоскостей, разделенных непроводящими слоями [19]. Роль этих изолирующих слоев, как считается, состоит в том, чтобы регулировать уровень легирования в проводящей плоскости, в которой также имеется своя особенность — сильная межплоскостная анизотропия [20]. В этих материалах наблюдают различные типы микроскопических взаимодействий, в том числе сильное электрон-фононное взаимодействие [21; 22], спин-орбитальное взаимодействие [23; 24], спин-флуктуационное взаимодействие [25—29] и сильные электронные корреляции [30], которые играют особую роль в формировании сверхпроводящих носителей тока.

Благодаря наличию стольких конкурирующих и дополняющих друг друга взаимодействий, фазовая диаграмма купратов получается очень насыщенной на разного рода фазовых переходах (см. рис. 1.2). В частности, в купратах наблюдаются структурный, магнитный и сверхпроводящий типы фазовых переходов, последний, в свою очередь, допускает смешанные состояния типа спинового стекла или сосуществование ферромагнетизма и сверхпроводимости [31; 32]. Отдельно также выделяют фазу волны плотности заряда (charge density wave (CDW) phase) [18], псевдощелевую фазу (pseudogap phase) [33], описание которой выходит за рамки теории среднего поля [34], и режим "странного" металла (strange metal) [17]. Перечисленное можно найти на рисунке 1.2 схематической фазовой диаграммы купратов, созданной на основе имеющихся данных.

1.2 Электронное строение купратов

Для большинства полученных ВТСП соединений кристаллическая структура обладает схожими чертами [35]: большим размером ячейки; слоистым строением; разнообразным стехиометрическим составом. Но основное сходство между ними — наличие одного, двух и так далее слоев CuO_2 -плоскостей, которые разделяются слоями других атомов (например, Ba, La, Sr). Связь между плоскостями является достаточно слабой, что приводит к сильной анизотропии, поэтому эти материалы имеют квазидвумерный характер сверхпроводимости. Считается, что именно в CuO_2 -плоскостях главным образом разыгрываются межэлектронные взаимодействия [10; 36], приводящие к сверхпроводимости, в

то время как слои с другими атомами являются донорами носителей заряда для этих плоскостей.

Кристаллическая структура CuO_2 -плоскости формируется за счет ионов меди, каждый из которых сильно связан с четырьмя окружающими его ионами кислорода [36]. Критическая температура перехода в сверхпроводящее состояние, как считается, имеет зависимость от числа CuO_2 -плоскостей, находящихся на небольшом расстоянии друг от друга. Например, соединение $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10}$ обладает достаточно высокой критической температурой, $T_c = 125$ К и имеет три таких близко лежащих плоскости [37].

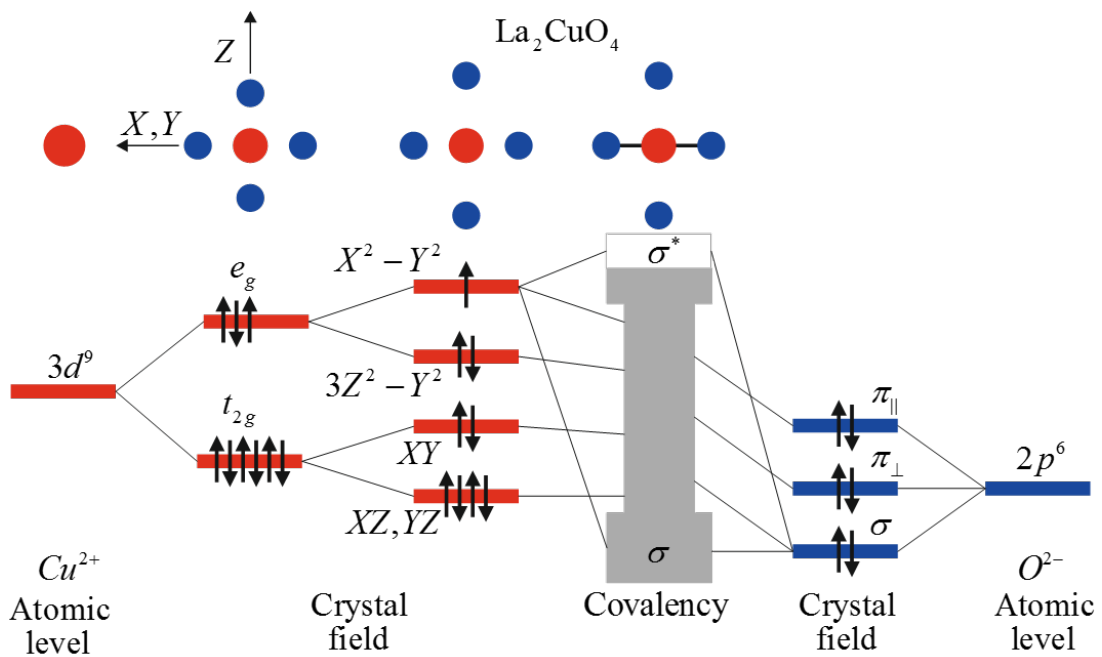


Рисунок 1.3 — (Цветной онлайн) Энергетическая схема, демонстрирующая происхождение гибризованных полос Cu-O, которые возникают во многих оксидах меди, с атомными позициями, схематически показанными сверху. Типичные атомные уровни $3d$ и $2p$ расположены по бокам рисунка. В кристаллическом поле они расщепляются. Количество стрелок (\uparrow, \downarrow) на полосе определяет заселенность различных уровней в нелегированном соединении [38]. Проиллюстрировано влияние ян-теллеровского искажения (Jahn-Teller) октаэдра на кубические состояния Cu e_g и t_{2g} . В центре изображается связующий комплекс полос, где все Cu-состояния гибридизуются с O-состояниями. В тоже время являющееся самым большим $p-d$ взаимодействие σ приводит к формированию широко разделенных связывающих и антисвязывающих Cu-O-полос σ на крайних (верхней и нижней) точках энергетической схемы, и к комплексу других полос между ними [39].

В качестве примера рассмотрим электронную структуру $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (LSCO) [40], одного из первых открытых купратных сверхпроводников. В соединении La_2CuO_4 Cu^{2+} соответствует электронной конфигурации $3d^9$, а в кристаллическом поле орбиталь $3d^9$ разбивается на пять d -орбиталей, как показано на рисунке 1.3.

Четыре орбитали с более низкой энергией: xz , yz , xy , $3z^2 - y^2$, полностью заняты, в то время как орбиталь $x^2 - y^2$ с наибольшей энергией заполнена только наполовину. Из-за близкого уровня энергии d -орбитали меди и $2p$ -орбиталей кислорода между ними существует сильная гибридизация. В результате, самый верхний энергетический уровень включает в себя обе особенности как медной $d_{x^2-y^2}$ -орбитали, так и кислородных $2p_x$ -, $2p_y$ -орбиталей. При легировании La_2CuO_4 ионами стронция Sr^{2+} , они случайным образом замещают ионы La^{3+} и, в результате, часть электронов уходит из CuO_2 -плоскости с ионов кислорода. Следовательно, конфигурация кислорода изменяется с O^{2-} на O^- и таким образом создается одна дырка на $2p$ -орбитали. Из чего можно заключить, что по типу носителей заряда $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ относится к дырочно-легированному классу ВТСП. Соответствующая фазовая диаграмма этого материала может быть найдена в работах [9; 15; 41; 42], схематическая T_c - x -диаграмма этого материала с границей по $T_c \approx 40$ К представлена на рисунке 1.2.

Семейство ВТСП не ограничивается рассмотренным соединением, поскольку разнообразие купратных сверхпроводников довольно обширно. Наиболее полный список сверхпроводящих материалов и их критических температур можно найти в обзорных статьях [3; 43].

1.3 Теоретические модели для купратов

Анализ нормальной фазы купратных сверхпроводников показал Мотт-Хаббардовский тип основного диэлектрического состояния [31; 44–46] в этих материалах. Когда этот вывод был сделан, стало ясно, что изучать купраты при низком легировании следует на основе модели Хаббарда [45] в режиме сильных электронных корреляций (СЭК). В работе [44] подсистема спиновых моментов ионов меди рассматривалась в рамках резонансной теории валентных связей, а возбуждения заряда, возникающие при легировании, интерпретировались как

фермионная подсистема, проявляющая куперовскую неустойчивость. Такой механизм сверхпроводимости имел электронную природу и приводил к высоким значениям критических температур.

Поскольку ряд экспериментальных данных показал, что основная динамика фермиевских возбуждений происходит в CuO_2 -плоскостях [10; 36], для описания нетрадиционной сверхпроводимости в купратах широко использовалась 2D-модель Хаббарда на простой квадратной решетке [47–56]. Важный вопрос о роли дальнедействующей части кулоновского взаимодействия в проблеме нетрадиционной сверхпроводимости был поднят в работе [57]. Авторы отметили, что большинство предыдущих исследований было ограничено короткодействующим кулоновским взаимодействием U , имея в виду вычислительные трудности, связанные с учетом преобразования Фурье межузельного кулоновского отталкивания V_q . Растущий интерес к роли межузельного кулоновского взаимодействия в структуре фазовой диаграммы ВТСП сделал популярной расширенную модель Хаббарда (модель Шубина–Вонсовского [58]) [59–61]. Эта модель учитывает не только одномоментное Хаббардовское отталкивание U , но и взаимодействие электронов в разных участках кристаллической решетки в пределах нескольких координационных сфер. В работах [59–61] была рассчитана фазовая диаграмма, представляющая результат конкуренции сверхпроводящих фаз с различными типами симметрии параметров порядка в борновском приближении со слабой связью.

Однако, вместе с тем, оказалось, что целый ряд важных результатов по нормальным и сверхпроводящим свойствам купратов, полученных в рамках модели Хаббарда и расширенной модели Хаббарда, не учитывали специфические особенности реальной структуры этих материалов. Минимальная реалистичная микроскопическая модель для купратов была предложена Эмери [62]. Трехзонная $p-d$ модель Эмери учитывает реальную структуру CuO_2 -плоскости, которая характеризуется пространственным разделением подсистемы кислородных дырок и подсистемы локализованных спинов меди. Кроме того, эта модель учитывает $d_{x^2-y^2}$ -орбитали ионов меди и p_x - и p_y -орбитали ионов кислорода (см. разд. 1.2). Учитывая важность модели Эмери для дальнейшего, рассмотрим её более подробно.

1.3.1 Трех зонная $p-d$ модель Эмери

Центральная проблема теории высокотемпературной сверхпроводимости связана, как известно, с необходимостью корректного учета СЭК. Они не только качественно меняют характер основного состояния этих материалов в нормальной фазе, но и приводят к новым сценариям куперовской неустойчивости в сверхпроводящей фазе.

Модель Эмери [62; 63] или ее более общий вариант [64] (модель Эмери часто упоминается в литературе как просто трехзонная $p-d$ -модель или расширенная модель Хаббарда) адекватно учитывает как СЭК, так и другие особенности электронной структуры купратов. В частности, в модели Эмери учитываются: а) особенности кристаллографического строения CuO_2 -плоскости; б) дырочные состояния в замкнутых оболочках ионов меди и кислорода; в) сильное одноузельное и межузельные кулоновские отталкивания. Гамильтониан модели Эмери в представлении операторов вторичного квантования может быть записан в форме

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{H}_0 + \hat{T}_{pd} + \hat{T}_{pp} + \hat{U}_p + \hat{V}_{pp}, \quad (1.1)$$

$$\hat{H}_0 = \varepsilon_d \sum_f \hat{n}_f^d + U_d \sum_f \hat{n}_{f\uparrow}^d \hat{n}_{f\downarrow}^d + \varepsilon_p \sum_l \hat{n}_l^p + V_{pd} \sum_{f\delta} \hat{n}_f^d \hat{n}_{f+\delta}^p, \quad (1.2a)$$

$$\hat{T}_{pd} = t_{pd} \sum_{f\delta\sigma} \vartheta(\delta) \left(d_{f\sigma}^\dagger p_{f+\delta,\sigma} + p_{f+\delta,\sigma}^\dagger d_{f\sigma} \right), \quad (1.2б)$$

$$\hat{T}_{pp} = t_{pp} \sum_{l\Delta\sigma\sigma'} \rho(\Delta) p_{l\sigma}^\dagger p_{l+\Delta,\sigma'}, \quad (1.2в)$$

$$\hat{U}_p = U_p \sum_l \hat{n}_{l\uparrow}^p \hat{n}_{l\downarrow}^p, \quad (1.2г)$$

$$\hat{V}_{pp} = \sum_{\substack{l,l' \\ (l \neq l')}} V_{pp}(l-l') \hat{n}_l^p \hat{n}_{l'}^p. \quad (1.2д)$$

Здесь $d_{f\sigma}^\dagger$ ($d_{f\sigma}$) и $p_{l\sigma}^\dagger$ ($p_{l\sigma}$) — операторы рождения (уничтожения) для d - и p -фермионов на узлах меди (f) и кислорода (l) с проекциями спина $\sigma = \pm 1/2$ ($\equiv \uparrow, \downarrow$). Один из четырех векторов, связывающих ион меди с ионами кислорода в CuO_2 -плоскости, обозначается δ : $\delta = \{\pm g_x/2, \pm g_y/2\}$, где $g_x = (a, 0)$ и $g_y =$

$(0, a)$, a — параметр элементарной ячейки. Вектор δ связывает ион меди на узле f с ионами кислорода в положении $l = f + \delta$ (см. рис. 1.4).

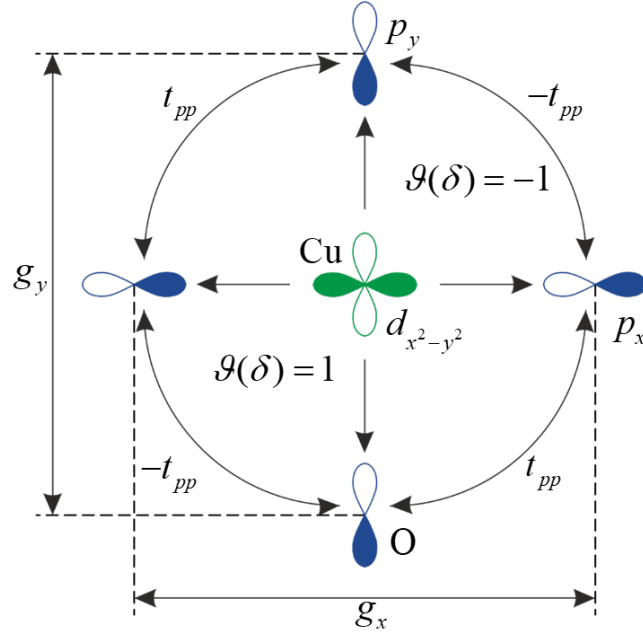


Рисунок 1.4 — (Цветной онлайн) Медная ($d_{x^2-y^2}$) и кислородные (p_x, p_y) орбитали дырок в CuO_2 -плоскости, рассматриваемые в модели Эмери. Затененные части орбиталей имеют положительную фазу, открытые части орбиталей соответствуют отрицательной фазе. Интеграл переноса t_{pp} между различными ионами кислорода показан вместе с его знаком, который зависит от фаз соответствующих кислородных p -орбиталей: $\rho(\Delta) = 1$ для $\Delta = (\pm g_x/2, \pm g_y/2)$ и $\rho(\Delta) = -1$ для $\Delta = (\pm g_x/2, \mp g_y/2)$.

Операторы числа частиц на ионах меди и кислорода определяются как $\hat{n}_f^d = \sum_{\sigma} \hat{n}_{f\sigma}^d = \sum_{\sigma} d_{f\sigma}^{\dagger} d_{f\sigma}$ и $\hat{n}_l^p = \sum_{\sigma} \hat{n}_{l\sigma}^p = \sum_{\sigma} p_{l\sigma}^{\dagger} p_{l\sigma}$. С помощью ε_d и ε_p определены энергии связи $d_{x^2-y^2}$ -дырки с ионом меди и $2p_x$ -, $2p_y$ -дырки с ионом кислорода соответственно. Параметры U_d и U_p в гамильтониане отображают энергию кулоновского отталкивания для двух дырок с противоположными проекциями спина на узле меди и кислорода соответственно; V_{pd} — энергия кулоновского взаимодействия фермионов, находящихся на соседних ионах меди и кислорода, и V_{pp} — параметр кулоновского взаимодействия фермионов на соседних ионах кислорода. t_{pd} — интеграл перескока дырки между ионами кислорода и меди. Функция $\vartheta(\delta)$ учитывает влияние отношения между фазами меди и кислорода на процессы p - d -гибридизации орбиталей. В соответствии с рисунком 1.4 функция $\vartheta(\delta)$ принимает следующие значения при изменении δ : $\vartheta(\delta) = \pm 1$ для $\delta = \pm g_x/2$ или $\delta = \pm g_y/2$ [65]. Параметром t_{pp} обозначен интеграл перескока дырки между ближайшими кислородными орбиталями.

Его знак определяется функцией $\rho(\Delta)$, где вектор Δ связывает ближайшие ионы кислорода. Для выбранной последовательности фаз кислородных орбиталей имеем, что $\rho(\Delta) = 1$ для $\Delta = (\pm g_x/2, \pm g_y/2)$ и $\rho(\Delta) = -1$ для $\Delta = (\pm g_x/2, \mp g_y/2)$, что соответствует знаку t_{pp} на рисунке 1.4.

Все значения параметров модели (1.1) были определены из вычислений зонной структуры La_2CuO_4 [66–68] и представлены в таблице 1. Значение параметра межузельного кулоновского взаимодействия V_{pp} для ближайших соседей может оцениваться в диапазоне 1–2 эВ [69], для следующих за ближайшими соседями это значение должно быть на порядок меньше в соответствии с приведенными рассуждениями в [49; 70]. Стоит также отметить, что в отсутствие

Таблица 1 — Значения параметров для модели Эмери (в эВ)

Параметр	Hybertsen et al. [66]	McMahan et al. [67]	Eskes et al. [68]
Δ_{pd}	3.60	3.50	3.75
t_{pd}	1.30	1.50	1.50
U_d	10.50	9.40	8.80
V_{pd}	1.20	0.80	1.00
t_{pp}	0.65	0.60	0.65
U_p	4.00	4.70	6.00

Примечание — $\Delta_{pd} = \varepsilon_p - \varepsilon_d$.

p – d -гибридизации в случае одной дырки на ячейку, которая локализуется на ионе меди, модель Эмери сводится к модели Гейзенберга [71]

$$\hat{\mathcal{H}} = I \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\vec{S}_i \vec{S}_j - \hat{n}_i^d \hat{n}_j^d / 4 \right) \quad (1.3)$$

с обменным антиферромагнитным взаимодействием, возникающим в четвертом порядке теории возмущений по параметру p – d -гибридизации,

$$I = \frac{4t_{pd}^4}{(\Delta_{pd} + V_{pd})^2} \left(\frac{1}{U_d} + \frac{2}{U_p + 2\Delta_{pd}} \right). \quad (1.4)$$

В выражении (1.3) индексы $\langle i, j \rangle$ обозначают ближайшие соседние ионы меди, \vec{S}_i — оператор спина $S = 1/2$ на узле i . Важный параметр $\Delta_{pd} = \varepsilon_p - \varepsilon_d$ показывает разницу энергий дырок на ионах кислорода и меди. Если $\Delta_{pd} > 0$, то дырка, добавленная в систему, занимает d -орбиталь иона меди. Как указано выше, такая ситуация имеет место в недолегированных материалах, которые имеют одну дырку на узле. Но если на узле появляется еще одна дырка, то в режиме $U_d > \Delta_{pd}$ новая дырка предпочтительнее займет кислородную p -орбиталь, что подтверждается спектроскопией характеристических потерь энергии электронами (Electron Energy Loss Spectroscopy) [72]. В таком случае, важным оказывается эффект гибридизации, который играет существенную роль в формировании сильно связанного спин-фермионного состояния — синглета Жанга–Райса [65]. Жанг и Райс показали, что вблизи атомного предела во втором порядке теории возмущений спиновый синглет имеет более низкую энергию среди двухдырочных состояний. Следовательно, при легировании дырки попадают в это синглетное состояние, что позволяет ограничиться рассмотрением задачи лишь в синглетном подпространстве. Таким образом, становится очевидным, что теория нормального и сверхпроводящего состояния купратов должна строиться при учете именно этой спин-фермионной связи.

1.3.2 Спин-фермионная модель

Режим СЭК, которому, как видно из таблицы 1, соответствуют параметры модели Эмери, определяется из условия малости параметра ковалентного смешивания t_{pd} между d - и p -состояниями ионов меди и кислорода по отношению к энергетической разности Δ_{pd} энергий отмеченных состояний и энергии кулоновского отталкивания U_d двух дырок на одном ионе меди, то есть

$$U_d > \Delta_{pd} \gg t_{pd} > 0. \quad (1.5)$$

В этом режиме применение, например, операторной формы теории возмущений в атомном представлении с привлечением операторов Хаббарда [73; 74] позволяет построить эффективный гамильтониан ($\hat{\mathcal{H}}_{\text{eff}}$), гильбертово пространство которого содержит только гомеополярные состояния ионов меди. При этом

гибридизационные эффекты (см. разд. 1.3.1) трансформируются в дополнительные эффективные взаимодействия. Среди них наиболее существенным является сильная спин-фермионная связь между спинами ионов меди и кислородных дырок. Полученный таким образом $\hat{\mathcal{H}}_{\text{eff}}$ соответствует гамильтониану $\hat{\mathcal{H}}_{\text{sp-f}}$ спин-фермионной модели (СФМ) [71; 75–79]. Его наиболее простая форма, без учета кулоновского взаимодействия кислородных дырок, имеет вид

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{sp-f}} = \hat{H}_h + \hat{T} + \hat{I}, \quad (1.6)$$

где

$$\hat{H}_h = N(\varepsilon_d - 4\tau) + (\varepsilon_p - \mu) \sum_l p_l^\dagger p_l, \quad (1.7a)$$

$$\hat{T} = \sum_{ll'} t_{ll'}^{pp} p_l^\dagger p_{l'} + \sum_{f\delta\delta',\sigma} \zeta_\delta \zeta_{\delta'} p_{f+\delta,\sigma}^\dagger \left(\frac{\tau}{2} + \frac{J}{4} \tilde{S}_f \right) p_{f+\delta',\sigma}, \quad (1.7b)$$

$$\hat{I} = \frac{I}{2} \sum_{f\delta} \vec{S}_f \vec{S}_{f+2\delta}. \quad (1.7b)$$

Первое слагаемое в эффективном низкоэнергетическом гамильтониане $\hat{\mathcal{H}}_{\text{sp-f}}$ (1.7a) обозначает энергию гомеополярных состояний ионов меди ε_d , уменьшенную на величину $\tau = t_{pd}^2/\Delta_{pd}$ за счет эффектов ковалентности с четырьмя ближайшими ионами кислорода; N — число узлов меди в CuO_2 -плоскости, равное числу элементарных ячеек. Второе слагаемое этого выражения описывает энергию связи легированной дырки с ионом кислорода, отсчитанную от химического потенциала μ .

Оператор \hat{T} в $\hat{\mathcal{H}}_{\text{sp-f}}$ описывает кинетические процессы в системе. Здесь параметр $t_{ll'}^{pp}$ отвечает прямым перескокам дырок между ближайшими ионами кислорода l и l' , а его знак определяется так же, как и в исходной модели Эмери (см. рис. 1.4 на стр. 19). Интенсивность этих перескоков определяется интегралом туннелирования $t_{pp} > 0$. В соответствии с таблицей экспериментально установленных значений параметров исходной модели Эмери (см. табл. 1), параметр гибридизации t_{pd} превышает интеграл туннелирования, $t_{pd} > t_{pp}$. Вторая сумма в \hat{T} (1.7b) появляется во втором порядке теории возмущений по параметру t_{pd} -гибридизации. Этот член описывает как обычные перескоки дырок между ионами кислорода, непосредственно примыкающими к иону меди (с туннельным интегралом τ в круглых скобках), так и спин-коррелированные перескоки [80–82] (с параметром J). Указанные взаимодействия продемонстрированы в

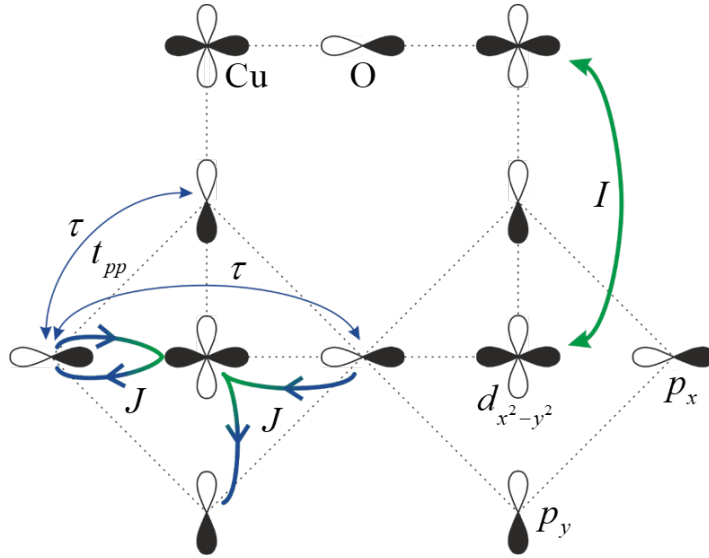


Рисунок 1.5 — (Цветной онлайн) Взаимодействия в спин-фермионной модели в структуре CuO_2 -плоскости. Показаны кислородные $p_x(p_y)$ -орбитали и медные $d_{x^2-y^2}$ -орбитали. Жирная зеленая линия со стрелками обозначает антиферромагнитное обменное взаимодействие I между спинами на ближайших ионах меди. Жирные сине-зеленые линии соответствуют спин-коррелированным перескокам и описывают спин-фермионное взаимодействие J . Тонкие синие линии отвечают как за эффективные дырочные перескоки τ , возникающие во втором порядке теории возмущений по параметру p - d -гибридизации, так и прямые дырочные перескоки между ближайшими ионами кислорода с интегралом t_{pp} .

структуре CuO_2 -плоскости на рисунке 1.5. Во второй сумме (1.76) индекс f обозначает положение иона меди, а векторы δ и δ' связывают узел f с четырьмя ближайшими кислородными узлами: $\delta = \{(g_x/2, 0), (0, g_y/2), (-g_x/2, 0), (0, -g_y/2)\}$ (см. рис. 1.4). Матричный спиновый оператор \tilde{S}_f определяется как произведение векторного спинового оператора \vec{S}_f и вектора $\vec{\sigma} = (\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z)$, составленного из матриц Паули σ^i ($i = x, y, z$):

$$\tilde{S}_f = \vec{S}_f \vec{\sigma} = \begin{pmatrix} S_f^z & S_f^- \\ S_f^+ & -S_f^z \end{pmatrix}. \quad (1.8)$$

Главная особенность этого оператора заключается в том, что он позволяет описать перескоки дырок, сопровождающиеся спин-флип-процессами. При таких перескоках происходит коррелированное изменение проекции спина не только у дырки, но и у локализованного иона меди.

Множители ζ_δ во втором слагаемом выражения (1.76) учитывают знак параметра гибридизации t_{pd} в зависимости от вектора δ , то есть $\zeta_\delta = \mp 1$ для $\delta = \{(\pm g_x/2, 0), (0, \pm g_y/2)\}$.

Связь параметров τ и J с исходной моделью Эмери (1.1) устанавливается соотношениями:

$$\tau = \frac{t_{pd}^2}{\Delta_{pd}} \left(1 - \frac{\Delta_{pd}}{U_d - \Delta_{pd} - 2V_{pd}} \right), \quad (1.9)$$

$$J = \frac{4t_{pd}^2}{\Delta_{pd} + U_p} \left(1 + \frac{\Delta_{pd} + U_p}{U_d - \Delta_{pd} - 2V_{pd}} \right). \quad (1.10)$$

Последний оператор \hat{I} эффективного гамильтониана (1.7в), как уже отмечалось ранее, возникает в четвертом порядке теории возмущений [73; 74] по параметру p - d -гибридизации и описывает антиферромагнитное взаимодействие с параметром I между спинами, локализованными на ближайших ионах меди, как это показано на рисунке рис. 1.5. Определение этого параметра представлено формулой (1.4).

Таким образом, три параметра СФМ: τ , J и I , выражаются через параметры исходной модели Эмери [82–85] формулами: (1.9), (1.10) и (1.4). Соответствующие значения представлены в таблице 2 [86; 87].

Таблица 2 — Значения параметров спин-фермионной модели (в эВ)

Параметр	τ	J	I	t_{pp}
Значение	0.225	2.860	0.118	0.120

Четвертый параметр СФМ — t_{pp} — формально переходит из модели Эмери без изменений. Однако его численное значение, как это видно из таблицы 2, уменьшено в 5 раз по сравнению с его значением 0.60 эВ, обычно используемым в модели Эмери (см. таблицу 1). Необходимость уменьшения значения параметра t_{pp} в СФМ обусловлена результатами предыдущих исследований купратных сверхпроводников как в нормальной фазе [86], так и в сверхпроводящей d -фазе [87].

Подводя итог модельного описания купратов, заметим, что теоретические представления о природе куперовской неустойчивости ВТСП и, в частности, о роли спин-зарядовых флуктуаций в интегральном механизме сверхпроводящего спаривания развивались в основном в рамках модели Хаббарда [88–94], t - J - и t - J^* -моделей [95–101]. Их специфическая особенность определяется тем, что одна и та же система фермионов является носителем зарядовых

и спиновых степеней свободы, что не удовлетворяет реальной специфике кристаллографического строения исследуемых медь кислородных соединений. Этим недостатком лишена спин-фермионная модель, учитывающая пространственную разнесенность спиновой и зарядовой подсистем. При этом параметр спин-фермионного взаимодействия J оказывается самым большим параметром модели. Именно его большое значение ($J \gg t_{pp}, \tau, I$) легло в основу концепции спин-поляронной квазичастицы, а куперовское спаривание таких квазичастиц, обусловленное суперобменным взаимодействием между локализованными спинами, выступило в качестве механизма высокотемпературной сверхпроводимости. Идея спин-поляронной концепции и её успехи в описании нормальной и сверхпроводящей фазы купратов обсуждаются в следующем разделе.

1.4 Концепция спин-поляронной квазичастицы

Применительно к купратным высокотемпературным сверхпроводникам спин-поляронная концепция развивалась в работах [80; 81; 102–105] в рамках СФМ, а также в рамках модели решетки Кондо. Исходная идея этой концепции состоит в том, что элементарное возбуждение в легированном 2D антиферромагнетике может быть представлено как ”голая” частица (электрон или дырка), окруженная облаком спиновых флуктуаций [105]. Эта сложная квазичастица, обладающая ренормированной массой и движущаяся на фоне антиферромагнитного упорядочения, рассматривается как спиновый полярон. Простейшей реализацией такой квазичастицы является локальный спиновый полярон [106; 107], характеристики которого определяются из решения кластерной задачи. После выбора самых низко лежащих по энергии состояний малого кластера можно описать движение локального спинового поларона на фоне антиферромагнитного упорядочения.

Важным обстоятельством, которое учитывалось в цитированных выше работах при разработке спин-поляронного подхода, являлось то, что локализованная спиновая подсистема рассматривалась в состоянии квантовой спиновой жидкости. В этом случае в спиновом пространстве сохраняется сферическая

симметрия и отсутствует дальний магнитный порядок

$$\begin{aligned} \langle S_f^i \rangle = 0, \quad \langle \vec{\sigma}_{\alpha\beta} \cdot \vec{S}_f \rangle = 0, \quad \langle \vec{\sigma}_{\alpha\beta} [\vec{S}_f \times \vec{S}_m] \rangle = 0, \\ i = x, y, z, \quad \alpha, \beta = \uparrow, \downarrow, \end{aligned} \quad (1.11)$$

однако ближние спиновые корреляции сохраняются. Эти корреляции учитываются посредством спиновых корреляционных функций C_j , которые определяются как термодинамическое среднее от двух спиновых операторов, расположенных на расстоянии r_j :

$$C_j = \langle \vec{S}_f \vec{S}_{f+r_j} \rangle,$$

где j — номер координационной сферы узла. В спин-жидкостной фазе эти корреляторы удовлетворяют цепочке равенств:

$$C_j = 3\langle S_f^x S_{f+r_j}^x \rangle = 3\langle S_f^y S_{f+r_j}^y \rangle = 3\langle S_f^z S_{f+r_j}^z \rangle. \quad (1.12)$$

В области низких температур ($\lesssim 100$ К) спиновые корреляционные функции от температуры практически не зависят, но сильно зависят от степени легирования x . Корреляторы C_j как функции x рассчитывались, например, в работе [108] на основе фрустрированной модели Гейзенберга на квадратной решетке в рамках сферически симметричного подхода [109]. В таблице 3 приведены значения корреляционных функций C_j ($j = 1, 2, 3$), полученные в работе [108] для различных значений параметра фрустрации p . Используя эти данные и установив линейную связь между параметром p и степенью легирования x , можно моделировать концентрационную зависимость спиновых корреляторов [86].

Таблица 3 — Значения легирования и соответствующие им значения параметра фрустрации и спиновых корреляционных функций

x	0.03	0.07	0.15	0.22	0.30
p	0.150	0.210	0.250	0.275	0.300
C_1	-0.287	-0.255	-0.231	-0.214	-0.194
C_2	0.124	0.075	0.036	0.009	-0.022
C_3	0.0950	0.0640	0.0510	0.0450	0.0457

Таким образом, при построении фермиевской квазичастицы в купратных ВТСП в рамках спин-поляронного подхода [80; 81; 102; 103; 105] важными

оказываются два фактора. Во-первых, в качестве нулевого приближения используется не голая дырка, а локальный полярон. Во-вторых, в качестве основного состояния локализованной спиновой подсистемы выбирается не антиферромагнитное состояние, а $SU(2)$ -инвариантное состояние квантовой спиновой жидкости.

Для реализации концепции спинового полярона в дырочно-легированных купратах в цитированных выше работах была использована проекционная техника Цванцига–Мори [110–119]. Ввиду того, что эта техника применяется и в данной диссертации (см. главы 3 и 4), в следующем подразделе будут кратко представлены ее основные положения.

1.4.1 Реализация концепции спинового полярона на основе проекционной техники

Основная идея (и одновременно основная тонкость) проекционной техники Цванцига–Мори состоит в введении подходящего набора базисных операторов B_j ($j = 1, \dots, n$), достаточного для описания спектральных и термодинамических свойств изучаемой системы. Целое число n определяет минимальное число таких операторов. Следующий шаг состоит в построении на базисных операторах запаздывающих двухвременных температурных функций Грина ($i, j = 1, \dots, n$):

$$G_{ij}(k, t - t') \equiv \langle\langle B_{ik\sigma}(t) | B_{jk\sigma}^\dagger(t') \rangle\rangle = -i\theta(t - t') \langle [B_{ik\sigma}(t), B_{jk\sigma}^\dagger(t')] \rangle. \quad (1.13)$$

Временная эволюция операторов $B_{ik\sigma}(t)$ определяется представлением Гейзенберга. $\theta(t)$ — ступенчатая функция Хевисайда.

Система $n \times n$ уравнений движения для Фурье-образов функций Грина имеет вид:

$$\omega \langle\langle B_{ik\sigma} | B_{jk\sigma}^\dagger \rangle\rangle_\omega = K_{ij}(k) + \langle\langle [B_{ik\sigma}, \hat{\mathcal{H}}] | B_{jk\sigma}^\dagger \rangle\rangle_\omega, \quad (1.14)$$

где слагаемые $K_{ij}(k)$ определяются как термодинамические средние от антикоммутаторов базисных операторов,

$$K_{ij}(k) = \langle \{ B_{ik\sigma}, B_{jk\sigma}^\dagger \} \rangle. \quad (1.15)$$

Ключевой и наиболее трудоемкий шаг излагаемого метода состоит в проектировании высших функций Грина, полученных в результате коммутации оператора $B_{ik\sigma}$ с гамильтонианом $\hat{\mathcal{H}}$, на функции Грина от базисных операторов (1.13):

$$\langle\langle [B_{ik\sigma}, \hat{\mathcal{H}}] | B_{jk\sigma}^\dagger \rangle\rangle_\omega = \sum_l L_{il}(k) \langle\langle B_{lk\sigma} | B_{jk\sigma}^\dagger \rangle\rangle_\omega. \quad (1.16)$$

Здесь $L_{il}(k)$ представляет собой (i, l) -элемент матрицы произведения $D(k)K^{-1}(k)$, а матрица $D(k)$ определяется элементами

$$D_{ij}(k) = \langle\langle [B_{ik\sigma}, \hat{\mathcal{H}}], B_{jk\sigma}^\dagger \rangle\rangle. \quad (1.17)$$

Элементы матрицы $K(k)$ задаются выражением (1.15).

В результате для базисных функций Грина может быть получена замкнутая система уравнений движения:

$$\omega G(k, \omega) = K(k) + D(k)K^{-1}(k)G(k, \omega), \quad (1.18)$$

где матричная запаздывающая функция Грина определяется элементами $G_{ij}(k, \omega) = \langle\langle B_{ik\sigma} | B_{jk\sigma}^\dagger \rangle\rangle_\omega$. Эта система может быть решена в матричной форме

$$G(k, \omega) = M(k, \omega)^{-1}K(k), \quad (1.19)$$

где $G(k, \omega)$ — матрица функций Грина, а

$$M(k, \omega) = \omega - D(k)K^{-1}(k). \quad (1.20)$$

Энергетический спектр квазичастиц определяется полюсами функций Грина и может быть получен как решения дисперсионного уравнения:

$$\det M(k, \omega) = 0. \quad (1.21)$$

Как было показано в работах [81; 104], для корректного описания спектральных свойств нормальной фазы купратов, помимо затравочных фермиевских операторов a_k и b_k , отвечающих состояниям голой дырки на, соответственно, p_x - и p_y -орбиталях двумерной CuO_2 -плоскости, в базисный набор необходимо включить еще один, третий оператор, обозначаемый далее посредством L_k и определяемый выражением: $L_{f\sigma} = \frac{1}{2} \sum_\delta (\tilde{S}_f p_{f+\delta})_\sigma$. Его структура будет подробно обсуждаться в следующей главе, а здесь отметим, что

именно этот оператор позволяет учитывать сильную связь между локализованным спином и дыркой на четырех ближайших ионах кислорода. В результате оказывается, что минимальный набор базисных операторов, необходимый для корректного описания нормальной фазы купратов, должен состоять из трех операторов:

$$B_{1k} = a_{k\uparrow}, \quad B_{2k} = b_{k\uparrow}, \quad B_{3k} = L_{k\uparrow}. \quad (1.22)$$

Адекватность применения проекционной техники для СФМ с базисом операторов (1.22) исследовалась путем сравнения результатов при $T = 0$ [81] со спектральной функцией голой дырки, получаемой в рамках самосогласованного борновского приближения для локального спинового полярона [102]. Полученный в рамках этого приближения квазичастичный пик и его интенсивность оказались в хорошем согласии с нижней зоной сложного полярона в приближении проекционного метода. Что касается верхних зон, соответствующих возбужденным состояниям, то они эффективно описывают некогерентную часть спектральной функции голой дырки.

Также в работе [104] обсуждалась возможность описания сверхпроводимости в спин-поляронном подходе. В рамках теории среднего поля для модели решетки Кондо [120; 121] была продемонстрирована важность учета аномальных функций Грина, построенных с использованием третьего базисного оператора. Особо было отмечено, что без учета таких функций Грина описать сверхпроводимость невозможно. Фактически это означает, что механизм сверхпроводящего спаривания в данном подходе обусловлен сильным взаимодействием электронов с возбуждениями антиферромагнитной спиновой подсистемы.

1.4.2 Успехи спин-поляронной концепции

Разработанный в цитированных выше статьях спин-поляронный подход был успешно применен для описания некоторых важных свойств дырочно легированных купратных сверхпроводников. Так, в работе [104] концепция спин-поляронных квазичастиц использовалась для описания зарядовых возбуждений в легированном 2D антиферромагнетике и показала хорошее согласие с известными результатами ARPES-экспериментов в широком интервале легирования.

В другой работе [122] в рамках СФМ было исследовано расщепление нижней зоны локального полярона, что позволило описать резкое падение интенсивности ARPES-пиков при изменении квазиимпульса от $(\pi/2, \pi/2)$ к (π, π) или $(0, 0)$, а также возможность существования "теневого зоны" [123], которая возникает из-за рассеяния на антиферромагнитных флуктуациях.

В работах [80; 86] было показано, что в отличие от моделей сильной связи с большим числом подгоночных параметров (см., например, [124]), в СФМ, рассматриваемой в рамках спин-поляронной концепции, модификация энергетического спектра и поверхности Ферми обусловлены не соотношением между интегралами перескока, а сильной корреляцией между подсистемой локализованных спинов ионов меди в состоянии квантовой спиновой жидкости и подсистемой кислородных дырок, а также изменением корреляционных характеристик этой квантовой спиновой жидкости при легировании. При этом в работе [86] использовался всего один подгоночный параметр — интеграл перескока дырок (t_{pp}), который подбирался на основе сравнения с экспериментальными данными [124] на $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. В этой связи отметим, что, например, авторам работы [124] для достижения удовлетворительного согласия между рассчитанной в приближении среднего поля поверхностью Ферми и Ферми-поверхностью, восстановленной из экспериментальных данных, потребовалось для каждого уровня концентрации дырок подбирать свой набор из четырех параметров — трех интегралов перескока: t_1 , t_2 , t_3 , и сдвигки энергии ϵ_0 .

Успехи концепции спинового полярона при описании свойств нормального состояния купратов сделали актуальным вопрос об описании сверхпроводящей фазы в условиях, когда куперовская неустойчивость развивается не для затравочных фермионов, а в подсистеме спиновых поляронов [125]. В работе [126] было показано, что ансамбль спин-поляронных квазичастиц, возникающий в простейшей модели купратных сверхпроводников — 2D решетке Кондо в режиме СЭК, обладает куперовской неустойчивостью с $d_{x^2-y^2}$ -типом симметрии параметра порядка. В роли константы куперовского спаривания выступал интеграл обменного взаимодействия между локализованными спинами. Было показано, что трехцентровые взаимодействия в спин-поляронном ансамбле, находящемся в спин-жидкостной фазе подсистемы локализованных спинов, в отличие от $t-J^*$ -модели [97] способствуют куперовскому спариванию и

обеспечивают реализацию сверхпроводящей фазы с высокими критическими температурами.

Позже в работе [127] теория сверхпроводимости ансамбля спиновых поляронов была развита в спин-фермионной модели. Было показано, что сильная спин-фермионная связь, возникающая в результате гибридизационного смешивания состояний ионов меди и кислорода в исходной модели Эмери, оказывает влияние не только на формирование спин-поляронных квазичастиц [104], но и обеспечивает эффективное притяжение между ними через обменное взаимодействие (I). Это индуцирует куперовскую неустойчивость с d -волновым спариванием в системе спиновых поляронов. В рамках такого подхода была построена фазовая $T-x$ -диаграмма [127]. Расчеты показали, что область фазовой диаграммы, где наблюдается куперовская неустойчивость с d -типом симметрии параметра, представляет собой купол, форма которого хорошо согласуется с экспериментальным как по максимальной критической температуре T_c , так и по области легирования x . Показано, что в этом случае в качестве константы связи выступает обменный интеграл I , описывающий интенсивность обменного взаимодействия между двумя локализованными спинами.

В работе [128] в рамках СФМ была проанализирована возможность возникновения сверхпроводящего s -спаривания спин-поляронных квазичастиц. Расчеты зависимостей температуры перехода в сверхпроводящую фазу от легирования показали, что во всей области легирования решения уравнений самосогласования соответствуют только $d_{x^2-y^2}$ -фазе, тогда как решения для s -фазы отсутствуют. Этот результат полностью согласуется с экспериментальными данными по купратным сверхпроводникам.

Достигнутые успехи концепции спинового полярона при описании электронной структуры нормальных и сверхпроводящих свойств купратных сверхпроводников позволяют заключить, что комплекс задач, связанных с изучением кинетических и гальваномагнитных свойств рассматриваемых материалов и, в частности, с изучением в рамках диссертационного исследования температурной и концентрационной зависимостей лондоновской глубины, является актуальным и потенциально востребованным для понимания возможностей практических приложений.

1.5 Резюме

Необходимость в исследовании свойств купратных ВТСП продиктована потребностями постоянно растущей области их практического применения и, в частности, потенциальной возможностью использования их способности проводить без потерь электрический ток в нормальных температурных и барометрических условиях. Именно на основе медь-оксидных ВТСП была достигнута наибольшая критическая температура сверхпроводимости. Однако отсутствие понимания механизма высокотемпературной сверхпроводимости ограничивает поиск необходимого соединения только экспериментальными попытками.

Детальное изучение электронного строения купратов позволило перейти к попыткам теоретического исследования свойств этих материалов в рамках различных предположений о механизме их высокотемпературной сверхпроводимости на основе моделей физики конденсированного состояния. Основываясь на одной из этих моделей — трех зонной $p-d$ -модели Эмери в режиме сильных электронных корреляций — была получена эффективная спин-фермионная модель. Существенные отличия этой модели от других моделей, используемых в теории ВТСП (таких как модель Хаббарда или $t-J$ -модель), заключаются в следующих двух фактах: во-первых, в спин-фермионной модели учитывается пространственная разнесенность подсистем ионов меди и кислорода, причем гамильтониан модели описывает гомеополлярные состояния ионов меди; во-вторых, принимается во внимание наличие в элементарной ячейке двух ионов кислорода с p_x - и p_y -орбиталями.

В рамках спин-фермионной модели была развита спин-поляронная концепция которая достигла убедительных успехов при описании нормальных и сверхпроводящих свойств купратных ВТСП. В частности, было продемонстрировано, что в рамках спин-поляронной концепции сверхпроводимость реализуется только с $d_{x^2-y^2}$ -типом симметрии параметра порядка, и этот факт полностью согласуется с экспериментальными данными по купратам.

К настоящему времени развитие спин-поляронной концепции достигло уровня, который позволяет перейти к исследованию таких характеристик купратов, которые непосредственно берутся из эксперимента, как, например, лондоновская глубина проникновения магнитного поля в сверхпроводник. Из-

вестно, что температурная зависимость глубины проникновения магнитного поля позволяет судить о типе симметрии сверхпроводящего параметра порядка, а наличие особенностей в температурном поведении может указывать на проявление микроскопических механизмов куперовского спаривания. Таким образом, тема диссертации, посвященной исследованию лондоновской глубины проникновения в рамках спин-поляронного механизма высокотемпературной сверхпроводимости купратов, представляется актуальной.

Для решения поставленной в диссертации задачи прежде всего необходимо разработать подход, который позволит рассчитать отклик спин-поляронных квазичастиц на слабое магнитное поле в сверхпроводящей фазе. Разработке такого подхода в рамках ранее развитой концепции спинового полярона посвящена следующая глава.

Глава 2. Отклик спин-поляронной квазичастицы на слабое магнитное поле в сверхпроводящей фазе

2.1 Введение

Вскоре после открытия Л. Камерлинг-Оннесом способности проводить электрический ток без сопротивления различными металлами [129], такими как ртуть, свинец, олово, было обнаружено другое характерное свойство сверхпроводимости — идеальный диамагнетизм, открытый в 1933 году немецкими физиками В. Мейснером и Р. Оксенфельдом [130]. Они обнаружили не только отсутствие проникновения магнитного поля в сверхпроводник, но и выталкивание поля из первоначально нормального образца при охлаждении его ниже температуры T_c (эффект Мейснера). В следствии этого стало понятно, что сверхпроводимость можно разрушить не только нагревая образец, но еще и помещая его в магнитное поле с напряженностью $H > H_c$ (H_c — критическое магнитное поле).

Эти основные электродинамические свойства, которые делают сверхпроводимость таким уникальным явлением, были удачно описаны в 1935 году братьями Ф. и Х. Лондонами [131]. Ими была феноменологически установлена связь плотности тока с магнитным полем в сверхпроводнике, что стало основой для дальнейшего развития электродинамики сверхпроводников.

На рисунке 2.1 демонстрируется суть эффекта Мейснера. При внесении сверхпроводника (при температуре ниже критической) в магнитное поле в нем возникают индукционные токи, которые, в свою очередь, создают магнитное поле, компенсирующее внешнее поле. В результате оказывается, что в объеме сверхпроводника значения магнитного поля и тока стремятся к нулю, а по поверхности сверхпроводника в тонком слое некоторой глубины λ_L (называемой лондоновской глубиной или глубиной проникновения магнитного поля) текут экранирующие токи. Для оптимально легированного LSCO величина λ_L равна $\sim 2300 \text{ \AA}$ [3; 132]. В обычных сверхпроводника она поменьше, 600 \AA . По мере увеличения температуры глубина проникновения магнитного поля возрастает и при достижении T_c значение λ_L стремится к бесконечности (магнитное поле полностью захватывает материал).

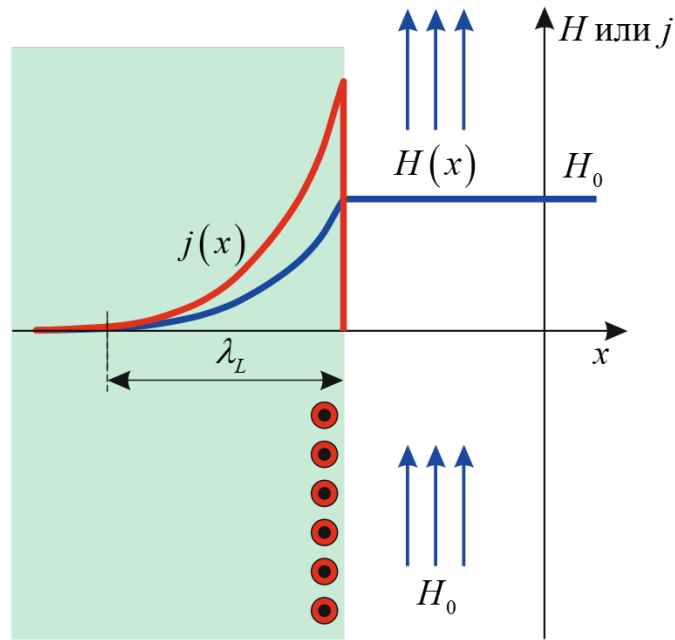


Рисунок 2.1 — (Цветной онлайн) Схема проникновения магнитного поля в сверхпроводник при $T < T_c$. К сверхпроводнику (затемненная область слева) приложено слабое магнитное поле H_0 , силовые линии которого обозначены стрелками вверх. Сверхпроводящий ток j направлен из плоскости и показан в виде окружностей с жирной точкой по центру. В затемненной области находятся две кривые, демонстрирующие убывание магнитного поля H и сверхпроводящего экранирующего тока j вглубь сверхпроводника. Обе кривые убывают на расстоянии равном лондоновской глубине λ_L в e раз по сравнению с их значениями на поверхности.

Лондоновская глубина является характеристикой сверхпроводника, которую можно измерить экспериментально. Температурная зависимость этой характеристики позволяет, в частности, судить о симметрии сверхпроводящего параметра порядка. Моделирование глубины проникновения магнитного поля в рамках различных теоретических подходов дает возможность анализировать, в том числе, природу квазичастиц, формирующих сверхпроводящую компоненту тока в сверхпроводнике. Например, в работах [133–140] в качестве носителя тока рассматривались затравочные фермионы с БКШ-подобным сверхпроводящим спариванием (БКШ — теория Бардина–Купера–Шриффера [141]). Однако, учитывая отмеченные выше успехи концепции спинового полярона, достигнутые при описании электронной структуры и сверхпроводящих свойств купратных сверхпроводников (см. разд. 1.4), становится очевидным,

что в качестве носителей тока (в том числе и его сверхпроводящей компоненты) должны выступать не голые дырки, а спин-поляронные квазичастицы.

Из сказанного следует, что задача о вычислении отклика ансамбля спиновых поляронов на слабое однородное магнитное поле в сверхпроводящей фазе в рамках развитого ранее спин-поляронного подхода представляет самостоятельный интерес даже безотносительно задачи о вычислении лондоновской глубины, являющейся основной в диссертационном исследовании.

Для расчета отклика системы на слабое магнитное поле в разделе 2.2, гамильтониан СФМ, подробно обсуждавшийся в предыдущей главе, обобщается таким образом, чтобы учесть векторный потенциал в длинноволновом пределе. Далее в разделе 2.3 описывается оригинальный подход для вычисления плотности тока спин-поляронного ансамбля квазичастиц в сверхпроводящей фазе и обсуждается методика расчета глубины проникновения магнитного поля. Завершается глава кратким резюме в разделе 2.4.

2.2 Спин-фермионная модель с учетом векторного потенциала магнитного поля

В том случае, когда при записи гамильтониана используется приближении сильной связи, как, например, для гамильтониана СФМ (1.6), эффективным способом учета слабого магнитного поля является подстановка Пайерлса [142; 143]. Эта подстановка состоит в ренормировке туннельного интеграла некоторым фазовым множителем, зависящем от вектора потенциала магнитного поля. Например, для интеграла $t_{ll'}^{pp}$, описывающего динамику дырок по ионам кислорода, подстановка Пайерлса имеет вид:

$$t_{ll'}^{pp} \Rightarrow t_{ll'}^{pp} \exp \left\{ \frac{ie}{c\hbar} \int_{R_l'}^{R_l} d\vec{r} \vec{A}(\vec{r}) \right\}, \quad (2.1)$$

где R_l — радиус-вектор l -го узла, \hbar — постоянная Планка, e — заряд дырки, c — скорость света. Поскольку в конечном итоге целью является получение выражения для расчета глубины проникновения магнитного поля в рамках локальной теории Лондонов, то можно с самого начала перейти к длинноволновому пределу для векторного потенциала $\vec{A}(\vec{r}) = A_{q=0}^x$, отвечающему режиму слабых магнитных полей. Кроме того, для конкретики, зададим направление вектора

\vec{A} вдоль оси x . В этом случае множитель, ренормирующий интеграл туннелирования $t_{ll'}^{pp}$ в формуле (2.1), можно преобразовать к виду

$$\exp\left\{\frac{ie}{c\hbar}R_{ll'}^xA_{q=0}^x\right\}, \quad (2.2)$$

где $R_{ll'} = R_l - R_{l'}$. Аналогичным образом каждое слагаемое во второй сумме в выражении (1.76) для оператора \hat{T} в результате подстановки Пайерлса оказывается умноженным на фактор

$$\exp\left\{\frac{ie}{c\hbar}(\delta^x - \delta_1^x)A_{q=0}^x\right\}, \quad (2.3)$$

где δ^x — компонента вектора δ вдоль оси x . Таким образом, учет магнитного поля, реализуемый подстановкой Пайерлса, приводит к ренормировке всех интегралов перескока в гамильтониане СФМ на соответствующий фазовый множитель.

Традиционный подход [133; 135–137; 139; 140; 144–148], применяемый для вычисления плотности тока, строится на разложении в ряд экспоненциальных множителей (2.2) и (2.3) по векторному потенциалу $A_{q=0}^x$, в предположении его малости. Далее, принимая во внимание поправки только первого и второго порядка, варьируя гамильтониан по вектору $A_{q=0}^x$, усредняя полученные выражения и вычисляя соответствующие средние опять в линейном по $A_{q=0}^x$ приближении, выводится выражение для плотности сверхпроводящего тока. При этом, как правило, стремятся отделить парамагнитную часть плотности тока от диамагнитной. Однако в рамках проекционного метода описанная стандартная процедура вычисления плотности тока не может быть применена напрямую, поскольку в процессе вычислений возникают новые базисные операторы, отсутствующие в исходно выбранном базисе.

Для преодоления указанной трудности ”временно” откажемся от разложения множителей (2.2) и (2.3) в ряд по степеням $A_{q=0}^x$, помня однако, что в конечном выражении для тока доверять можно только линейным поправкам. Преимущество такого подхода становится очевидным после преобразования Фурье

$$\begin{aligned} p_{f\pm\frac{gx}{2},\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ik(R_f\pm\frac{gx}{2})} a_{k\sigma}, \\ p_{f\pm\frac{gy}{2},\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ik(R_f\pm\frac{gy}{2})} b_{k\sigma}, \end{aligned} \quad (2.4)$$

где N — количество элементарных ячеек в CuO_2 -плоскости. Преобразование (2.4) описывает переход к новым операторам вторичного квантования $a_{k\sigma}$ и $b_{k\sigma}$, которые соответствуют уничтожению дырки с квазиимпульсом k и спином σ в кислородных подрешетках с p_x - и p_y -орбиталями соответственно.

После преобразования Фурье (2.4) гамильтониан СФМ (1.6) при учете магнитного поля принимает вид

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{sp-f}} = \hat{H}_h + \hat{J} + \hat{I}, \quad (2.5)$$

где

$$\hat{H}_h = \sum_{k\alpha} \left(\xi_{k,x} a_{k\alpha}^\dagger a_{k\alpha} + \xi_{k,y} b_{k\alpha}^\dagger b_{k\alpha} + \Gamma_k (a_{k\alpha}^\dagger b_{k\alpha} + b_{k\alpha}^\dagger a_{k\alpha}) \right), \quad (2.6a)$$

$$\hat{J} = J \sum_{k\alpha} u_{k\alpha}^\dagger L_{k\alpha}, \quad (2.6b)$$

$$\hat{I} = \frac{I}{2} \sum_{f\delta} \vec{S}_f \vec{S}_{f+2\delta}. \quad (2.6b)$$

При записи (2.6a–2.6b) были учтены знаки интегралов перескока в зависимости от направления перескока и фазы волновых функций, а также

$$\begin{aligned} \xi_{k,x(y)} &= \tilde{\epsilon}_p - \mu + 2\tau s_{k,x(y)}^2, & \tilde{\epsilon}_p &= \epsilon_p + 2V_{pd}, & \Gamma_k &= (2\tau - 4t_{pp})s_{k,x}s_{k,y}, \\ L_{k\alpha} &= \sum_{q\beta} \tilde{S}_{k-q}^{\alpha\beta} u_{q\beta}, & \tilde{S}_k &= \frac{1}{N} \sum_f e^{-ikR_f} \tilde{S}_f, & u_{k\alpha} &= s_{k,x}a_{k\alpha} + s_{k,y}b_{k\alpha}, \end{aligned} \quad (2.7)$$

$$s_{k,x} = \sin(k_x/2 - \alpha_x), \quad s_{k,y} = \sin(k_y/2), \quad (2.8)$$

в которых параметры I , τ и J определены выражениями (1.4, 1.9 и 1.10) соответственно, а оператор \tilde{S}_f — выражением (1.8).

В определении оператора \hat{J} (2.6b) были использованы два новых оператора: оператор $u_{k\alpha}$, который является суперпозицией $a_{k\alpha}$ и $b_{k\alpha}$ (2.7) и оператор $L_{k\alpha}$, учитывающий связь между локализованным спином на ионе меди и дырки на четырех ближайших ионах кислорода. Именно эти три оператора: $a_{k\alpha}$, $b_{k\alpha}$ и $L_{k\alpha}$, были указаны в разделе 1.4 (см. обсуждение на стр. 29) в качестве полного базиса, достаточного для описания спин-поляронной квазичастицы в нормальной фазе.

Важнейшей для дальнейшего особенностью полученного гамильтониана СФМ (2.5) является то, что безразмерное поле векторного потенциала

$$\alpha_x = \frac{eg_x}{2c\hbar} A_{q=0}^x \quad (2.9)$$

входит в этот гамильтониан только как фазовый сдвиг в аргументе тригонометрической функции $s_{k,x}$ (2.8). Очевидно, что при учете наряду с x -компонентой вектор-потенциала \vec{A} также и его y -компоненты, в аргументе функции $s_{k,y}$ также появится соответствующий фазовый сдвиг. Зеемановская энергия, обусловленная взаимодействием поля со спиновыми моментами дырок, не учитывается, поскольку в длинноволновом пределе ($q \rightarrow 0$) эта энергия стремиться к нулю.

2.3 Сверхпроводящая плотность тока в поле векторного потенциала

Наша цель состоит в вычислении лондоновской глубины λ на основе уравнения братьев Ф. и Х. Лондонов [131]:

$$\vec{j} = -\frac{c}{4\pi\lambda^2}\vec{A}. \quad (2.10)$$

Это уравнение линейно связывает сверхпроводящую плотность тока \vec{j} и векторный потенциал \vec{A} в локальном приближении.

Для нахождения плотности тока, возникающей в рассматриваемой СФМ в поле векторного потенциала, воспользуемся известным общим выражением [149]:

$$\delta\mathcal{H} = -\frac{1}{c} \sum_q \vec{j}(-q) \delta\vec{A}_q, \quad (2.11)$$

где в качестве варьируемого оператора гамильтона $\hat{\mathcal{H}}$ выберем $\hat{\mathcal{H}}_{\text{sp-f}}$, определенный формулой (2.5).

Проводя вычисления и усредняя полученный результат, находим:

$$\begin{aligned} j_x(q=0) = \langle \hat{j}_x(q=0) \rangle &= \frac{eg_x}{\hbar} \sum_{k,\alpha} \cos\left(\frac{k_x}{2} - \alpha_x\right) \left(2\tau s_{k,x} \langle a_{k\alpha}^\dagger a_{k\alpha} \rangle \right. \\ &\quad \left. + 2(\tau - 2t_{pp}) s_{k,y} \langle a_{k\alpha}^\dagger b_{k\alpha} \rangle + J \langle a_{k\alpha}^\dagger L_{k\alpha} \rangle \right). \end{aligned} \quad (2.12)$$

Здесь важно отметить, что термодинамическое усреднение в формуле (2.12) проводится по статистическому ансамблю, динамика которого управляется гамильтонианом СФМ (2.5), учитывающем вектор-потенциал магнитного поля.

Таким образом, линейные по \vec{A} вклады в плотность тока, необходимые для вычисления лондоновской глубины по формуле (2.10), возникают не только из-за явной зависимости от \vec{A} оператора тока, вычисленного по правилу (2.11), но также благодаря зависимости от \vec{A} неравновесной матрицы плотности, с которой проводится усреднение. Вклады первого типа называются диамагнитными, а второго — парамагнитными.

Как будет показано ниже, именно линейные вклады, обусловленные неравновесной матрицей плотности, приводят к тем нетривиальным особенностям, которые проявляются в результатах расчета температурной зависимости λ^{-2} в рамках спин-поляронного подхода и которые в ряде случаев обнаруживаются экспериментально.

Необходимо отметить, что выражение (2.12) дает правильное поведение плотности тока при $T \geq T_c$. Действительно, в нормальной фазе зависимость всех термодинамических средних в (2.12) от квазиимпульса k_x определяется только в виде разности $k_x - \alpha_x$. Поэтому простая замена переменной интегрирования $k_x \rightarrow k_x + \alpha_x$ в интеграле в правой части выражения (2.12) позволяет полностью избавиться от фазы α_x . Поскольку в отсутствие α_x выражение в круглых скобках в (2.12), как показывают расчеты, антисимметрично по вектору \vec{k} , то правая часть (2.12), как того и требуется, обращается в ноль. Для сверхпроводящей фазы (при $T < T_c$) зависимость термодинамических средних от k_x определяется не только разностью $k_x - \alpha_x$, но и суммой $k_x + \alpha_x$. Поэтому интеграл (2.12) при $T < T_c$ оказывается отличным от нуля.

Выражение для глубины проникновения магнитного поля следует из уравнения Лондонов (2.10) и имеет вид:

$$\frac{1}{\lambda^2} = -\frac{2e\pi}{c^2\hbar g_y g_z} \cdot \frac{j_x(q=0)}{N\alpha_x}, \quad (2.13)$$

где g_z — параметр решетки вдоль оси z . Поскольку значения λ^{-2} должны определяться по этой формуле в пределе при $\vec{A} \rightarrow 0$, то дробь $\frac{j_x(q=0)}{\alpha_x}$, стоящая в правой части (2.13), есть с точностью до константы просто производная плотности тока по вектор-потенциалу. Это означает, что для определения лондоновской глубины важны только линейные поправки к плотности тока $j_x(q=0)$, которые, как отмечалось в предыдущем разделе, в рамках использованного подхода определены корректно.

Явная зависимость плотности тока от вектор-потенциала, в следствие используемого проекционного метода, оказывается довольно сложной. Несмотря на то, что аналитическое вычисление производной плотности тока по α_x , в принципе, возможно, более простым решением оказывается численное дифференцирование. При этом, конечно, нужно помнить, что для корректного численного дифференцирования необходимо выбирать значения α_x из того интервала, в котором функция $j_x(\alpha_x)$ — линейна. Конкретные численные значения безразмерного поля α_x , использованные при вычислении лондоновской глубины, а также явные выражения для термодинамических средних, определяющих плотность тока, будут представлены в следующей главе.

2.4 Резюме

Подводя итоги главы, отметим, что для решения задачи о лондоновской глубине проникновения магнитного поля в купратах в рамках спин-поляронной концепции был предложен нестандартный подход, позволяющий получить аналитическое выражение для плотности сверхтока $\vec{j}(\vec{q} = 0)$ в относительно компактном виде. Идея состоит в том, чтобы после подстановки Пайерлса не пытаться сразу выделять линейные и квадратичные по $\vec{A}_{\vec{q}=0}$ поправки и, тем более, не пытаться разделить плотность тока на парамагнитную и диамагнитные части. Вычисление плотности тока с явным учетом экспоненциального вида пайерлсовской подстановки привело к ответу, в котором векторный потенциал входит лишь как перенормировка квазиимпульса, что, впрочем, неудивительно, поскольку это отвечает известной замене импульса при включение магнитного поля: $\vec{p} \rightarrow \vec{p} - (e/c)\vec{A}$. Выделение линейных по $\vec{A}_{\vec{q}=0}$ поправок, если это необходимо, осуществляется на последнем этапе расчета плотности тока. В частности, в используемой ниже формуле для лондоновской глубины отношение $\vec{j}(\vec{q} = 0)$ к $\vec{A}_{\vec{q}=0}$ выражается через производную от полученного предложенным методом выражения для плотности тока по полю.

Описанный подход оказывается особенно удобным в том случае, если явная зависимость спектра квазичастиц априори неизвестна, и/или если рассматривается многозонная система.

Глава 3. Лондоновская глубина в ансамбле спиновых поляронов в купратных сверхпроводниках

3.1 Введение

Впервые на возможность извлекать информацию о типе симметрии сверхпроводящего параметра порядка из анализа температурной зависимости магнитной глубины проникновения ($1/\lambda^2(T)$) было указано в работе [150]. На рисунке 3.1 представлена зависимость $1/\lambda^2(T)$, полученная в этой работе на монокристалле $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$. Штриховые кривые на рисунке 3.1 имеют ярко выраженную линейную T -зависимость лондоновской глубины в области низких температур, отличающуюся от сплошной кривой, рассчитанной в рамках теории БКШ с s -типом симметрией параметра порядка. Такая линейная зависимость функции $1/\lambda^2(T)$ была объяснена наличием нулей в спектре боголюбовских возбуждений в точках k -пространства, расположенных на пересечении поверхности Ферми и линии нулей параметра порядка d -типа. Линейный ход на начальном участке температурной зависимости величины $1/\lambda^2$ наблюдается во многих известных купратных ВТСП [9; 15; 132; 145; 151–166] и в настоящее время считается неоспоримым свидетельством d -волновой симметрии параметра порядка в этих соединениях.

В некоторых случаях экспериментальный метод, основанный на анализе модификации температурной зависимости магнитной глубины проникновения при легировании, позволяет не только делать выводы о симметрии сверхпроводящего параметра порядка, но и получать информацию о микроскопических механизмах куперовского спаривания. Ситуация, правда, усложняется тем, что иногда в зависимости от экспериментального метода результат исследования температурной зависимости лондоновской глубины на одном и том же материале может оказаться разным. Например, зависимость $1/\lambda^2(T)$, полученная с помощью мюонной спин-спектроскопии (Muon Spin Rotation (μ SR)), в области низких температур (около 15 К) имеет особенность в виде точки перегиба, в окрестности которой кривая $1/\lambda^2(T)$ меняет кривизну [9; 157; 164; 165; 167–172]. Характерный пример точки перегиба представлен на рисунке 3.2 [168]. В других экспериментах, также основанных на μ SR-спектроскопии, точка перегиба

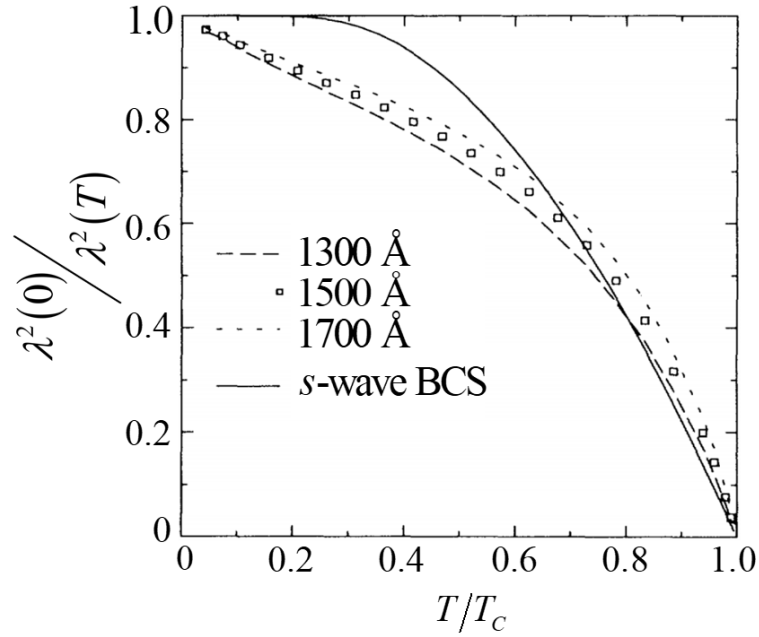


Рисунок 3.1 — Зависимость $[\lambda^{-2}(T)/\lambda^{-2}(0)]$ от $[T/T_c]$, измеренная на монокристалле $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.95}$ [150]. На рисунке также показана слабая зависимость от выбора нормировочного значения $\lambda(0)$. Поведение экспериментальных кривых в области низких температур явно отличается от результата БКШ теории [141] s -волновой сверхпроводимости.

не наблюдается [165; 173–183], что, по-видимому, связано с качеством исследуемого образца [132].

Проявление точки перегиба в μSR экспериментах объясняется тем, что эта техника позволяет измерять абсолютные значения $\sigma_{sc} \propto \lambda_{ab}^{-2}(T)$ в отличие от остальных методик, где полученные данные необходимо нормировать на $1/\lambda^2$ при $T = 0$. В целом, описание и сравнение экспериментальных техник по измерению глубины магнитного проникновения можно найти, например, в [160; 184] или в приведенных выше работах, следуя ссылкам. В работе [172] было установлено, что точка перегиба на кривой $\lambda_{ab}^{-2}(T)$ особенно хорошо проявляется в системах $\text{Bi}_{2.15}\text{Sr}_{1.85}\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ и $\text{Bi}_{2.1}\text{Sr}_{1.9}\text{Ca}_{0.85}\text{Y}_{0.15}\text{Cu}_2\text{O}_{8+\delta}$ в области чуть выше оптимального легирования, $x \approx 0.17$. Примерно в этой же области легирования точка перегиба наблюдается и в других соединениях купратов.

Теоретическое объяснение точки перегиба было предложено в работе [181] для YBCO и в работе [171] для LSCO , в которых резкий рост сверхпроводящей плотности связывался с термическим депиннингом вихрей Абрикосова. Однако аналитические расчеты, выполненные в этих работах, показали наличие точки перегиба только для параметра порядка с s -типом симметрии, тогда как

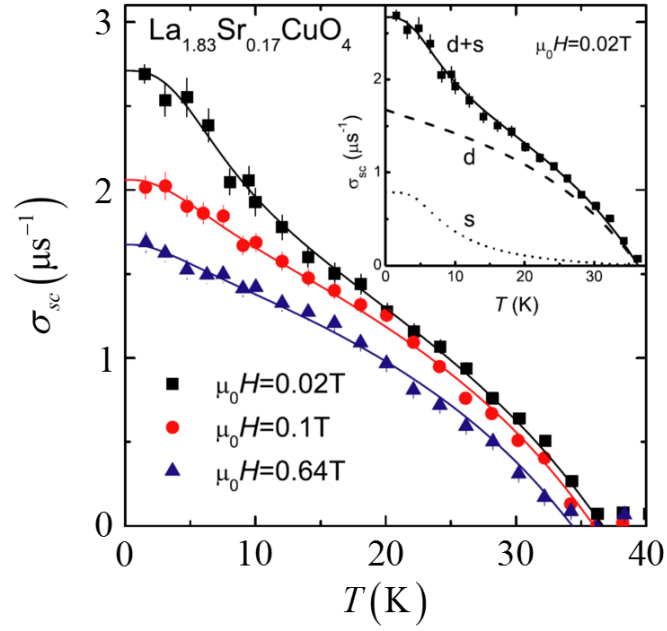


Рисунок 3.2 — Точка перегиба в температурной зависимости $\sigma_{sc} \propto \lambda_{ab}^{-2}$ на монокристалле $\text{La}_{1.83}\text{Sr}_{0.17}\text{CuO}_4$ [168]. Наличие точки перегиба на температурных кривых предположительно объясняется в рамках двух щелевой модели. На вставке отдельно приводятся вклады от s - и d -волн, сумма которых указывает на соответствие между моделью и экспериментальными данными.

для параметра порядка d -типа, характерного для купратов, точка перегиба не наблюдалась. Альтернативный сценарий, предполагающий сосуществование двух сверхпроводящих щелей, был предложен в работах [168; 169] для щелей s - и $d_{x^2-y^2}$ -типов симметрии (см. рис. 3.2) и в работе [185] для щелей d_{xy} - и $d_{x^2-y^2}$ -типов симметрии. С нашей точки зрения, предположение о двух щелях с разными типами симметрии в купратных ВТСП является не вполне обоснованным.

Для анализа причины возникновения точки перегиба на кривой $\lambda_{ab}^{-2}(T)$ в работе [171] было проведено несколько циклов охлаждения образцов, но результаты экспериментов практически не изменялись. При этом с увеличением магнитного поля происходило ослабление низкотемпературного роста λ_{ab}^{-2} [164; 183]. Аналогичное поведение $\lambda_{ab}^{-2}(T)$ наблюдалось в работе [165], где измерения проводились не при изменении магнитного поля, а при изменении давления. Изложенные факты дают основание полагать, что причина появления точки перегиба в температурной зависимости обратного квадрата лондоновской глубины, по-видимому, является внутренней по своему происхождению.

Отмеченная выше неоднозначность в интерпретации причины возникновения точки перегиба на экспериментальных кривых $\lambda^{-2}(T)$ делает задачу об

исследовании температурной зависимости лондоновской глубины в купратах в рамках концепции спинового полярона особенно актуальной. Для решения этой задачи в главе 2 была разработана методика расчета сверхпроводящей плотности тока в ансамбле спиновых поляронов. Полученное выражение содержит сумму трех термодинамических средних.

В данной главе предложенная методика расчета плотности тока в сверхпроводящей d -фазе в слабом магнитном поле будет использована для исследования отмеченных выше особенностей температурной зависимости лондоновской глубины при различных значениях легирования.

В разделе 3.2 будет проведен анализ выражения для сверхпроводящей плотности тока в магнитном поле (2.12) при переходе в нормальную фазу, где, как известно, $j_x(q = 0)$ должна обратиться в ноль. В этом же разделе будут рассмотрены важные для дальнейшего особенности спин-поляронного спектра в нормальной фазе. Далее в разделе 3.3 вычисляется спектр в сверхпроводящей d -фазе. Выражение для сверхпроводящего параметра порядка в d -канале обсуждается в разделе разд. 3.4. В разделе 3.5 приводятся уравнения самосогласования для параметра порядка и химического потенциала совместно с уравнением для плотности сверхтока. Результаты численных расчетов температурной зависимости лондоновской глубины при различных значениях легирования представлены в разделе 3.6. В этом же разделе обсуждаются причины возникновения точки перегиба в температурной зависимости λ^{-2} . Заканчивается глава кратким резюме в разделе 3.7.

3.2 Уравнения для функций Грина с учетом поля векторного потенциала и спин-поляронный спектр в нормальной-фазе

Вычисление двухвременных термодинамических функций Грина $\langle\langle B_i | B_j^+ \rangle\rangle_\omega$ в рамках проекционного метода сопряжено с вычислением коммутатора базисного оператора B_i с гамильтонианом $\hat{\mathcal{H}}_{\text{sp-f}}$ (2.5) и последующего антикоммутирования полученного результата с другим (эрмитово-сопряженным) базисным оператором B_j^\dagger . В общем случае получаются довольно сложные корреляционные функции включающие как спиновые, так и фермиевские операторы. Выражения существенно упрощаются, если использовать приближение

низкой плотности, в рамках которого всеми нормальными корреляционными функциями, содержащими фермиевские операторы, пренебрегается по сравнению с чисто спиновыми корреляторами. Для купратов это приближение оправдывается малым уровнем дырочного легирования, который не превышает значения $x \cong 0.22$, а также тем, что численные значения всех спин-фермионных корреляторов в несколько раз меньше значений спин-спиновых корреляторов.

Для проверки правильного поведения сверхпроводящей плотности тока — обращения его в ноль при переходе в нормальную фазу — рассчитаем термодинамические средние в выражении (2.12), используя двухвременные температурные функции Грина $\langle\langle B_i | B_j^+ \rangle\rangle_\omega$, взяв в качестве операторов B_i базис из трех операторов (1.22).

Для этого согласно уравнениям (1.19) и (1.20) необходимо рассчитать матричные элементы (1.17) энергетической матрицы $D^{(3)}(k)$, где верхний индекс (3) указывает на размер базиса. Подробности вычислений матричных элементов (1.17) с использованием базиса (1.22) в пределе низкой плотности вынесены в приложение А. Результат вычислений представлен ниже следующими уравнениями

$$\begin{aligned} D_{11}(k) &= \xi_{k,x}, & D_{12}(k) &= \Gamma_k, & D_{13}(k) &= J s_{k,x} K_k, \\ D_{22}(k) &= \xi_{k,y}, & D_{23}(k) &= J s_{k,y} K_k, \\ D_{33}(k) &= (\tilde{\epsilon}_p - \mu + 4\tau - 4t_{pp}) K_k - \frac{9}{8}\tau + \frac{3}{2}t_{pp} + (\tau - 2t_{pp}) C_2 \gamma_{2k} \\ &\quad + \frac{\tau}{2} C_3 \gamma_{3k} - \frac{3}{4}J + J C_1 \left(\frac{1}{4} + 2\gamma_{1k} \right) - \tilde{I} C_1 (\gamma_{1k} + 4), \end{aligned} \quad (3.1)$$

где функции $\xi_{k,x(y)}$, Γ_k и $s_{k,x(y)}$ были определены ранее формулами (2.7) и (2.8). $\tilde{I} = I(1-p)$ — ренормированный обменный интеграл, где p — параметр фрустрации [125], изменяющийся от 0.15 до 0.275 с увеличением x от 0.03 до 0.22 (см. табл. 3 на стр. 26).

При записи выражений (3.1) были введены функции:

$$\begin{aligned} \gamma_{1k} &= (\cos(k_x - 2\alpha_x) + \cos(k_y))/2, \\ \gamma_{2k} &= \cos(k_x - 2\alpha_x) \cos(k_y), \\ \gamma_{3k} &= (\cos(2k_x - 4\alpha_x) + \cos(2k_y))/2, \end{aligned} \quad (3.2)$$

а единственный нетривиальный элемент матрицы

$$K^{(3)}(k) = \text{diag}\{1, 1, K_k\}, \quad (3.3)$$

рассчитанной согласно определению (1.15), имеет вид:

$$K_k = \frac{3}{4} - C_1 \gamma_{1k}. \quad (3.4)$$

Кроме того, при вычислении матричных элементов (3.1) и (3.4) возникли спиновые корреляторы C_j ($j = 1, 2, 3$), определение которых дается формулой (1.12).

Матрицу $M(k, \omega)$ (1.20) размером 3×3 обозначим посредством $M^{(3)}(k, \omega)$. Она имеет вид:

$$M^{(3)}(k, \omega) = \begin{pmatrix} \omega - D_{11}(k) & -D_{12}(k) & -D_{13}(k)/K_k \\ -D_{12}(k) & \omega - D_{22}(k) & -D_{23}(k)/K_k \\ -D_{13}(k) & -D_{23}(k) & \omega - D_{33}(k)/K_k \end{pmatrix}. \quad (3.5)$$

Фермиевский спектр спин-поляронных квазичастиц в нормальной фазе следует из дисперсионного уравнения,

$$\det M^{(3)}(k, \omega) = 0 \quad (3.6)$$

и соответствует нижней ветви ε_{1k} на рис. 3.3. Важной особенностью спектра ε_{1k} является то, что минимум зоны находится вблизи точек $(\pm\pi/2, \pm\pi/2)$ зоны Бриллюэна. Именно этот минимум приводит к появлению небольших дырочных карманов [80; 86; 104], наблюдаемых в ARPES-экспериментах [10] при низком легировании, что отмечалось в обзорной главе. Другая важная особенность спин-поляронной зоны заключается в том, что она отделена от верхних зон энергетической щелью большой величины — порядка J . Такой значительный выигрыш в энергии спин-поляронных состояний обусловлен сильной связью локализованного спина меди и дырки на четырех ближайших ионах кислорода.

Термодинамические средние: $\langle a_{k\uparrow}^\dagger a_{k\uparrow} \rangle$, $\langle b_{k\uparrow}^\dagger b_{k\uparrow} \rangle$ и $\langle L_{k\uparrow}^\dagger L_{k\uparrow} \rangle$, определяющие плотность тока согласно выражению (2.12), найдем с помощью спектральной теоремы [187] для соответствующих трех функций Грина. Эти функции получаются из решения системы уравнений (1.19) с матрицами $K^{(3)}(k)$ (3.3) и $M^{(3)}(k, \omega)$ (3.5):

$$\begin{aligned} \langle \langle a_{k\uparrow}^\dagger | a_{k\uparrow}^\dagger \rangle \rangle_\omega &= \frac{Q_{11}(k, \omega)}{\det M^{(3)}(k, \omega)}, \\ \langle \langle b_{k\uparrow}^\dagger | a_{k\uparrow}^\dagger \rangle \rangle_\omega &= \frac{-Q_{12}(k, \omega)}{\det M^{(3)}(k, \omega)}, \\ \langle \langle L_{k\uparrow}^\dagger | a_{k\uparrow}^\dagger \rangle \rangle_\omega &= \frac{Q_{13}(k, \omega)}{\det M^{(3)}(k, \omega)}, \end{aligned} \quad (3.7)$$

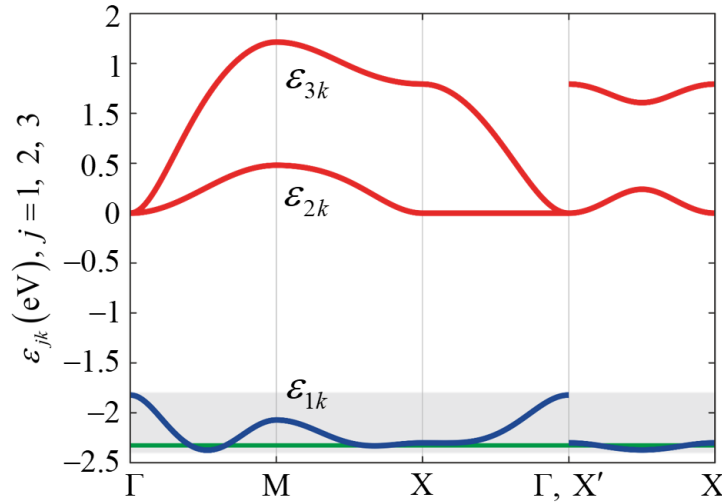


Рисунок 3.3 — (Цветной онлайн) Спектр фермиевских возбуждений в спин-фермионной модели в нормальной фазе. Три ветви спектра ε_{jk} ($j = 1, 2, 3$) являются решениями дисперсионного уравнения (3.6). Нижняя зона соответствует спин-поляронным состояниям (синие кривые), образующимся за счет сильной спин-фермионной связи J . Верхние зоны, образованные в основном чисто дырочными состояниями, в режиме низкой плотности, когда химический потенциал (зеленая прямая) лежит в нижней спин-поляронной зоне, остаются пустыми. Особенность спин-поляронного спектра характеризуется наличием дырочного кармана в окрестности точек $(\pm\pi/2, \pm\pi/2)$ (см. середину отрезка ΓM) [86; 186]. Обозначения точек симметрии зоны Бриллюэна следующие:

$$\Gamma = (0, 0), M = (\pi, \pi), X = (0, \pi), X' = (\pi, 0).$$

где $Q_{ij}(k, \omega)$ — минор по отношению к ij -ому элементу матрицы $M^{(3)}(k, \omega)$ (3.3). Явный вид $Q_{ij}(k, \omega)$ приведен в приложении Б.1.

Результирующее выражение для плотности тока в нормальной фазе имеет вид

$$j_x^N(q=0) = \frac{eg_x}{\hbar} \sum_k \cos(k_x/2 - \alpha_x) \frac{f(\varepsilon_{1k}/T)}{(\varepsilon_{1k} - \varepsilon_{2k})(\varepsilon_{1k} - \varepsilon_{3k})} \times \left(2\tau s_{k,x} Q_{11}(k, \varepsilon_{1k}) - 2(\tau - 2t_{pp}) s_{k,y} Q_{12}(k, \varepsilon_{1k}) + J Q_{13}(k, \varepsilon_{1k}) \right), \quad (3.8)$$

где $f(x) = 1/(e^x + 1)$ — функция распределения Ферми-Дирака, а ε_{jk} ($j = 1, 2, 3$) — решения дисперсионного уравнения (3.6), определяющие три ветви спектра фермиевских возбуждения в нормальной фазе, но с учетом поля векторного потенциала. При вычислении (3.8) также учитывалось, что в рассматриваемом режиме низкой плотности химический потенциал μ находится в нижней спин-поляронной зоне, так что две верхние зоны пусты.

В традиционных подходах нулевое значение полного тока в несверхпроводящей фазе обеспечивается за счет компенсации парамагнитного и диамагнитного вкладов в выражении для плотности тока. В предлагаемом здесь подходе парамагнитная и диамагнитная части тока могут быть получены из выражения (3.8) после несложных, но объемных вычислений, связанных с выделением линейных по полю поправок. Однако для наших целей оказывается, что в этом нет необходимости.

Действительно, из выражения (3.8) следует, что зависимость подынтегральной функции от безразмерного векторного потенциала α_x проявляется только в виде разности $k_x/2 - \alpha_x$. Учитывая, что интегрирование в (3.8) выполняется по первой зоне Бриллюэна, а подынтегральное выражение периодически при трансляции на вектор обратной решетки, легко видеть, что простая замена переменной интегрирования $k_x \rightarrow k_x/2 + \alpha_x$ позволяет полностью избавиться от α_x в выражении (3.8). Далее, принимая во внимание свойства функций $Q_{ij}(k, \omega)$, нетрудно проверить, что выражение в круглых скобках в формуле (3.8) после указанной замены переменной интегрирования становится антисимметричным по квазиимпульсу k_x . В результате, сумма по \vec{k} в выражении (3.8), а вместе с ней и свертка, обращается в ноль, как это и должно быть в нормальной фазе.

Отметим, что для сверхпроводящей фазы (при $T < T_c$) зависимость термодинамических средних от k_x определяется не только разностью $k_x/2 - \alpha_x$, но и суммой $k_x/2 + \alpha_x$, поэтому сдвигкой по переменной суммирования избавиться от α_x не получится, и, как следствие, плотность сверхпроводящего тока оказывается отличной от нуля.

3.3 Спектр спиновых поляронов в сверхпроводящей фазе с учетом магнитного поля

Для исследования сверхпроводящей фазы купратов в рамках используемого подхода необходимо вычислить аномальные функции Грина. Сделать это на основе базиса трех операторов (1.22) невозможно. Как показано в работе [127], базис (1.22) в этом случае должен быть расширен за счет дополнитель-

ных трех операторов:

$$B_{4k} = a_{-k\downarrow}^\dagger, \quad B_{5k} = b_{-k\downarrow}^\dagger, \quad B_{6k} = L_{-k\downarrow}^\dagger. \quad (3.9)$$

Далее согласно проекционному методу, изложенному выше, используя базис из шести операторов (1.22) и (3.9), необходимо найти три матрицы размера 6×6 : $K^{(6)}(k)$ (1.15), $D^{(6)}(k)$ (1.17) и $M^{(6)}(k, \omega)$ (1.20). Как и раньше, матрица $K^{(6)}(k)$ диагональна

$$K^{(6)}(k) = \text{diag}\{1, 1, K_k, 1, 1, K_{-k}\}. \quad (3.10)$$

Заметим, что $K_{-k} \neq K_k$, если $\alpha_x \neq 0$.

Нормальные компоненты энергетической матрицы $D_{ij}^{(6)}(k)$ с индексами $i, j = 1, 2, 3$ были вычислены ранее и приведены в (3.1). Нормальные компоненты с индексами $i, j = 4, 5, 6$ оказываются связанными с компонентами (3.1) соотношениями:

$$D_{i+3, j+3}^{(6)}(k) = -D_{ij}^{(6)}(-k), \quad i, j = 1, 2, 3. \quad (3.11)$$

При вычислении аномальных элементов матрицы $D^{(6)}(k)$ учтем, что согласно результатам работы [128] сверхпроводимость s -типа в спин-фермионной модели не реализуется. Это позволяет при проведении вычислений удерживать только те слагаемые, которые отвечают d -волновому спариванию. Расчеты аномальных элементов матрицы $D^{(6)}(k)$, вынесенные в приложение А, показали, что отличными от нуля оказываются только два аномальных элемента: $D_{36}(k)$ и сопряженный ему $D_{63}(k) = (D_{36}(k))^*$. В результате, уравнение на сверхпроводящий параметр порядка $\Delta(k)$ принимает вид:

$$D_{36}(k) = \Delta(k) = \frac{1}{N} \sum_q I_{k+q} (\langle L_{q\uparrow} L_{-q\downarrow} \rangle - C_1 \langle u_{q\uparrow} u_{-q\downarrow} \rangle), \quad (3.12)$$

где

$$I_k = 2\tilde{I}(\cos(k_x) + \cos(k_y)) \quad (3.13)$$

есть Фурье-образ обменного интеграла. Ранее уравнение на параметр порядка, подобное (3.12), было получено в работе [127], однако в отличие от формулы (3.12) в этой работе зависимость от векторного потенциала $A_{q=0}^x$ не учитывалась.

Для нахождения спектра в сверхпроводящей фазе матрицу $M^{(6)}(k, \omega)$ удобно выразить в блочной форме

$$M^{(6)}(k, \omega) = \begin{pmatrix} M^{(3)}(k, \omega) & F^{(3)}(k, \omega) \\ (F^{(3)}(k, \omega))^* & \bar{M}^{(3)}(k, \omega) \end{pmatrix}. \quad (3.14)$$

Верхний левый 3×3 блок $M^{(3)}(k, \omega)$ определен в (3.5). Нижний правый блок $\bar{M}^{(3)}(k, \omega)$ получается из верхнего левого $M^{(3)}(k, \omega)$ заменой элементов $D_{ij}(k)$ на $-D_{ij}(-k)$. Единственным ненулевым элементом в аномальном блоке $F^{(3)}(k, \omega)$ является элемент $F_{33}(k, \omega)$, равный $-D_{36}(k)$.

Спектр фермиевских возбуждений купратов в сверхпроводящей фазе определяется нулями детерминанта $\det M^{(6)}(k, \omega)$, который может быть выражен через детерминанты третьего порядка:

$$\det M^{(6)}(k, \omega) = \det M^{(3)}(k, \omega) \cdot \det \bar{M}^{(3)}(k, \omega) - Q_{33}(k, \omega) \bar{Q}_{33}(k, \omega) \frac{|\Delta(k)|^2}{K_k K_{-k}} = 0, \quad (3.15)$$

где $Q_{33}(k, \omega)$ и $\bar{Q}_{33}(k, \omega)$ — миноры (3,3)-го элемента матриц $M^{(3)}(k, \omega)$ и $\bar{M}^{(3)}(k, \omega)$ соответственно. Явный вид этих миноров приведен в приложении Б.1.

В режиме низкой плотности, когда химический потенциал μ лежит в нижней спин-поляронной зоне, отделенной от двух верхних зон большой энергетической щелью $\sim J$ (см. рис. 3.3), спин-поляронный спектр в сверхпроводящей фазе E_{1k} и с учетом векторного потенциала $A_{q=0}^x$ может быть найден с высокой точностью аналитически.

Для этого запишем определитель $\det M^{(6)}(k, \omega)$ в двух эквивалентных формах:

$$\prod_{j=1}^6 (\omega - \varepsilon_{jk}) - Q_{33}(k, \omega) \bar{Q}_{33}(k, \omega) \frac{|\Delta(k)|^2}{K_k K_{-k}}, \quad (3.16a)$$

$$\prod_{j=1}^6 (\omega - E_{jk}). \quad (3.16b)$$

В формуле (3.16a) функции ε_{jk} с $j = 1, 2, 3$ и ε_{jk} с $j = 4, 5, 6$ являются решениями дисперсионных уравнений 3-го порядка: $\det M^{(3)}(k, \omega) = 0$ и $\det \bar{M}^{(3)}(k, \omega) = 0$ соответственно. Между этими решениями существует очевидная связь: $\varepsilon_{j+3,k} = -\varepsilon_{j,-k}$ ($j = 1, 2, 3$). Функции E_{jk} ($j = 1, \dots, 6$) в уравнении (3.16b) являются решениями дисперсионного уравнения 6-го порядка $\det M^{(6)}(k, \omega) = 0$ и, таким образом, представляют шесть ветвей спектра фермиевских возбуждений в сверхпроводящей фазе с учетом векторного потенциала $A_{q=0}^x$.

Поскольку энергетический интервал между химическим потенциалом μ и верхними зонами велик (см. рис. 3.3) по сравнению с амплитудой аномальных компонент, то дисперсия верхних двух зон фактически не изменяется при переходе из нормальной фазы в сверхпроводящую. Это означает, что с высокой точностью можно написать: $E_{jk} = \varepsilon_{jk}$ для $j = 2, 3, 5, 6$. Следовательно, неизвестным остается только спектр E_{1k} (его сопряженный $E_{4k} = -E_{1,-k}$).

Для определения спектра E_{1k} воспользуемся тем, что выражения (3.16a) и (3.16b) равны друг другу. Приравнявая их коэффициенты при 5-й и 4-й степенях ω , получим систему двух уравнений

$$\begin{cases} E_{1k} + E_{4k} = \varepsilon_{1k} + \varepsilon_{4k}, \\ E_{1k}E_{4k} = \varepsilon_{1k}\varepsilon_{4k} - |\Delta(k)|^2/K_kK_{-k}. \end{cases} \quad (3.17)$$

Решения системы (3.17) относительно E_{1k} и E_{4k} имеют вид

$$\begin{aligned} E_{1(4)k} &= \frac{\varepsilon_{1k} - \varepsilon_{1,-k}}{2} \pm E_k, \\ E_k &= \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_{1k} + \varepsilon_{1,-k}}{2}\right)^2 + \frac{|\Delta(k)|^2}{K_kK_{-k}}}, \end{aligned} \quad (3.18)$$

где использовалась связь $\varepsilon_{4k} = -\varepsilon_{1,-k}$. Примечательно, что, несмотря на трехзонный характер системы, спектр фермиевских спин-поляронных возбуждений в сверхпроводящей фазе выражается только через ε_{1k} — спектр нормальной фазы той же спин-поляронной зоны. Верхние ветви спектра нормальной фазы, ε_{2k} и ε_{3k} , в уравнение (3.18) не вошли.

В интересующем нас режиме малых значений α_x выделим в спин-поляронном спектре линейный по полю вклад: $\varepsilon_{1k} = \varepsilon_{1k}^{(0)} + \delta\varepsilon_{1k}$, где $\varepsilon_{1k}^{(0)}$ — спектр спиновых поляронов при $\alpha_x = 0$, а $\delta\varepsilon_{1k}$ — линейная по α_x поправка к $\varepsilon_{1k}^{(0)}$. Из общих соображений следует, что поправка $\delta\varepsilon_{1k}$, связанная с вектор-потенциалом, линейна, а значит нечётна по k . В тоже время, численные расчеты показывают, что соответствующие поправки к функции щели в (3.18) квадратичны по k . Следовательно, в линейном по α_x приближении спин-поляронные спектры E_{1k} и E_{4k} оказываются сдвинуты на одну и ту же величину $\delta\varepsilon_{1k}$:

$$\begin{aligned} E_{1k} &= \delta\varepsilon_{1k} + E_k^{(0)}, \\ E_{4k} &= \delta\varepsilon_{1k} - E_k^{(0)}, \end{aligned} \quad (3.19)$$

где

$$E_k^{(0)} = \sqrt{\left(\varepsilon_{1k}^{(0)}\right)^2 + \frac{|\Delta(k)|^2}{K_k^2}}, \quad (3.20)$$

а функция щели берется при $\alpha_x = 0$. Видно, что для малых α_x спектр квазичастиц Боголюбова перенормируется на ту же самую функцию $\delta\epsilon_{1k}$, что и спектр спин-поляронных квазичастиц в нормальной фазе [139; 144; 145]. В то же время конкретная квазиимпульсная зависимость спектра $\epsilon_{1k}^{(0)}$ (и, следовательно, индуцированной полем поправки $\delta\epsilon_{1k}$) существенно отличается от простейшего случая квадратичного закона дисперсии и определяется структурой CuO_2 -плоскости и сильными спин-фермионными корреляциями.

3.4 $d_{x^2-y^2}$ -волновой сверхпроводящий параметр порядка

Для d -волновой сверхпроводимости, которая имеет место в купратах, параметр порядка $\Delta(k)$ определяются аномальными термодинамическими средними $\langle L_{k\uparrow}L_{-k\downarrow} \rangle$ и $\langle u_{k\uparrow}u_{-k\downarrow} \rangle$, как это видно из формулы (3.12). Эти аномальные средние нетрудно рассчитать с помощью спектральной теоремы [187] для соответствующих функций Грина. Необходимые функции Грина определяются из решения уравнения (1.19) с матрицами $M^{(6)}(k)$ (3.14) и $K^{(6)}(k)$ (3.10) и имеют вид:

$$\begin{aligned} \langle\langle L_{k\uparrow}|L_{-k\downarrow} \rangle\rangle_{\omega} &= \frac{Q_{LL}(k, \omega)\Delta(k)}{\det M^{(6)}(k, \omega)}, \\ \langle\langle u_{k\uparrow}|u_{-k\downarrow} \rangle\rangle_{\omega} &= \frac{Q_{uu}(k, \omega)\Delta(k)}{\det M^{(6)}(k, \omega)}, \end{aligned} \quad (3.21)$$

где

$$\begin{aligned} Q_{LL}(k, \omega) &= Q_{33}(k, \omega)\bar{Q}_{33}(k, \omega), \\ Q_{uu}(k, \omega) &= (s_{k,x}Q_{13}(k, \omega) - s_{k,y}Q_{23}(k, \omega)) \\ &\quad \times (s_{-k,x}\bar{Q}_{13}(k, \omega) - s_{-k,y}\bar{Q}_{23}(k, \omega))/K_k K_{-k}. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Расщепленный характер ядра интегрального уравнения (3.12) показывает, что d -волновое решение этого уравнения следует искать в следующей форме

$$\Delta(k) = \Delta_x \cos(k_x) - \Delta_y \cos(k_y), \quad (3.23)$$

где в общем случае амплитуды Δ_x и Δ_y не равны друг другу, поскольку в системе присутствует векторный потенциал α_x (2.9), нарушающий пространственную O_4 -симметрию, соответствующую CuO_2 -плоскости.

Однако, как указывалось выше, количественные изменения амплитуд Δ_x и Δ_y , вызванные включением поля, пропорциональны второй степени α_x . Поэтому в используемом здесь линейном приближении различие этих амплитуд можно пренебречь. Обозначая далее их одним символом Δ_0 , получаем, что решение уравнения (3.12) можно искать в стандартном для купратов виде:

$$\Delta(k) = \Delta_0(\cos(k_x) - \cos(k_y)). \quad (3.24)$$

3.5 Уравнения самосогласования

Вычисляя, согласно вышеизложенному, термодинамические средние в формуле (3.12) и учитывая явную k -зависимость функции $\Delta(k)$ по формуле (3.24), получаем уравнение для определения амплитуды d -волнового сверхпроводящего параметра порядка

$$1 = \frac{\tilde{I}}{N} \sum_k \sum_{j=1,4} \frac{f(-E_{jk}/T)(\cos(k_x) - \cos(k_y))^2}{(-1)^{j+1} 2E_k(E_{jk} - \varepsilon_{2k})} \times \frac{Q_{LL}(k, E_{jk}) - C_1 Q_{uu}(k, E_{jk})}{(E_{jk} - \varepsilon_{3k})(E_{jk} + \varepsilon_{2,-k})(E_{jk} + \varepsilon_{3,-k})}, \quad (3.25)$$

где, как и прежде, $f(x)$ — функция распределения Ферми-Дирака.

Напомним, что только нижняя спин-поляронная зона с $j = 1$ (и ее сопряженная с $j = 4$) модифицируется с появлением куперовской неустойчивости (см. уравнение (3.18)). Верхние ветви спектра фермиевских возбуждений с $j = 2$ и $j = 3$ не изменяются: $E_{2k} = \varepsilon_{2k}$ и $E_{3k} = \varepsilon_{3k}$.

При заданной концентрации дырок x уравнение (3.25) должно решаться совместно с уравнением для химического потенциала μ :

$$x = \frac{1}{N} \sum_k (\langle a_k^\dagger a_k \rangle + \langle b_k^\dagger b_k \rangle). \quad (3.26)$$

Две функции Грина, необходимые для вычисления средних $\langle a_k^\dagger a_k \rangle$ и $\langle b_k^\dagger b_k \rangle$, получаются из решения матричного уравнения (1.19) в сверхпроводящей фазе

и имеют вид:

$$\begin{aligned}\langle\langle a_{k\sigma}|a_{k\sigma}^\dagger\rangle\rangle_\omega &= \frac{Q_{aa^\dagger}(k, \omega)}{\det M^{(6)}(k, \omega)}, \\ \langle\langle b_{k\sigma}|b_{k\sigma}^\dagger\rangle\rangle_\omega &= \frac{Q_{bb^\dagger}(k, \omega)}{\det M^{(6)}(k, \omega)},\end{aligned}\quad (3.27)$$

где

$$\begin{aligned}Q_{aa^\dagger[bb^\dagger]}(k, \omega) &= Q_{11[22]}(k, \omega) \det \bar{M}^{(3)}(k, \omega) \\ &\quad - (\omega - D_{22[11]}(k)) \bar{Q}_{33}(k, \omega) |\Delta(k)|^2 / K_k K_{-k}.\end{aligned}\quad (3.28)$$

Используя спектральную теорему для гриновских функций (3.27), получаем уравнение для определения химического потенциала:

$$\begin{aligned}x &= \frac{2}{N} \sum_k \sum_{j=1,4} \frac{f(E_{jk}/T)}{(-1)^{j+1} 2E_k (E_{jk} - \varepsilon_{2k})} \\ &\quad \times \frac{Q_{aa^\dagger}(k, E_{jk}) + Q_{bb^\dagger}(k, E_{jk})}{(E_{jk} - \varepsilon_{3k})(E_{jk} + \varepsilon_{2,-k})(E_{jk} + \varepsilon_{3,-k})}.\end{aligned}\quad (3.29)$$

Для вычисления сверхпроводящей плотности тока согласно формуле (2.12) необходимо иметь выражения для трех термодинамических средних. Первое из них может быть получено по спектральной теореме из первой функции Грина в формуле (3.27). Для вычисления двух других средних необходимы функции Грина $\langle\langle b_{k\sigma}|a_{k\sigma}^\dagger\rangle\rangle_\omega$ и $\langle\langle L_{k\sigma}|a_{k\sigma}^\dagger\rangle\rangle_\omega$, которые также определяются из матричного уравнения (1.19) и имеют вид:

$$\begin{aligned}\langle\langle b_{k\sigma}|a_{k\sigma}^\dagger\rangle\rangle_\omega &= \frac{Q_{ba^\dagger}(k, \omega)}{\det M^{(6)}(k, \omega)}, \\ \langle\langle L_{k\sigma}|a_{k\sigma}^\dagger\rangle\rangle_\omega &= \frac{Q_{La^\dagger}(k, \omega)}{\det M^{(6)}(k, \omega)},\end{aligned}\quad (3.30)$$

где

$$\begin{aligned}Q_{ba^\dagger}(k, \omega) &= -Q_{12}(k, \omega) \det \bar{M}^{(3)}(k, \omega) \\ &\quad - D_{12}(k) \bar{Q}_{33}(k, \omega) |\Delta(k)|^2 / K_k K_{-k}, \\ Q_{La^\dagger}(k, \omega) &= Q_{13}(k, \omega) \det \bar{M}^{(3)}(k, \omega).\end{aligned}\quad (3.31)$$

В итоге получаем окончательное выражение для сверхпроводящей плотности тока:

$$\begin{aligned}j_x(q=0) &= \frac{2eg_x}{\hbar} \sum_k \sum_{j=1,4} \frac{f(E_{jk}/T) \cos(k_x/2 - \alpha_x)}{(-1)^{j+1} 2E_k (E_{jk} - \varepsilon_{2k})(E_{jk} - \varepsilon_{3k})} \\ &\quad \times \frac{\mathfrak{J}(k, E_{jk})}{(E_{jk} + \varepsilon_{2,-k})(E_{jk} + \varepsilon_{3,-k})},\end{aligned}\quad (3.32)$$

где

$$\mathfrak{J}(k, \omega) = 2\tau s_{k,x} Q_{aa^\dagger}(k, \omega) - 2(\tau - 2t_{pp}) s_{k,y} Q_{ba^\dagger}(k, \omega) + JQ_{La^\dagger}(k, \omega). \quad (3.33)$$

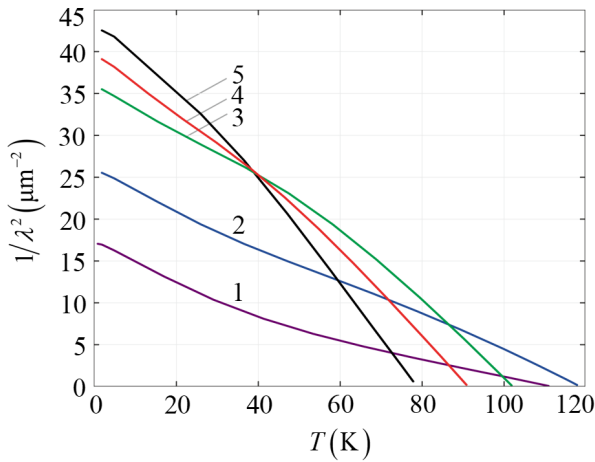
Формула (3.32) будет использоваться в следующем разделе для расчета температурной зависимости лондоновской глубины при одновременном определении Δ_0 и μ из уравнений (3.25) и (3.29) соответственно.

3.6 Лондоновская глубина проникновения: результаты и обсуждения

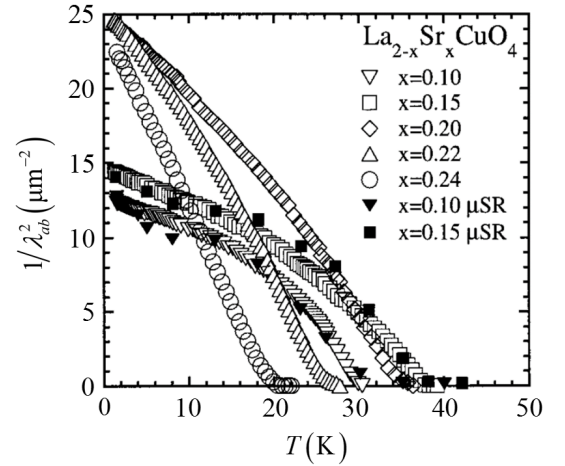
Расчет обратного квадрата лондоновской глубины при фиксированных значениях температуры T и концентрации дырок x производился по формуле (2.13). В правой части этой формулы отношение плотности тока к безразмерному полю α_x должно браться в пределе при $\alpha_x \rightarrow 0$ — фактически означает производную $j_x(q=0)$ по полю α_x в точке $\alpha_x = 0$. В рамках принятого подхода эта производная вычислялась численно. При этом для каждого значения T и x самосогласованно определялись сверхпроводящий параметр порядка (3.25) и химический потенциал (3.29).

Рассчитанные таким образом температурные зависимости обратного квадрата лондоновской глубины при пяти уровнях легирования: $x = 0.10, 0.15, 0.20, 0.22$ и 0.24 , представлены на рисунке 3.4а. Существенно, что параметры модели здесь взяты равными тем, которые использовались в предыдущих исследованиях спектральных свойств купратов [86; 188] и их фазовой T_c – x -диаграммы [70; 87; 127; 128; 189; 190]. Полученное значение λ^{-2} при $T = 0$ оказалось в пределах 30% согласия с экспериментальными данными [9; 150; 157; 162; 165; 166; 168; 169; 171; 172], несмотря на то, что специально какой-либо корректировки параметров модели не проводилось.

Из рисунка 3.4а видно, что в низкотемпературной области все кривые демонстрируют линейный характер зависимости $\lambda^{-2}(T)$ вплоть до самой низкой рассматриваемой температуры $T = 2$ К. Такое поведение, как ранее было установлено (см. разд. 3.1), связано с проявлением d -волновой симметрии сверхпроводящего параметра порядка [150]. Для x , соответствующих оптимально и сильно легированным купратам ($x \gtrsim 0.16$), функции $\lambda^{-2}(T)$ в целом являются



а) (Цветной онлайн) Температурная зависимость лондоновской глубины (λ^{-2}) при пяти уровнях легирования: $x_1 = 0.10$, $x_2 = 0.15$, $x_3 = 0.20$, $x_4 = 0.22$ и $x_5 = 0.24$.



б) Температурная зависимость обратного квадрата глубины проникновения при пяти уровнях легирования, измеренная на $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ [9]. Все обозначения на рисунке.

Рисунок 3.4 — Теоретическая и экспериментальная температурные зависимости обратного квадрата лондоновской глубины при пяти уровнях легирования. Рассчитанные зависимости $\lambda^{-2}(T)$ имеют согласие порядка 30% с экспериментальными данными из работы [9]. Значения параметров СФМ приведены в таблице 2 и равными тем, которые использовались в предшествующих исследованиях спектральных и сверхпроводящих свойств купратов.

слегка выпуклыми, что вполне согласуется с большинством экспериментов на купратных сверхпроводниках [9; 15; 150–155; 157; 158; 161–163; 191]. Кривая $\lambda^{-2}(T)$, полученная при $x = 0.10$, имеет вогнутую форму на всем температурном интервале (см. рис. 3.4а), что не характерно для большинства купратов. Это несоответствие, по всей видимости, связано с тем, что в развиваемом здесь подходе не принимается во внимание псевдощелевое поведение, наблюдаемое для купратов в режиме слабого легирования. Псевдощель возникает вследствие сильных спин-зарядовых флуктуаций, которые значительно изменяют спектральную интенсивность на контуре Ферми. Данная же теория является теорией среднего поля, и поэтому не учитывает спин-зарядовые флуктуации и, следовательно, не описывает псевдощелевое поведение. Поскольку, однако, псевдощель почти полностью подавлена при уровне легирования $x \gtrsim 0.15$, то полученные в этой главе результаты не должны измениться.

Сравнение теоретических кривых $\lambda^{-2}(T)$, представленных на рисунке 3.4а, с аналогичными экспериментальными кривыми для соединения $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ [9] на рисунке 3.4б демонстрирует хорошее количественное согласие по величине λ^{-2} при $T = 0$ и неплохое качественное согласие температурного поведения указанных кривых для $x \gtrsim 0.16$. Однако значение критической температуры оказалось завышенным примерно в три раза.

В рамках спин-поляронного подхода критическая температура T_c может быть понижена за счет уменьшения параметра обменного интеграла I , который, как следует из уравнения (3.25), играет роль константы связи. Однако значение $I \cong 0.12$ эВ для соединения LSCO установлено с хорошей точностью [83] и не может быть изменено.

С другой стороны, величина $1/\lambda^2$ при $T = 0$, неплохо согласующаяся с экспериментом [9] на $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, пропорциональна сверхтоку $j_x(q = 0)$ (2.13), а сверхток, как показывают численные расчеты, целиком определяется третьим слагаемым в уравнении (3.32), пропорциональным параметру спин-фермионной связи J . Последнее наблюдение весьма существенно с экспериментальной точки зрения, поскольку в рамках спин-поляронного подхода дает возможность судить о величине J по значению $1/\lambda^2$ при $T = 0$.

3.6.1 Точка перегиба в температурной зависимости лондоновской глубины

Во введении (разд. 3.1) этой главы уже обсуждалась особенность в температурном поведении $1/\lambda^2(T)$, связанная с наличием точки перегиба. В этой точке функция $1/\lambda^2(T)$ меняет кривизну. Точка перегиба наблюдалась в области оптимального легирования ($x \approx 0.16$) в μSR -экспериментах по измерению абсолютного значения локальной глубины проникновения магнитного поля.

На рисунке 3.5 представлен результат самосогласованного расчета лондоновской глубины при $x = 0.17$ в рамках спин-поляронного подхода. Видно, что на температурной зависимости $1/\lambda^2$ точка перегиба, обозначенная на рисунке посредством $T_{\text{inflection}}$, проявляется довольно четко. Слева от нее кривая $1/\lambda^2(T)$ выгнута вниз, а справа — вверх.

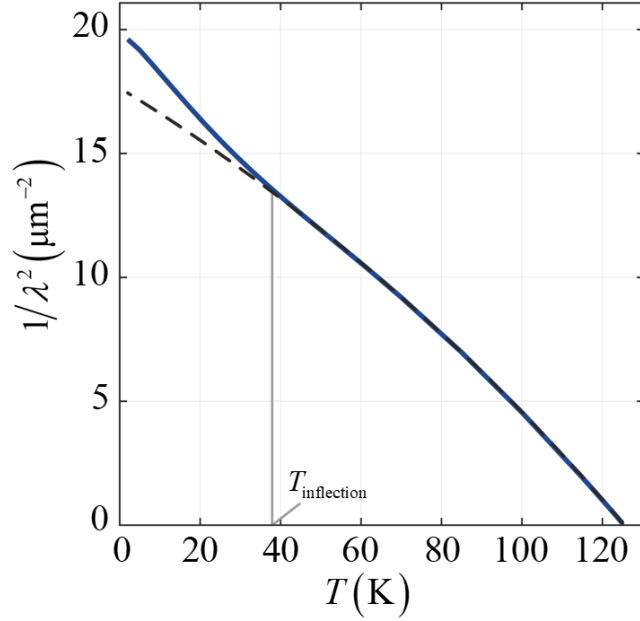


Рисунок 3.5 — (Цветной онлайн) Точка перегиба в температурной зависимости обратного квадрата лондоновской глубины в рамках спин-поляронного подхода при $x = 0.17$. Штриховая линия при $T < T_{\text{inflexion}}$ — экстраполяция функции $\lambda^{-2}(T)$ с правой стороны от точки перегиба $T_{\text{inflexion}}$. Слева от $T_{\text{inflexion}}$ кривая выгнута вниз, а справа — вверх. Величина $T_{\text{inflexion}}$ составляет примерно одну треть от T_c , как и в экспериментах. Параметр спин-фермионной связи выбран равным $J = 1.76$ эВ с тем условием, чтобы значение λ^{-2} при $T = 0$ соответствовало экспериментальным данным для $\text{La}_{1.83}\text{Sr}_{0.17}\text{CuO}_4$ [162; 168; 171]. Остальные параметры прежние (см. табл. 2).

Главный вопрос, который возникает в связи с обнаружением точки перегиба на теоретической кривой $1/\lambda^2(T)$ — это причина ее появления.

Выше уже отмечалось, что в выражении (2.13), на основании которого производится расчет $1/\lambda^2$, при взятии предела при $\alpha_x \rightarrow 0$ в правой части возникает производная плотности сверхтока $j_x(q = 0)$ по параметру α_x . Ввиду сложной зависимости плотности сверхтока от поля α_x (см. уравнение (3.32)), возникает довольно много слагаемых. Однако, как показал численный анализ, только одно из них приводит к особенности, которая проявляет себя как точка перегиба. Это слагаемое (выделенное из правой части (2.13)) имеет вид:

$$\frac{3\pi g_x e^2}{\hbar g_y g_z c^2} J^2 (\tilde{\epsilon}_p - \mu^{(0)}) \frac{1}{N} \sum_k \frac{f'(E_k^{(0)}/T) \sin(k_x) \epsilon_{2k}^{(0)} \epsilon_{3k}^{(0)} \cdot \mathbf{v}_{k,x}^{\text{s-p}}}{[(E_k^{(0)})^2 - (\epsilon_{2k}^{(0)})^2] [(E_k^{(0)})^2 - (\epsilon_{3k}^{(0)})^2]}, \quad (3.34)$$

где штрих у функции распределения Ферми-Дирака означает производную этой функции по $E_k^{(0)}$, верхний индекс “ (0) ” означает, что соответствующая функция

берется при $\alpha_x = 0$, а $v_{k,x}^{\text{s-p}}$ — проекция скорости спин-поляронных квазичастиц вдоль оси x :

$$v_{k,x}^{\text{s-p}} = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{d\varepsilon_{1k}^{(0)}}{dk_x}. \quad (3.35)$$

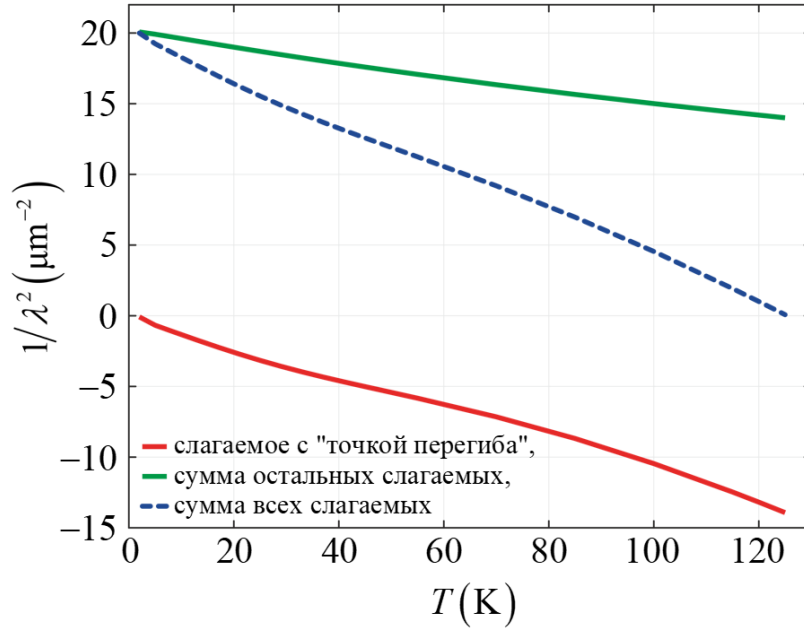
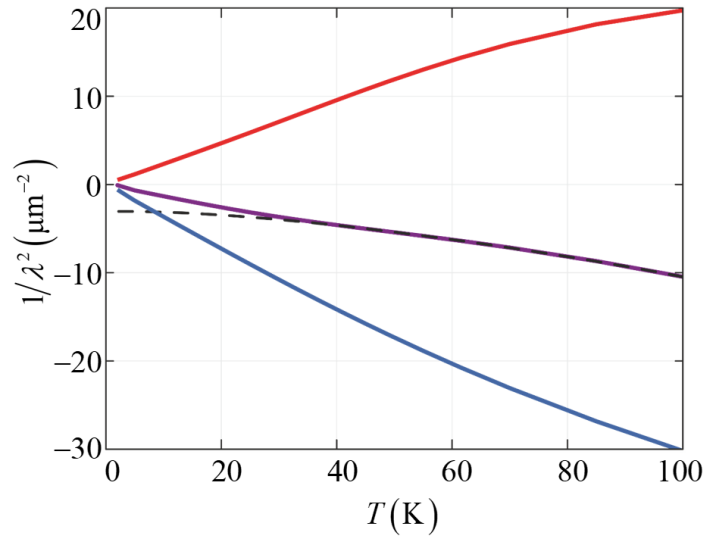
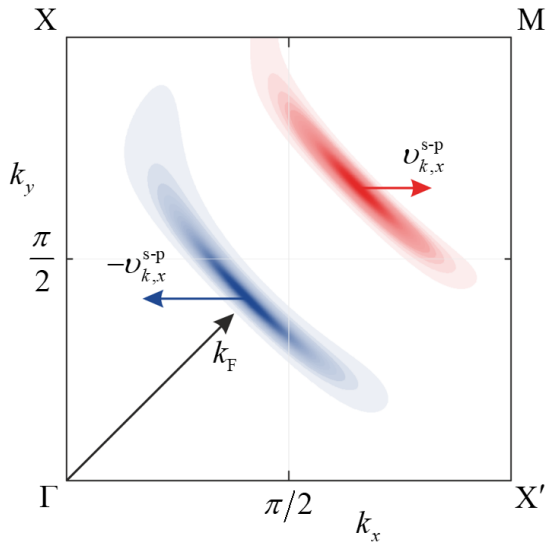


Рисунок 3.6 — (Цветной онлайн) Вклад слагаемого (3.34), определяющего точку перегиба, в температурную зависимость обратного квадрата лондоновской глубины. Красная кривая с точкой перегиба около 40 К демонстрирует температурную зависимость слагаемого (3.34), выделенного из правой части выражения (2.13). Зеленая кривая отражает сумму остальных слагаемых в правой части (2.13). Сложение красной и зеленой кривой (штриховая синяя кривая) повторяет кривую рисунка 3.5.

Из структуры выражения (3.34) видно, что причина возникновения точки перегиба в температурной зависимости $1/\lambda^2$ обусловлена особенностью спектра спин-поляронных квазичастиц, связанной с наличием в каждом квадранте зоны Бриллюэна двух областей вблизи точек пересечений поверхности Ферми (дырочного кармана) с нодальной линией. Эти две области показаны красным и синим цветом на рисунке 3.7а. Важным обстоятельством для объяснения точки перегиба является то, что фермиевские скорости в этих двух областях имеют противоположный знак, что приводит к противоположным по знаку вкладам от них в интеграл в выражении (3.34). Вклад в этот интеграл от каждой такой



а) Две окрестности точек пересечения линии нулей параметра порядка и поверхности Ферми в первом квадранте зоны Бриллюэна при $x = 0.17$ и $T = 50$ К.

б) Вклады в температурную зависимость выражения (3.34) от двух областей зоны красным и синим цветом. Параметры модели те же.

Рисунок 3.7 — (Цветной онлайн) Причина возникновения точки перегиба в температурной зависимости лондоновской глубины, рассчитанной в рамках спин-поляронной концепции. На рисунке 3.7а нодальной линией является диагональ ГМ, пересекающая поверхность Ферми спин-поляронных квазичастиц в двух точках, окрестности которых показаны синим и красным цветом. Проекция скоростей на горизонтальную ось для квазичастиц из красной области противоположны по знаку соответствующим проекциям скоростей для квазичастиц из синей области. Обозначения точек симметрии зоны Бриллюэна такие же, как и на рисунке 3.3. На рисунке 3.7б показана температурная зависимость вкладов в выражение (3.34) от двух областей в зоне Бриллюэна, обозначенных на рисунке 3.7а красным и синим цветом. Конкуренция двух этих вкладов и приводит к появлению "точки перегиба" на температурной зависимости $\lambda^{-2}(T)$, представленной на рисунке 3.5.

области (увеличивающейся по площади при возрастании температуры) представлен на рисунке 3.7б красной и синей линиями. Вклад от синей области (расположенной ближе к Г-точке зоны Бриллюэна) — отрицательный, а его зависимость от температуры имеет вогнутый вниз вид. Вклад от красной области (расположенной дальше от Г-точки), напротив, — положительный, а его темпе-

ратурная зависимость выгнута вверх. В результате конкуренции вкладов от этих двух областей в интеграл (3.34) и возникает точка перегиба на итоговой зависимости $1/\lambda^2(T)$, представленной на рисунке 3.5.

Таким образом, существование точки перегиба в температурной зависимости обратного квадрата лондоновской глубины обусловлено особенностями спектра фермиевских спин-поляронных возбуждений и, следовательно, может служить подтверждением спин-поляроной природы фермиевских квазичастиц в купратных высокотемпературных сверхпроводниках.

3.7 Резюме

В данной главе представлен вывод уравнений для сверхпроводящего параметра порядка, химического потенциала и сверхпроводящей плотности тока, которые использовались для расчета температурной зависимости лондоновской глубины в купратах в рамках спин-поляронного подхода. Численный анализ показал, что основной вклад в выражение для плотности сверхтока (3.32) обусловлен только одним (третьим) слагаемым, которое пропорционально J — самому большому параметру спин-фермионной модели.

Полученные температурные зависимости демонстрируют монотонное уменьшение $1/\lambda^2$ при увеличении T . Значения λ^{-2} при $T = 0$, рассчитанные при общепринятых параметрах спин-фермионной модели, оказались в хорошем согласии с экспериментальными данными. Критическая температура при которой λ расходится, напротив, оказалось больше экспериментального значения для LSCO примерно в 3 раза.

При высоком уровне легирования, $x = 0.24$, рассчитанная форма кривой $\lambda^{-2}(T)$ характеризуется небольшой выпуклостью вверх (см. рис. 3.4a). Такое поведение соответствует экспериментальным данным на большинстве купратных сверхпроводников. При уменьшении уровня легирования на теоретически рассчитанной температурной зависимости λ^{-2} начинает проявляться точка перегиба, в которой кривизна функции $\lambda^{-2}(T)$ меняет знак. Точка перегиба выражена наиболее ярко в области оптимального легирования $x = 0.17$ (см. рис. 3.5). Важно отметить, что экспериментально эта точка была обнаружена в нескольких купратных ВТСП. В частности, в $\text{La}_{1.83}\text{Sr}_{0.17}\text{CuO}_4$ [9; 169; 171] в

области $T \approx 12$ К, а также в других соединениях [157; 164; 165; 167; 168; 170; 172] при оптимальном легировании.

В диссертации дано объяснение причины возникновения точки перегиба в рамках спин-поляронного подхода. Последнее обстоятельство следует рассматривать как еще одно подтверждение применимости концепции спинового полярона для описания свойств купратов в сверхпроводящей фазе и, в частности, как то, что куперовское спаривание в этих ВТСП происходит в подсистеме спин-поляронных квазичастиц.

Глава 4. Влияние кулоновского взаимодействия на лондоновскую глубину в купратных сверхпроводниках

4.1 Введение

Четвертая глава диссертации посвящена изучению влияния кулоновского взаимодействия в подсистеме легированных кислородных дырок на температурную зависимость глубины проникновения магнитного поля в купратных ВТСП в рамках концепции спинового полярона. Необходимость такого исследования вызвана в первую очередь тем, что представленные в главе 3 теоретические (рисунок 3.4а) и экспериментальные (рисунок 3.4б) значения температуры T_c , при которой зависимость $\lambda^{-2}(T)$ обращается в ноль, значительно отличались. Следует отметить, что проблема учета кулоновского взаимодействия нетривиальна сама по себе и поэтому имеет смысл обсудить ее более подробно.

Большинство работ, посвященных проблеме сверхпроводимости купратов, основаны на модели Хаббарда, $t-J$ - или $t-J^*$ -модели на простой квадратной решетке. При таком подходе, как уже отмечалось в обзорной главе, одни и те же фермионы образуют как зарядовую, так и спиновую подсистемы, а обменный и спин-корреляционный механизмы инициируют d -волновое сверхпроводящее спаривание между этими фермионами [95; 96; 117; 192]. Именно в рамках указанных моделей изначально разрабатывалась проблема, связанная с межузельным кулоновским отталкиванием дырок в кислородной подсистеме. Исследования показали, что сверхпроводимость, обусловленная кинетическим, обменным и спин-корреляционным механизмами, подавляется межузельным кулоновским отталкиванием V_1 дырок, расположенных на ближайших узлах. Причем этот эффект достигается при V_1 в диапазоне от 1 до 2 эВ (см. обсуждение этого вопроса, например, в работе [193]).

Для компенсации такого сильного отталкивательного взаимодействия, подавляющего сверхпроводимость, приходилось учитывать дополнительные вклады, связанные, например, с электрон-фононным [100] или спин-флуктуационным взаимодействиями [93]. В работах [90; 94] в качестве таких дополнительных вкладов было использовано зарядово-флуктуационное взаимодействие. Следует, однако, отметить, что в этих последних работах величина

межузельного кулоновского взаимодействия выбиралась равной $V_1 = 0.2$ эВ, что значительно меньше значения спин-флуктуационного спаривания за счет кинематического взаимодействия $g_{s-f} = 1.5$ эВ, и лишь поэтому сверхпроводящая d -фаза сохранялась.

Решение проблемы подавления куперовского спаривания кулоновским взаимодействием было предложено в рамках спин-поляронной концепции. Так, в работе [87] было показано, что в купратных сверхпроводниках нейтрализация негативного влияния междузельного кулоновского взаимодействия дырок на d -волновую сверхпроводимость происходит в результате двух факторов. Во-первых, учет реальной кристаллографической структуры CuO_2 -плоскости приводит к такому Фурье-образу междузельного кулоновского взаимодействия, вид которого отвечает подрешетке ионов кислорода: $V_q = 4V_1 \cos(q_x/2) \cos(q_y/2)$. Во-вторых, сильная связь между локализованными спинами ионов меди и дырками на ионах кислорода приводит к формированию спин-поляронных квазичастиц, движущихся по подрешетке ионов меди. Поскольку в ансамбле именно этих квазичастиц развивается куперовская неустойчивость за счет сверхобменного взаимодействия между локализованными на ионах меди спинами, то d -волновая симметрия параметра порядка отвечает симметрии подрешетки ионов меди, а не ионов кислорода. В результате возникает ситуация, при которой эффективное отталкивание между спиновыми поляронами выпадает из уравнения для сверхпроводящего параметра порядка с $d_{x^2-y^2}$ -типом симметрии.

Таким образом можно заключить, что если в традиционных сверхпроводниках вклад кулоновского взаимодействия перенормируется благодаря электрон-фононному взаимодействию [141], то в высокотемпературных сверхпроводниках устранение кулоновского отталкивания в фазе сверхпроводимости происходит вследствие учета конкретной структуры элементарной ячейки и особого характера спаривательного и отталкивательного (кулоновского) взаимодействий [87].

Позднее, в работах [70; 193] исследовалось влияние кулоновского взаимодействия между следующими за ближайшими соседями V_2 , которое наряду с одноузельным хаббардовским отталкиванием двух дырок U_p в кислородной подрешетке [128] приводило к уменьшению критической температуры перехода в сверхпроводящую фазу до экспериментально наблюдаемых значений.

Последнее замечание показывает, что учетом именно кулоновского отталкивания дырок на ионах кислорода можно достичь согласия теоретических и

экспериментальных зависимостей $\lambda^{-2}(T)$, представленных на рисунках 3.4а и 3.4б. При этом, однако, возникает важный вопрос, связанный с возможными качественными изменениями температурной зависимости λ^{-2} , которые может вызвать учет кулоновского взаимодействия. В частности, не ясной представляется судьба точки перегиба, описание которой в рамках спин-поляронного подхода в предыдущей главе является одним из основных результатов данного диссертационного исследования.

Для ответа на эти вопросы в четвертой главе будет исследована модификация температурной зависимости лондоновской глубины при учете кулоновского взаимодействия. Расчет плотности сверхпроводящего тока, как и в третьей главе, будет произведен в рамках спин-поляронного подхода следуя методике, подробно описанной выше, в главе 2. В разделе 4.2 в СФМ будут введены дополнительные операторы взаимодействия, учитывающие одноузельное хаббардовское отталкивание двух дырок на одном ионе кислорода, а также межузельное кулоновское взаимодействие дырок между ближайшими и следующими за ближайшими ионами кислорода. Далее, в разделе 4.3, следуя работам [70; 128; 193], выводится система уравнений для компонент d -волнового параметра порядка, и получено общее выражение для спин-поляронного спектра в сверхпроводящей фазе. Отличие от цитированных работ состоит в том, что в данном случае вычисления проводятся при учете поля векторного потенциала (см. разд. 2.2). В разделе 4.4 приводятся система алгебраических уравнений для амплитуд сверхпроводящего параметра порядка, а также уравнения для самосогласованного вычисления функции $\lambda^{-2}(T)$ и фазовой T_c - x -диаграммы купратов. В разделе 4.5 анализируется влияние каждого из учитываемых кулоновских взаимодействий на зависимость $\lambda^{-2}(T)$. Далее, приводится количественное сравнение теоретических и экспериментальных температурных зависимостей обратного квадрата лондоновской глубины в ансамбле спин-поляронных квазичастиц. Заканчивается глава кратким резюме в разделе 4.6.

4.2 Спин-фермионная модель с учетом кулоновского взаимодействия

При учете хаббардовского одноузельного взаимодействия \hat{U}_p , а также межузельных взаимодействий для двух ближайших координационных сфер \hat{V}_{pp} , гамильтониан СФМ (называемой далее расширенной СФМ) имеет вид [194]:

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{sp-f}} = \hat{H}_h + \hat{J} + \hat{I} + \hat{U}_p + \hat{V}_{pp}, \quad (4.1)$$

где операторы \hat{H}_h , \hat{J} и \hat{I} были определены выше формулами (2.6а–2.6в), а операторы кулоновского взаимодействия \hat{U}_p и \hat{V}_{pp} даются выражениями

$$\hat{U}_p = \frac{U_p}{N} \sum_{1,2,3,4} \left(a_{1\uparrow}^\dagger a_{2\downarrow}^\dagger a_{3\downarrow} a_{4\uparrow} + b_{1\uparrow}^\dagger b_{2\downarrow}^\dagger b_{3\downarrow} b_{4\uparrow} \right) \delta_{1+2-3-4}, \quad (4.2a)$$

$$\hat{V}_{pp} = \frac{4V_1}{N} \sum_{\substack{1,2,3,4 \\ \alpha,\beta}} \varphi_{3-2} a_{1\alpha}^\dagger b_{2\beta}^\dagger b_{3\beta} a_{4\alpha} \delta_{1+2-3-4} \quad (4.2б)$$

$$+ \frac{V_2}{N} \sum_{\substack{1,2,3,4 \\ \alpha,\beta}} \left(\theta_{2-3}^{xy} a_{1\alpha}^\dagger a_{2\beta}^\dagger a_{3\beta} a_{4\alpha} + \theta_{2-3}^{yx} b_{1\alpha}^\dagger b_{2\beta}^\dagger b_{3\beta} b_{4\alpha} \right) \delta_{1+2-3-4}. \quad (4.2в)$$

Для компактности квазиимпульсы, по которым осуществляется суммирование, обозначены цифрами 1, ..., 4. Дельта-функция Дирака $\delta_{1+2-3-4}$ учитывает закон сохранения импульса. Кроме того введены обозначения:

$$\varphi_k = \cos(k_x/2) \cos(k_y/2), \quad \theta_k^{xy(yx)} = e^{ik_x(y)} + e^{-ik_y(x)}. \quad (4.3)$$

Параметр U_p в выражении для оператора \hat{U}_p описывает интенсивность одноузельного хаббардовского отталкивания. Межузельное кулоновское взаимодействие дырок на ближайших ионах кислорода определяется параметром V_1 , а на следующих за ближайшими соседями — параметром V_2 . Указанные типы кулоновского взаимодействия представлены красными волнистыми линиями на рисунке 4.1, на котором синими и зелеными стрелками также показаны исходные (основные) типы взаимодействий в СФМ.

Численные значения параметров СФМ с учетом кулоновского взаимодействия представлены в таблице 4. Оценка величины параметров кулоновского взаимодействия U_p и V_1 проводилась в работе [193] и находится в согласии с экспериментальными данными для $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ [66; 69]. Значение параметра

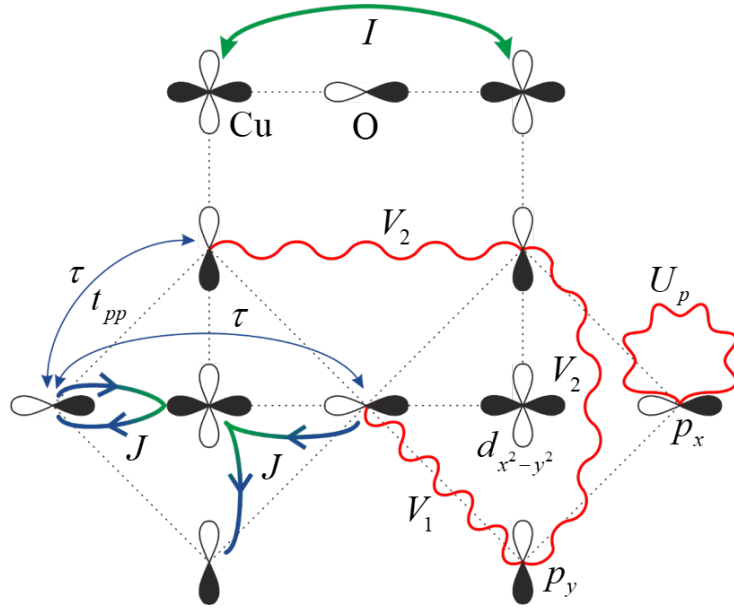


Рисунок 4.1 — (Цветной онлайн) Взаимодействия в расширенной спин-фермионной модели в структуре CuO_2 -плоскости. Показаны кислородные $p_x(p_y)$ -орбитали и медные $d_{x^2-y^2}$ -орбитали. Красные волнистые линии обозначают кулоновское взаимодействие в подсистеме дырок на ионах кислорода и описывают как одноузельное отталкивание двух дырок с параметром U_p , так и отталкивание дырок на ближайших (V_1) и следующих за ближайшими (V_2) соседями. Жирная зеленая линия со стрелками и с символом (I) обозначает антиферромагнитное обменное взаимодействие между спинами на ближайших ионах меди. Жирные сине-зеленые линии (J) соответствуют сильной спин-фермионной связи. Линия с символом τ обозначает эффективные дырочные перескоки, а линия с t_{pp} — прямые перескоки дырок между ближайшими ионами кислорода.

V_2 обсуждалось в работах [49; 70]. В соответствии с результатом этих работ значение параметра V_2 было выбрано на порядок меньше значения V_1 .

Таблица 4 — Значения параметров спин-фермионной модели (в эВ)

Параметр	τ	J	I [83]	t_{pp} [86]	U_p [66]	V_1 [69]	V_2 [49]
Значение	0.225	1.760	0.118	0.120	3.300	1.500	0.100

Заметим, что операторы кулоновского взаимодействия не зависят от векторного потенциала \vec{A} , потому что это взаимодействие не является кине-

матическим. Зависимость от магнитного поля содержится только в операторах \hat{H}_h и \hat{J} , в которых имеются процессы, описывающие перескоки дырок.

4.3 Компоненты сверхпроводящего параметра порядка и спин-поляронный спектр в магнитном поле с учетом кулоновского взаимодействия

В рамках проекционного метода, изложенного в главе 1, компоненты сверхпроводящего параметра порядка возникают как аномальные элементы энергетической матрицы $D(k)$. Следуя определению (1.17) и используя базис шести операторов (1.22) и (3.9), получаем в общем случае девять аномальных компонент. Расчеты, однако, показывают, что отличными от нуля могут быть только пять, выписанных ниже, аномальных компонент:

$$\begin{aligned}
 D_{14} &= \langle \{ [a_{k\uparrow}, \hat{\mathcal{H}}_{\text{sp-f}}], a_{-k\downarrow} \} \rangle, \\
 D_{15} &= \langle \{ [a_{k\uparrow}, \hat{\mathcal{H}}_{\text{sp-f}}], b_{-k\downarrow} \} \rangle, \\
 D_{24} &= \langle \{ [b_{k\uparrow}, \hat{\mathcal{H}}_{\text{sp-f}}], a_{-k\downarrow} \} \rangle, \\
 D_{25} &= \langle \{ [b_{k\uparrow}, \hat{\mathcal{H}}_{\text{sp-f}}], b_{-k\downarrow} \} \rangle, \\
 D_{36} &= \langle \{ [L_{k\uparrow}, \hat{\mathcal{H}}_{\text{sp-f}}], L_{-k\downarrow} \} \rangle,
 \end{aligned} \tag{4.4}$$

где $\hat{\mathcal{H}}_{\text{sp-f}}$ — гамильтониан расширенной СФМ (4.1).

Спектр нормальной фазы, как и раньше, дается нулями детерминанта 3×3 матрицы $M^{(3)}(k, \omega)$ (левый верхний блок 6×6 матрицы $M^{(6)}(k, \omega)$), определяемой уравнением (1.21). Вследствие используемого приближения малой плотности, оказывается, что спин-поляронный спектр нормальной фазы, изображенный на рисунке 3.3, не изменяется при учете кулоновских взаимодействий.

Процедура вычисления матричных элементов (4.4), оказывается несколько более объемной, но несколько не сложнее процедуры вычисления матричного элемента D_{36} , проведенной в главе 3 (см. также приложение А). В результате получаем следующие выражения для компонент d -волнового сверхпроводяще-

го параметра порядка:

$$\begin{aligned}
D_{14}(k) &= -\frac{2V_2}{N}(\cos(k_x) - \cos(k_y)) \sum_q \cos(q_x) \langle a_{q\uparrow} a_{-q\downarrow} \rangle, \\
D_{25}(k) &= -\frac{2V_2}{N}(\cos(k_x) - \cos(k_y)) \sum_q \cos(q_x) \langle b_{q\uparrow} b_{-q\downarrow} \rangle, \\
D_{36}(k) &= +\frac{U_p}{N} \sum_q \frac{C_1}{2} (\cos(k_x) \langle a_{q\uparrow} a_{-q\downarrow} \rangle + \cos(k_y) \langle b_{q\uparrow} b_{-q\downarrow} \rangle) \\
&\quad -\frac{V_2}{N}(\cos(k_x) - \cos(k_y)) \sum_q C_1 \cos(q_x) (\langle a_{q\uparrow} a_{-q\downarrow} \rangle + \langle b_{q\uparrow} b_{-q\downarrow} \rangle) \\
&\quad +\frac{1}{N} \sum_q I_{k+q} (\langle L_{q\uparrow} L_{-q\downarrow} \rangle - C_1 \langle u_{q\uparrow} u_{-q\downarrow} \rangle).
\end{aligned} \tag{4.5}$$

Обратим внимание, что две из пяти компонент, D_{15} и D_{24} , для выбранной симметрии параметра порядка, оказались равными нулю.

Аналогичная система уравнений на компоненты параметра порядка d -симметрии ранее была получена в работе [194]. Отличие уравнений (4.5) от соответствующих уравнений в указанной работе состоит в том, что в последней не учитывается зависимость от векторного потенциала магнитного поля.

Особо следует отметить, что в выражениях (4.5) отсутствует межузельное кулоновское взаимодействие дырок на ближайших ионах кислорода (V_1). Как отмечалось выше, это взаимодействие выпадает из решения для d -симметрии параметра порядка [87].

Для расчета шести ветвей фермиевского спектра в сверхпроводящей фазе E_{jk} ($j = 1, \dots, 6$) необходимо найти нули детерминанта 6×6 матрицы $M^{(6)}(k, \omega)$. С целью получения общего выражения для функции щели в спин-поляронном спектре E_{1k} , которое не ограничено условием d -симметрии параметра порядка, учтем все пять отличных, в общем случае, от нуля аномальных компонент (4.4).

Тогда, детерминант матрицы $M^{(6)}(k, \omega)$ можно представить в виде

$$\det M^{(6)}(k, \omega) = \det M^{(3)}(k, \omega) \cdot \det \bar{M}^{(3)}(k, \omega) - \mathfrak{R}(k, \omega) = 0, \tag{4.6}$$

где функция $\mathfrak{R}(k, \omega)$ содержит сумму слагаемых с аномальными компонентами матрицы $D^{(6)}(k)$. Явный вид этой функции приведен в приложении Б.2.

Далее, как и при выводе спин-поляронного спектра в сверхпроводящей фазе в разделе 3.3, представим детерминант $\det M^{(6)}(k, \omega)$ в двух эквивалентных

формах и приравняем коэффициенты при 5-й и 4-й степенях ω . В результате получим систему двух уравнений

$$\begin{cases} E_{1k} + E_{4k} = \varepsilon_{1k} + \varepsilon_{4k}, \\ E_{1k}E_{4k} = \varepsilon_{1k}\varepsilon_{4k} - |\Delta_k|^2, \end{cases} \quad (4.7)$$

где функция сверхпроводящей щели $|\Delta_k|^2$ в общем случае определяется выражением:

$$|\Delta_k|^2 = |D_{14}(k)|^2 + |D_{15}(k)|^2 + |D_{24}(k)|^2 + |D_{25}(k)|^2 + \frac{|D_{36}(k)|^2}{K_k K_{-k}}. \quad (4.8)$$

Решения системы (4.7) относительно E_{1k} и E_{4k} имеют вид аналогичный (3.18):

$$\begin{aligned} E_{1(4)k} &= \frac{\varepsilon_{1k} - \varepsilon_{1,-k}}{2} \pm E_k, \\ E_k &= \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_{1k} + \varepsilon_{1,-k}}{2}\right)^2 + |\Delta_k|^2}. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Видно, что спектр (4.9) является обобщением спектра (3.18) для случая, когда вклад в функцию щели дает не одна, а несколько аномальных компонент параметра порядка.

Компактный вид (4.9) спин-поляронного спектра в сверхпроводящей фазе позволяет простым образом записать поправки, обусловленные полем векторного потенциала, даже в том случае, когда необходимо учитывать несколько компонент параметра порядка:

$$E_k = \delta\varepsilon_{1k} + \sqrt{\varepsilon_{1k}^2 + |\Delta_k|^2}, \quad (4.10)$$

где функция щели берется при $\alpha_x = 0$ и выражается через сумму квадратов всех возможных амплитуд параметра порядка

$$|\Delta_k|^2 = |D_{14}(k)|^2 + |D_{15}(k)|^2 + |D_{24}(k)|^2 + |D_{25}(k)|^2 + \frac{|D_{36}(k)|^2}{K_k^2}, \quad (4.11)$$

а зависимость от поля векторного потенциала выделилась в качестве аддитивной линейной поправки $\delta\varepsilon_{1k}$.

4.4 Сверхпроводящий d -волновой параметр порядка. Самосогласованные уравнения

Учитывая расщепленный характер ядер интегральных уравнений (4.5) для аномальных компонент $D_{14}(k)$, $D_{25}(k)$ и $D_{36}(k)$, а также связь между аномальными средними $\langle a_{k\uparrow} a_{-k\downarrow} \rangle = -\langle b_{k\uparrow} b_{-k\downarrow} \rangle$ [194], получаем, что d -волновое решение этих уравнений следует искать в следующей форме

$$\begin{aligned} D_{14}(k) &= (\cos(k_x) - \cos(k_y)) \Delta_1, \\ D_{25}(k) &= (\cos(k_x) - \cos(k_y)) \Delta_2, \\ D_{36}(k) &= (\cos(k_x) - \cos(k_y)) \Delta_3, \end{aligned} \quad (4.12)$$

где три амплитуды Δ_i ($i = 1, 2, 3$) определяют вклад соответствующих аномальных компонент (4.5) в разложение сверхпроводящего параметра порядка.

Входящие в систему уравнений (4.5) аномальные термодинамические средние рассчитаем, как и в главе 3, по спектральной теореме [187] для соответствующих функций Грина. Эти функции Грина определяются из решения уравнения (1.19), в котором элементы матриц $M^{(6)}(k, \omega)$ и $K^{(6)}(k)$ вычисляются по базису шести операторов (1.22), (3.9) с гамильтонианом расширенной СФМ (4.1):

$$\begin{aligned} \langle\langle a_{k\uparrow} | a_{-k\downarrow} \rangle\rangle_{\omega} &= \frac{Q_{aa}(k, \omega)}{\det M^{(6)}(k, \omega)}, & \langle\langle a_{k\uparrow} | b_{-k\downarrow} \rangle\rangle_{\omega} &= \frac{Q_{ab}(k, \omega)}{\det M^{(6)}(k, \omega)}, \\ \langle\langle b_{k\uparrow} | b_{-k\downarrow} \rangle\rangle_{\omega} &= \frac{Q_{bb}(k, \omega)}{\det M^{(6)}(k, \omega)}, & \langle\langle b_{k\uparrow} | a_{-k\downarrow} \rangle\rangle_{\omega} &= \frac{Q_{ba}(k, \omega)}{\det M^{(6)}(k, \omega)}, \\ \langle\langle L_{k\uparrow} | L_{-k\downarrow} \rangle\rangle_{\omega} &= \frac{Q_{LL}(k, \omega)}{\det M^{(6)}(k, \omega)}, & & \\ \langle\langle u_{k\uparrow} | u_{-k\downarrow} \rangle\rangle_{\omega} &= s_{k,x} s_{-k,x} \langle\langle a_{k\uparrow} | a_{-k\downarrow} \rangle\rangle_{\omega} + s_{k,x} s_{-k,y} \langle\langle a_{k\uparrow} | b_{-k\downarrow} \rangle\rangle_{\omega} \\ &\quad + s_{k,y} s_{-k,x} \langle\langle b_{k\uparrow} | a_{-k\downarrow} \rangle\rangle_{\omega} + s_{k,y} s_{-k,y} \langle\langle b_{k\uparrow} | b_{-k\downarrow} \rangle\rangle_{\omega}. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Явный вид функций $Q_{aa}(k, \omega)$, $Q_{ab}(k, \omega)$, $Q_{ba}(k, \omega)$, $Q_{bb}(k, \omega)$ и $Q_{LL}(k, \omega)$ приведен в приложении Б.3. Функции $s_{k,x}$ и $s_{k,y}$ определялись в (2.8).

Подставляя полученные таким образом термодинамические средние в уравнения (4.5), получаем систему трех алгебраических уравнений для находж-

дения амплитуд Δ_i ($i = 1, 2, 3$):

$$\begin{aligned}
\Delta_1 &= -\frac{2V_2}{N} \sum_{\substack{k \\ j=1,4}} \frac{f(-E_{jk}/T) \cos(k_x)}{(-1)^{j+1} 2E_k \Psi(k, E_{jk})} Q_{aa}(k, E_{jk}), \\
\Delta_2 &= -\frac{2V_2}{N} \sum_{\substack{k \\ j=1,4}} \frac{f(-E_{jk}/T) \cos(k_x)}{(-1)^{j+1} 2E_k \Psi(k, E_{jk})} Q_{bb}(k, E_{jk}), \\
\Delta_3 &= \frac{1}{N} \sum_{\substack{k \\ j=1,4}} \frac{f(-E_{jk}/T)}{(-1)^{j+1} 2E_k \Psi(k, E_{jk})} \left(U_p C_1 Q_{aa}(k, E_{jk})/2 \right. \\
&\quad \left. - V_2 C_1 \cos(k_x) (Q_{aa}(k, E_{jk}) + Q_{bb}(k, E_{jk})) \right. \\
&\quad \left. + \tilde{I}(\cos(k_x) - \cos(k_y)) (Q_{LL}(k, E_{jk}) - C_1 Q_{uu}(k, E_{jk})) \right),
\end{aligned} \tag{4.14}$$

где

$$\Psi(k, \omega) = (\omega - \varepsilon_{2k})(\omega - \varepsilon_{3k})(\omega + \varepsilon_{2,-k})(\omega + \varepsilon_{3,-k}). \tag{4.15}$$

Заметим, что в уравнениях (4.14) суммирование по индексу j учитывает только те зоны (с $j = 1, 4$), которые пересекает химпотенциал μ . Именно эти зоны, как отмечалось в главе 3, модифицируются с появлением куперовской неустойчивости (см. уравнение (4.9)). Верхние ветви спектра фермиевских возбуждений с $j = 2, 3, 5$ и 6 не изменяются: $E_{2k} = -E_{5,-k} = \varepsilon_{2k}$ и $E_{3k} = -E_{6,-k} = \varepsilon_{3k}$.

При заданной концентрации дырок x система уравнений (4.14) должна решаться совместно с уравнением (3.26) для химического потенциала μ , а функции Грина, необходимые для расчета соответствующих средних $\langle a_k^\dagger a_k \rangle$ и $\langle b_k^\dagger b_k \rangle$, определяются уравнением (3.27), но с функциями $Q_{aa^\dagger}(k, \omega)$ и $Q_{bb^\dagger}(k, \omega)$, вычисленными при учете кулоновского отталкивания (см. приложение Б.3).

Итоговое выражение для определения μ получается в виде, аналогичном формуле (3.29), но с соответствующими функциями вычисленными при учете кулоновского взаимодействия.

При численном определении амплитуд компонент параметра порядка систему уравнений (4.14) удобно представить в матричной форме

$$\Delta = W(k, \omega)\Delta, \tag{4.16}$$

где Δ — вектор-столбец составленный из амплитуд Δ_j ($j = 1, \dots, 3$):

$$\Delta = (\Delta_1, \Delta_2, \Delta_3)^T. \tag{4.17}$$

Компоненты 3×3 матрицы $W(k, \omega)$ в уравнении (4.16) рассчитываются по формуле

$$W_{i,j}(k, \omega) = \frac{1}{N} \sum_{l=1,4} \sum_k \frac{f(-E_{lk}/T)}{(-1)^{l+1} 2E_k \Psi(k, E_{lk})} w_{i,j}(k, E_{lk}), \quad i, j = 1, 2, 3, \quad (4.18)$$

где явный вид функций $w_{i,j}(k, \omega)$ приведен в приложении Б.4.

Вычисление сверхпроводящей плотности тока проводится по формуле (2.12) аналогично тому, как это было сделано в главе 3. Отличие состоит в том, что необходимые три термодинамических средних рассчитываются по функциям Грина, выражения для которых аналогичны формулам (3.27) и (3.30), но с функциями $Q_{aa^\dagger}(k, \omega)$, $Q_{ba^\dagger}(k, \omega)$ и $Q_{La^\dagger}(k, \omega)$, найденными с учетом вкладов от кулоновских взаимодействий. Явный вид этих функций приведен в приложении Б.3.

4.5 Влияние кулоновского взаимодействия на температурную зависимость лондоновской глубины

Расчет обратного квадрата лондоновской глубины при фиксированных значениях температуры T и концентрации дырок x производился по формуле (2.13) по методике, подробно описанной в главе 3. В правой части формулы (2.13) отношение плотности тока к безразмерному полю α_x берем в пределе при $\alpha_x \rightarrow 0$ и получаем производную $j_x(q = 0)$ по полю α_x в точке $\alpha_x = 0$. Далее эта производная, как и в предыдущей главе, находится численно при самосогласованном вычислении сверхпроводящего параметра порядка и химического потенциала.

На рисунке 4.2 представлены полученные таким образом температурные зависимости обратного квадрата лондоновской глубины при легировании $x = 0.16$ и различных значениях параметров кулоновского взаимодействия: одноузельного хаббардовского отталкивания дырок U_p и межузельного кулоновского взаимодействия дырок на следующих за ближайшими ионами ксиолрда V_2 . Взаимодействие дырок на ближайших ионах кислорода V_1 , как указывалось выше, выпадает из системы уравнений для d -волновой симметрии сверхпроводящего параметра порядка. Кривая 1 функции $1/\lambda^2(T)$ на рисунке 4.2 построена в

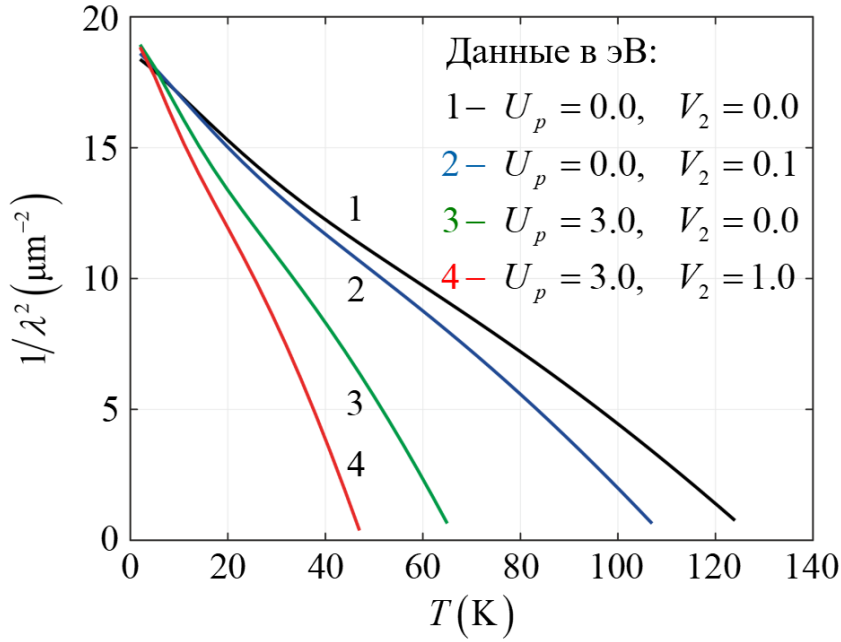


Рисунок 4.2 — Влияние кулоновского отталкивания на температурную зависимость обратного квадрата лондоновской глубины при легировании $x = 0.16$. Параметры модели приведены в таблице 4. Межузельное кулоновского взаимодействие V_1 выпадает из решения уравнения на параметр порядка [87; 96].

отсутствии кулоновского взаимодействия и повторяет результаты предыдущей главы. Следующие кривые демонстрируют изменение зависимостей $1/\lambda^2(T)$ при последовательном включении кулоновских взаимодействий. Видно, что включение U_p и V_2 приводит к значительному снижению критической температуры сверхпроводимости до экспериментально наблюдаемых значений на $\text{La}_{1.83}\text{Sr}_{0.17}\text{CuO}_4$ [9; 15; 132; 162; 167; 168; 171].

Важно отметить, что кулоновское взаимодействие не приводит к качественному изменению температурной зависимости функции $1/\lambda^2(T)$. В частности, подробно обсуждавшаяся в предыдущей главе точка перегиба сохранилась на кривых, представленных на рисунке 4.2. Точка перегиба на кривой 1 наблюдается при 40 К, а на кривой 4 — при 15 К. Причина возникновения точки перегиба на теоретических кривых $1/\lambda^2(T)$ обсуждалась ранее, в главе 3.

4.5.1 Количественное сопоставление теоретической и экспериментальной температурных зависимостей лондоновской глубины в купратах

Как показано в разделе 3.6, величина плотности сверхпроводящего тока, а значит и глубины проникновения магнитного поля (рассматриваемой в рамках теории Лондонов), в значительной степени определяется параметром спин-фермионной связи J . Из сравнения экспериментальных [9; 15] и теоретической концентрационных зависимостей $\lambda^{-2}(T \rightarrow 0)$, представленных на рисунке 4.3, видно, что хорошее согласие между этими кривыми, на рассматриваемом интервале легирования от $x = 0.10$ до $x = 0.22$, достигается при значении параметра спин-фермионной связи $J = 1.76$ эВ. Отметим, что очень близкое к этому значение параметра J было получено в работе [86] при сопоставлении теоретической и экспериментальной концентрационных зависимостей импульса Ферми в LSCO в нормальной фазе.

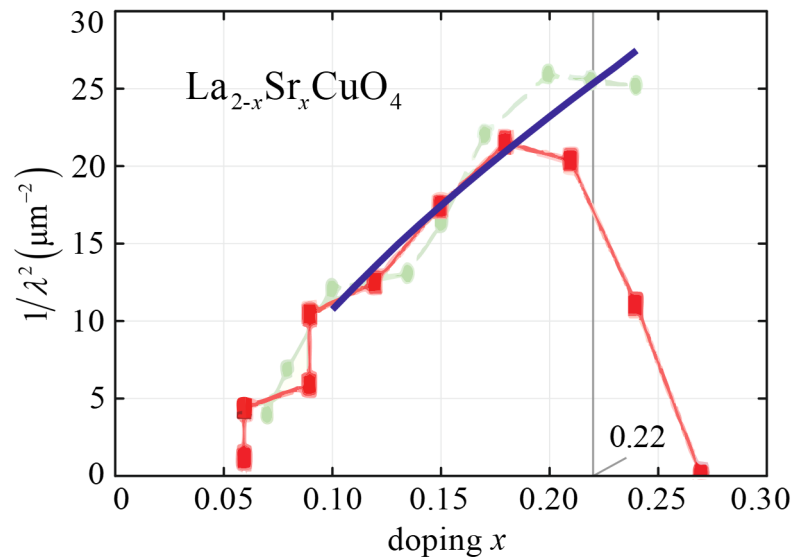


Рисунок 4.3 — (Цветной онлайн) Сопоставление теоретических и экспериментальных (для LSCO) данных концентрационной зависимости обратного квадрата лондоновской глубины при $T \rightarrow 0$. Красные прямоугольники соответствуют экспериментальным данным работы [15]. Зеленые овалы отвечают данным эксперимента из работы [9]. Линейная сплошная синяя кривая рассчитана в рамках спин-поляронной концепции с параметрами модели, представленными в таблице 4.

На рисунке 4.4 представлена фазовая T_c – x -диаграмма, рассчитанная в рамках концепции спинового полярона, а также приведены соответствующие экспериментальные данные из работы [15]. Из рисунка видно, что в интервале легирования от самого низкого значения $x = 0.06$ и до $x = 0.22$ рассчитанный сверхпроводящий купол имеет хорошее согласие с экспериментальными данными из работы [15], а следовательно, и с результатами других экспериментальных работ [7; 10–14; 16; 17; 177; 195–198]. При $x > 0.22$ анализ кривых на данном рисунке показывает, что приближение низкой плотности, использованное в диссертации, оказывается недостаточным.

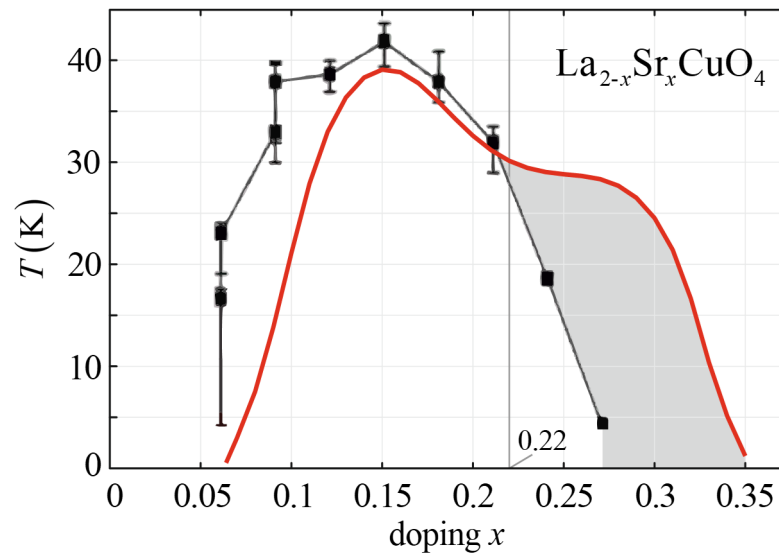


Рисунок 4.4 — (Цветной онлайн) Теоретическая и экспериментальная фазовые T_c – x -диаграммы купратных высокотемпературных сверхпроводников. Черные прямоугольники соответствуют экспериментальным данным для $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ из работы [15]. Сплошная красная линия, ограничивающая сверхпроводящую область, получена в рамках концепции спинового полярона в данной работе при параметрах модели как на рисунке 4.3. Согласие рассчитанного купола с экспериментальным наблюдается до значения $x = 0.22$. В области $x > 0.22$ приближение низкой плотности недостаточно.

На рисунке 4.5 приводятся температурные зависимости обратного квадрата лондоновской глубины, рассчитанные в рамках спин-поляронной концепции при пяти уровнях легирования. Для сравнения на этом же рисунке представлены соответствующие экспериментальные кривые из работы [9], измеренные при тех же значениях легирования x . Видно, что теоретические кривые $\lambda^{-2}(T)$, при значениях легирования в достаточно широком диапазоне: $0.15 \leq x \leq 0.22$, имеют хорошее согласие с экспериментальными данными как по максимальному

значению λ^{-2} при $T \rightarrow 0$, так и по граничному значению температуры T_c при которой λ расходится. Согласие по последнему параметру было достигнуто учетом кулоновского отталкивания в подсистеме кислородных дырок и является одним из результатов данной главы. При этом важно, что значения остальных параметров СФМ не изменялись и были взяты из таблицы 4.

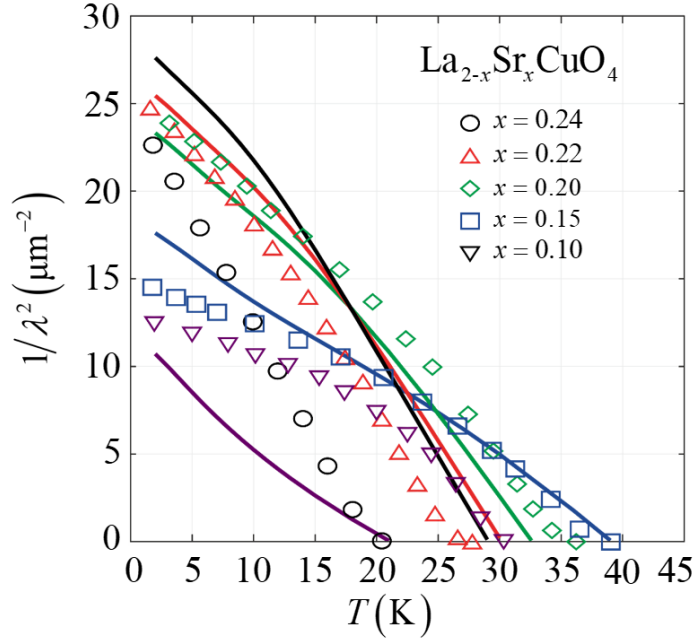


Рисунок 4.5 — (Цветной онлайн) Теоретические и экспериментальные (для LSCO) температурные зависимости обратного квадрата лондоновской глубины при пяти уровнях легирования. Сплошные кривые рассчитывались теоретически в рамках спин-поляронной концепции с параметрами модели из таблицы 4. Символьные кривые отвечают экспериментальным данным для $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ из работы [9]. Соответствие одному и тому же уровню легирования для сплошных и символьных кривых обозначается цветом.

В тоже время в области слабого ($x = 0.10$) и сильного ($x = 0.24$) легирования на рисунке 4.5 заметно некоторое расхождение экспериментальных и теоретических кривых как по их форме, так и по граничным значениям $\lambda^{-2}(0)$ и T_c . Причина расхождения кривых $\lambda^{-2}(T)$ при $x = 0.10$ подробно обсуждалась ранее в разделе 3.6 и связывалась с тем, что в нашем подходе не учитывается формирование псевдощели при значениях x меньших оптимального, $x_{opt} = 0.15$. Что касается режима сильного легирования, $x = 0.24$, то несоответствие экспериментальных и теоретических кривых по температуре T_c обусловлено, отмечавшейся выше (см. обсуждение рисунка 4.4), недостаточностью приближения низкой плотности.

4.6 Резюме

В рамках концепции спинового полярона исследовано влияние кулоновского взаимодействия на модификацию температурной зависимости лондонской глубины λ в купратных высокотемпературных сверхпроводниках.

При выводе выражения для λ^{-2} были учтены три типа кулоновских взаимодействий в кислородной подсистеме: одноузельное хаббардовское отталкивание двух дырок на одном ионе кислорода, а также междуузельное кулоновское взаимодействие дырок на ближайших и следующих за ближайшими ионами кислорода. При этом, как и должно быть [87], кулоновское взаимодействие между дырками на ближайшими ионах выпало из системы уравнений для d -волнового сверхпроводящего параметра порядка.

Расчет лондонской глубины λ проводился на основе метода, разработанного в главе 2 в рамках спин-поляронного подхода, учитывающего сильную связь J между зарядовыми и спиновыми степенями свободы, а также реальную структуру CuO_2 -плоскости с двумя ионами кислорода на элементарную ячейку.

При вычислении функций Грина, необходимых для расчета термодинамических средних, входящих в выражение для сверхпроводящей плотности тока (2.12), получено аналитическое выражение для спин-поляронного спектра E_k в сверхпроводящей фазе с учетом векторного потенциала. Существенно, что функцию щели в спектре E_k удалось представить в виде суммы квадратов модулей всех возможных амплитуд сверхпроводящего параметра порядка.

Численные расчеты температурной зависимости обратного квадрата лондонской глубины показали, что учет кулоновского взаимодействия приводит, как и ожидалось [70; 193], к значительному снижению критической температуры сверхпроводимости. Это обстоятельство позволило достичь хорошего согласования теоретических и экспериментальных данных для $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ [9; 15; 132; 162; 167; 168; 171] в широком диапазоне легирования: $0.15 \leq x \leq 0.22$.

Количественный анализ теоретических и экспериментальных данных на основе концентрационной зависимости обратного квадрата лондонской глубины при $T = 0$ и фазовой T_c-x -диаграммы показал, что учет кулоновского отталкивания в подсистеме кислородных дырок в рамках концепции спинового полярона достаточно хорошо описывает как граничные значения экспериментальных зависимостей $\lambda^{-2}(T)$, так и качественно повторяет особенности

температурного поведения лондоновской глубины, а именно выпуклый характер кривых и точку перегиба при $T \approx 12$ К для $\text{La}_{1.83}\text{Sr}_{0.17}\text{CuO}_4$ [15; 162; 167; 168; 171].

Заключение

Основные выводы, которые следуют из изложенных в диссертации результатов, могут быть сформулированы следующим образом:

1. Для упрощения процедуры вычисления лондоновской глубины в ансамбле спиновых поляронов, описываемых в рамках спин-фермионной модели купратов, предложено модифицировать традиционный метод расчета сверхпроводящей плотности тока. Модификация состоит в том, чтобы после подстановки Пайерлса вместо трудоемких вычислений функции отклика в линейном по векторному потенциалу \vec{A} приближении (с одновременным выделением парамагнитной и диамагнитной частей тока), вычислять непосредственно саму плотность тока \vec{j} . Это приводит к относительно простому выражению для \vec{j} , в котором учет векторного потенциала отражается в виде сдвигки квазиимпульса: $\hbar\vec{k} \rightarrow \hbar\vec{k} - (e/c)\vec{A}$. Выделение же линейной по полю поправки к \vec{j} осуществляется численно непосредственно в процессе вычисления лондоновской длины λ .
2. На основе численного анализа установлено, что почти весь вклад в сверхпроводящую плотность тока обусловлен только одним слагаемым в выражении для \vec{j} , которое пропорционально константе спин-фермионной связи J . Это означает, что сопоставление теоретических и экспериментальных значений λ^{-2} при $T = 0$ позволяет количественно оценивать параметр J .
3. Самосогласованные численные расчеты температурной зависимости обратного квадрата лондоновской глубины в ансамбле спин-поляронных квазичастиц показали, что при значениях концентрации дырок, отвечающих оптимальному легированию, на кривой $\lambda^{-2}(T)$ возникает точка перегиба. Показано, что причина появления точки перегиба обусловлена особенностями спектра спин-поляронных квазичастиц, приводящих к тому, что в зоне Бриллюэна возникают два типа областей (отвечающих двум точкам пересечения дырочных карманов с нодальной линией), вклад от которых в интеграл, определяющий значение λ^{-2} , противоположен по знаку. Конкуренция этих вкладов и является причиной "точки перегиба" в зависимости $\lambda^{-2}(T)$.

4. Аналитически показано, что функция $|\Delta_k|^2$, описывающая щель Боголюбовских возбуждений в ансамбле спин-поляронных квазичастиц, выражается в виде суммы квадратов модулей амплитуд, определяющих вклад в куперовское спаривание от каждой пары базисных операторов.
5. Продемонстрировано, что влияние кулоновского взаимодействия на температурную зависимость обратного квадрата лондоновской глубины в спин-поляронном подходе не приводит к качественному изменению кривой $1/\lambda^2(T)$, а проявляется лишь в уменьшении критической температуры сверхпроводимости до экспериментально наблюдаемых значений. Точка перегиба в зависимости $1/\lambda^2(T)$ остается.

Благодарности

Считаю своим приятным долгом выразить искреннюю признательность моему научному руководителю — заведующему лабораторией теоретической физики Института физики им. Л. В. Киренского СО РАН, доктору физико-математических наук Дмитрию Михайловичу Дзедзисашвили за постановку актуальных задач исследования, многочисленные консультации, создание всех условий для плодотворной работы, чуткое научное руководство.

Хочу поблагодарить докторов наук, профессоров В. В. Валькова, А. Ф. Садреева, М. М. Коршунова и С. Г. Овчинникова за полезные критические замечания и обсуждение различных вопросов диссертации. Выражаю глубокую благодарность оппонентам по диссертации, докторам физико-математических наук Михеенкову Андрею Витальевичу и Некрасову Игорю Александровичу за пронизательные вопросы и полезную критику диссертации.

В заключение хочу сказать искренние слова благодарности моей супруге, Даше Лебедевой, за ценные советы и безграничное терпение. Её роль в моем продвижении по научному пути невозможно переоценить.

Список литературы

1. *Bednorz, J. G.* Possible high- T_c superconductivity in the Ba-La-Cu-O system [Текст] / J. G. Bednorz, K. A. Müller // Zeitschrift für Physik B Condensed Matter. — 1986. — Vol. 64, no. 2. — P. 189–193.
2. *Kruchinin, S. P.* Physics of high- T_c superconductors [Текст] / S. P. Kruchinin // Reviews in Theoretical Science. — 2014. — Vol. 2, no. 2. — P. 124–145.
3. *Chu, C. W.* Hole-doped cuprate high temperature superconductors [Текст] / C. W. Chu, L. Z. Deng, B. Lv // Physica C: Superconductivity and its Applications. — 2015. — Vol. 514. — P. 290–313.
4. Superconductivity above 130 K in the Hg-Ba-Ca-Cu-O system [Текст] / A. Schilling [et al.] // Nature. — 1993. — Vol. 363, no. 6424. — P. 56–58.
5. Superconductivity up to 164 K in $\text{HgBa}_2\text{Ca}_{m-1}\text{Cu}_m\text{O}_{2m+2+d}$ ($m = 1, 2, \text{ and } 3$) under quasihydrostatic pressures [Текст] / L. Gao [et al.] // Physical Review B. — 1994. — Vol. 50. — P. 4260–4263.
6. High-temperature superconductors of the family (RE) $\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ and their application [Текст] / S. I. Bondarenko [et al.] // Low Temperature Physics. — 2017. — Vol. 43, no. 10. — P. 1125–1151.
7. *Rahman, M. A.* A review on cuprate based superconducting materials including characteristics and applications [Текст] / M. A. Rahman, M. Z. Rahaman, M. N. Samsuddoha // American Journal of Physics and Applications. — 2015. — Vol. 3, no. 2. — P. 39–56.
8. *Gupta, S. K.* Review of high temperature superconductors and application in various fields [Текст] / S. K. Gupta, H. Jangam, N. Sharma // Research & Development in Material Science. — 2018. — Vol. 7. — P. 000668.
9. Effects of carrier concentration on the superfluid density of high- T_c cuprates [Текст] / C. Panagopoulos [et al.] // Physical Review B. — 1999. — Vol. 60, no. 21. — P. 14617.
10. *Damascelli, A.* Angle-resolved photoemission studies of the cuprate superconductors [Текст] / A. Damascelli, Z. Hussain, Z.-X. Shen // Reviews of Modern Physics. — 2003. — Vol. 75, no. 2. — P. 473.

11. The phase diagram of high- T_c superconductors [Текст] / J. L. Tallon [et al.] // Physica C: Superconductivity. — 2004. — Vol. 415, no. 1/2. — P. 9–14.
12. Scanning tunneling spectroscopy of high-temperature superconductors [Текст] / Ø. Fischer [et al.] // Reviews of Modern Physics. — 2007. — Vol. 79, no. 1. — P. 353.
13. *Varma, C.* Mind the pseudogap [Текст] / C. Varma // Nature. — 2010. — Vol. 468, no. 7321. — P. 184–185.
14. *Sachdev, S.* Where is the quantum critical point in the cuprate superconductors? [Текст] / S. Sachdev // Physica Status Solidi (b). — 2010. — Vol. 247, no. 3. — P. 537–543.
15. Superconductor-to-metal quantum phase transition in overdoped $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ [Текст] / T. R. Lemberger [et al.] // Physical Review B. — 2011. — Vol. 83, no. 14. — P. 140507.
16. *Uchida, S.* High temperature superconductivity: The road to higher critical temperature [Текст]. Vol. 213 / S. Uchida. — Springer, 2014.
17. The strange metal state of the electron-doped cuprates [Текст] / R. L. Greene [et al.] // Annual Review of Condensed Matter Physics. — 2020. — Vol. 11. — P. 213–229.
18. Intimate link between charge density wave, pseudogap and superconducting energy scales in cuprates [Текст] / B. Loret [et al.] // Nature Physics. — 2019. — Vol. 15, no. 8. — P. 771–775.
19. *Park, C.* Structures of high-temperature cuprate superconductors [Текст] / C. Park, R. L. Snyder // Journal of the American Ceramic Society. — 1995. — Vol. 78, no. 12. — P. 3171–3194.
20. *Tsuei, C. C.* Pairing symmetry in cuprate superconductors [Текст] / C. C. Tsuei, J. R. Kirtley // Reviews of Modern Physics. — 2000. — Vol. 72, no. 4. — P. 969.
21. Role of the electron-phonon interaction in the strongly correlated cuprate superconductors [Текст] / Z.-X. Shen [et al.] // Philosophical Magazine B. — 2002. — Vol. 82, no. 13. — P. 1349–1368.

22. A review of electron-phonon coupling seen in the high- T_c superconductors by angle-resolved photoemission studies (ARPES) [Текст] / T. Cuk [et al.] // Physica Status Solidi (b). — 2005. — Vol. 242, no. 1. — P. 11–29.
23. *Dias, C. O.* Superconducting and DDW states of high- T_c cuprates with Rashba and Dresselhaus spin-orbit couplings [Текст] / C. O. Dias, H. O. Frota, A. Ghosh // Physica Status Solidi (b). — 2016. — Vol. 253, no. 9. — P. 1824–1829.
24. Revealing hidden spin-momentum locking in a high-temperature cuprate superconductor [Текст] / K. Gotlieb [et al.] // Science. — 2018. — Vol. 362, no. 6420. — P. 1271–1275.
25. *Yu, J.* Electronic structure and properties of $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ [Текст] / J. Yu, K. T. Park, A. J. Freeman // Physica C: Superconductivity. — 1991. — Vol. 172, no. 5/6. — P. 467–476.
26. *Prelovšek, P.* Spin-fluctuation mechanism of superconductivity in cuprates [Текст] / P. Prelovšek, A. Ramšak // Physical Review B. — 2005. — Vol. 72, no. 1. — P. 012510.
27. *Nakano, T.* Superconductivity due to spin fluctuations originating from multiple Fermi surfaces in the double chain superconductor $\text{Pr}_2\text{Ba}_4\text{Cu}_7\text{O}_{15-\delta}$ [Текст] / T. Nakano, K. Kuroki, S. Onari // Physical Review B. — 2007. — Vol. 76, no. 1. — P. 014515.
28. *Plakida, N. M.* Spin fluctuations and high-temperature superconductivity in cuprates [Текст] / N. M. Plakida // Physica C: Superconductivity and its Applications. — 2016. — Vol. 531. — P. 39–59.
29. *Plakida, N. M.* Theory of superconductivity and spin excitations in cuprates [Текст] / N. M. Plakida // Physica C: Superconductivity and its Applications. — 2018. — Vol. 549. — P. 69–72.
30. *Yanagisawa, T.* Mechanism of high-temperature superconductivity in correlated-electron systems [Текст] / T. Yanagisawa // Condensed Matter. — 2019. — Vol. 4, no. 2. — P. 57.
31. *Mott, N.* Metal-insulator transitions [Текст] / N. Mott. — CRC Press, 2004.
32. *Vojta, M.* Lattice symmetry breaking in cuprate superconductors: stripes, nematics, and superconductivity [Текст] / M. Vojta // Advances in Physics. — 2009. — Vol. 58, no. 6. — P. 699–820.

33. Pseudogap, superconducting gap, and Fermi arc in high- T_c cuprates revealed by angle-resolved photoemission spectroscopy [Текст] / T. Yoshida [et al.] // Journal of the Physical Society of Japan. — 2011. — Vol. 81, no. 1. — P. 011006.
34. Subgap structures and pseudogap in cuprate superconductors: Role of density waves [Текст] / S. Verret [et al.] // Physical Review B. — 2017. — Vol. 95, no. 5. — P. 054518.
35. Influence of oxygen nonstoichiometry on the structure and physical properties of $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ [Текст] / I. E. Graboy [et al.] // Soviet Physics-Solid State(USA). — 1988. — Vol. 30, no. 11. — P. 1971—1975.
36. *Dagotto, E.* Correlated electrons in high-temperature superconductors [Текст] / E. Dagotto // Reviews of Modern Physics. — 1994. — Vol. 66, no. 3. — P. 763.
37. Crystal structure of $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10}$, a 125 K superconductor [Текст] / C. C. Torardi [et al.] // Science. — 1988. — Vol. 240, no. 4852. — P. 631—634.
38. *Fulde, P.* Electron correlations in molecules and solids [Текст]. Vol. 100 / P. Fulde. — Springer Science & Business Media, 2012.
39. *Pickett, W. E.* Electronic structure of the high-temperature oxide superconductors [Текст] / W. E. Pickett // Reviews of Modern Physics. — 1989. — Vol. 61, no. 2. — P. 433.
40. Bulk superconductivity at 36 K in $\text{La}_{1.8}\text{Sr}_{0.2}\text{CuO}_4$ [Текст] / R. J. Cava [et al.] // Physical Review Letters. — 1987. — Vol. 58, no. 4. — P. 408.
41. Magnetic excitations in pure, lightly doped, and weakly metallic La_2CuO_4 [Текст] / B. Keimer [et al.] // Physical Review B. — 1992. — Vol. 46, no. 21. — P. 14034.
42. *Birgeneau, R. J.* The Richtmyer Memorial Lecture (January 1989): Novel magnetic phenomena and high-temperature superconductivity in Lamellar copper oxides [Текст] / R. J. Birgeneau // American Journal of Physics. — 1990. — Vol. 58, no. 1. — P. 28—40.
43. *Harshman, D. R.* Concerning the nature of high- T_c superconductivity: Survey of experimental properties and implications for interlayer coupling [Текст] / D. R. Harshman, M. J. A. P. // Physical Review B. — 1992. — Vol. 45, no. 18. — P. 10684.

44. *Anderson, P. W.* The resonating valence bond state in La_2CuO_4 and superconductivity [Текст] / P. W. Anderson // Science. — 1987. — Vol. 235, no. 4793. — P. 1196—1198.
45. *Hubbard, J.* Electron correlations in narrow energy bands [Текст] / J. Hubbard // Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences. — 1963. — Vol. 276, no. 1365. — P. 238—257.
46. *Imada, M.* Metal-insulator transitions [Текст] / M. Imada, A. Fujimori, Y. Tokura // Reviews of modern physics. — 1998. — Vol. 70, no. 4. — P. 1039.
47. *Scalapino, D. J.* d -Wave pairing near a spin-density-wave instability [Текст] / D. J. Scalapino, J. E. Loh, J. E. Hirsch // Physical Review B. — 1986. — Vol. 34, no. 11. — P. 8190.
48. *Scalapino, D. J.* Fermi-surface instabilities and superconducting d -wave pairing [Текст] / D. J. Scalapino, J. E. Loh, J. E. Hirsch // Physical Review B. — 1987. — Vol. 35, no. 13. — P. 6694.
49. *Zaitsev, R. O.* On the possibility of pair condensation in the Hubbard model with strong repulsion [Текст] / R. O. Zaitsev // Physics Letters A. — 1988. — Vol. 134, no. 3. — P. 199—201.
50. *Fukuyama, H.* Two-dimensional Hubbard model at low electron density [Текст] / H. Fukuyama, Y. Hasegawa, O. Narikiyo // Journal of the Physical Society of Japan. — 1991. — Vol. 60, no. 6. — P. 2013—2030.
51. *Baranov, M. A.* d -Wave pairing in the two-dimensional Hubbard model with low filling [Текст] / M. A. Baranov, M. Y. Kagan // Zeitschrift für Physik B Condensed Matter. — 1992. — Vol. 86, no. 2. — P. 237—239.
52. *Izyumov, Y. A.* Hubbard model of strong correlations [Текст] / Y. A. Izyumov // Physics-Uspekhi. — 1995. — Vol. 38, no. 4. — P. 385.
53. *Zanchi, D.* Superconducting instabilities of the non-half-filled Hubbard model in two dimensions [Текст] / D. Zanchi, H. J. Schulz // Physical Review B. — 1996. — Vol. 54, no. 13. — P. 9509.
54. *Tasaki, H.* The Hubbard model "— an introduction and selected rigorous results [Текст] / H. Tasaki // Journal of Physics: Condensed Matter. — 1998. — Vol. 10, no. 20. — P. 4353.

55. *Hlubina, R.* Phase diagram of the weak-coupling two-dimensional $t-t'$ Hubbard model at low and intermediate electron density [Текст] / R. Hlubina // Physical Review B. — 1999. — Vol. 59, no. 14. — P. 9600.
56. *Raghu, S.* Superconductivity in the repulsive Hubbard model: An asymptotically exact weak-coupling solution [Текст] / S. Raghu, S. A. Kivelson, D. J. Scalapino // Physical Review B. — 2010. — Vol. 81, no. 22. — P. 224505.
57. *Alexandrov, A. S.* Unconventional high-temperature superconductivity from repulsive interactions: Theoretical constraints [Текст] / A. S. Alexandrov, V. V. Kabanov // Physical Review Letters. — 2011. — Vol. 106, no. 13. — P. 136403.
58. *Schubin, S.* On the electron theory of metals [Текст] / S. Schubin, S. Wonsowsky // Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character. — 1934. — Vol. 145, no. 854. — P. 159–180.
59. Effects of longer-range interactions on unconventional superconductivity [Текст] / S. Raghu [et al.] // Physical Review B. — 2012. — Vol. 85, no. 2. — P. 024516.
60. Effect of long-range interactions on the Kohn-Luttinger mechanism of the cooper instability in the Shubin-Vonsowsky model [Текст] / M. Y. Kagan [et al.] // Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters. — 2013. — Vol. 97, no. 4. — P. 226–232.
61. The Kohn-Luttinger mechanism and phase diagram of the superconducting state in the Shubin-Vonsovsky model [Текст] / M. Y. Kagan [et al.] // Journal of Experimental and Theoretical Physics. — 2013. — Vol. 117, no. 4. — P. 728–741.
62. *Emery, V. J.* Theory of high- T_c superconductivity in oxides [Текст] / V. J. Emery // Physical Review Letters. — 1987. — Vol. 58, no. 26. — P. 2794.
63. *Varma, C. M.* Charge transfer excitations and superconductivity in “ionic” metals [Текст] / C. M. Varma, S. Schmitt-Rink, E. Abrahams // 681. — 1987. — Vol. 62, no. 10. — P. 681–685.

64. *Gaididei, Y. B.* On a theory of the electronic spectrum and magnetic properties of high- T_c superconductors [Текст] / Y. B. Gaididei, V. M. Loktev // Physica Status Solidi (b). — 1988. — Vol. 147, no. 1. — P. 307–319.
65. *Zhang, F. C.* Effective Hamiltonian for the superconducting Cu oxides [Текст] / F. C. Zhang, T. M. Rice // Physical Review B. — 1988. — Vol. 37, no. 7. — P. 3759.
66. *Hybertsen, M. S.* Calculation of Coulomb-interaction parameters for La_2CuO_4 using a constrained-density-functional approach [Текст] / M. S. Hybertsen, M. Schlüter, N. E. Christensen // Physical Review B. — 1989. — Vol. 39, no. 13. — P. 9028.
67. *McMahan, A. K.* Cuprate parameters from numerical Wannier functions [Текст] / A. K. McMahan, J. F. Annett, R. M. Martin // Physical Review B. — 1990. — Vol. 42, no. 10. — P. 6268.
68. *Eskes, H.* Cluster-model calculation of the electronic structure of CuO: A model material for the high- T_c superconductors [Текст] / H. Eskes, L. H. Tjeng, G. A. Sawatzky // Physical Review B. — 1990. — Vol. 41, no. 1. — P. 288.
69. *Fischer, M. H.* Mean-field analysis of intra-unit-cell order in the Emery model of the CuO_2 plane [Текст] / M. H. Fischer, E.-A. Kim // Physical Review B. — 2011. — Vol. 84, no. 14. — P. 144502.
70. Stability of the d -wave pairing with respect to the intersite Coulomb repulsion in cuprate superconductors [Текст] / V. V. Val'kov [et al.] // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. — 2017. — Vol. 440. — P. 123–126.
71. *Emery, V. J.* Mechanism for high-temperature superconductivity [Текст] / V. J. Emery, G. Reiter // Physical Review B. — 1988. — Vol. 38, no. 7. — P. 4547.
72. Experimental electronic structure studies of $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ [Текст] / N. Nücker [et al.] // Zeitschrift für Physik B Condensed Matter. — 1987. — Vol. 67. — P. 9–14.
73. *Hubbard, J.* Electron correlations in narrow energy bands-IV. The atomic representation [Текст] / J. Hubbard // Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences. — 1965. — Vol. 285, no. 1403. — P. 542–560.

74. *Bogoliubov, N. N.* Lectures on quantum statistics [Текст]. Vol. 2 / N. N. Bogoliubov. — CRC Press, 1970.
75. *Barabanov, A. F.* Elementary excitations in CuO₂ planes [Текст] / A. F. Barabanov, L. A. Maksimov, G. V. Uimin // Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters. — 1988. — Vol. 47, no. 10. — P. 622–625.
76. *Prelovšek, P.* Two band model for superconducting copper oxides [Текст] / P. Prelovšek // Physics Letters A. — 1988. — Vol. 126, no. 4. — P. 287–290.
77. *Zaanen, J.* Canonical perturbation theory and the two-band model for high- T_c superconductors [Текст] / J. Zaanen, A. M. Oleś // Physical Review B. — 1988. — Vol. 37, no. 16. — P. 9423.
78. *Stechel, E. B.* Electronic structure of CuO₂ sheets and spin-driven high- T_c superconductivity [Текст] / E. B. Stechel, D. R. Jennison // Physical Review B. — 1988. — Vol. 38, no. 7. — P. 4632.
79. *Matsukawa, H.* Effective Hamiltonian for high- T_c Cu oxides [Текст] / H. Matsukawa, H. Fukuyama // Journal of the Physical Society of Japan. — 1989. — Vol. 58, no. 8. — P. 2845–2866.
80. On the origin of the saddle in the spectrum of holes in a CuO₂ plane [Текст] / A. F. Barabanov [et al.] // Journal of Experimental and Theoretical Physics. — 1996. — Vol. 83. — P. 819–828.
81. *Barabanov, A. F.* Spectral function of small spin polaron in two-dimensional spherically symmetric antiferromagnetic state [Текст] / A. F. Barabanov, R. O. Kuzian, L. A. Maksimov // Physical Review B. — 1997. — Vol. 55, no. 7. — P. 4015.
82. *Lau, B.* High-spin polaron in lightly doped CuO₂ planes [Текст] / B. Lau, M. Berciu, G. A. Sawatzky // Physical Review Letters. — 2011. — Vol. 106, no. 3. — P. 036401.
83. Two-dimensional antiferromagnetic quantum spin-fluid state in La₂CuO₄ [Текст] / G. Shirane [et al.] // Physical Review Letters. — 1987. — Vol. 59, no. 14. — P. 1613.
84. Self-consistent born approximation for the hole motion in the three-band model: a comparison with photoemission experiments [Текст] / O. A. Starykh [et al.] // Physical Review B. — 1995. — Vol. 52, no. 17. — P. 12534.

85. *Ogata, M.* The t – J model for the oxide high- T_c superconductors [Текст] / M. Ogata, H. Fukuyama // Reports on Progress in Physics. — 2008. — Vol. 71, no. 3. — P. 036501.
86. *Dzhebisashvili, D. M.* Fermi surface evolution in the ensemble of spin-polarized quasiparticles in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ [Текст] / D. M. Dzhebisashvili, V. V. Val'kov, A. F. Barabanov // Journal of Experimental and Theoretical Physics letters. — 2014. — Vol. 98, no. 9. — P. 528–533.
87. *Val'kov, V. V.* Origin of the spin polaron quasiparticles and their Cooper instability in high- T_c superconductors [Текст] / V. V. Val'kov, D. M. Dzhebisashvili, A. F. Barabanov // Journal of Superconductivity and Novel Magnetism. — 2016. — Vol. 29, no. 4. — P. 1049–1055.
88. *Yushankhai, V. Y.* Singlet pairing in the single-band Hubbard model: contributions of second order in t/U [Текст] / V. Y. Yushankhai, G. M. Vujičić, R. B. Žakula // Physics Letters A. — 1990. — Vol. 151, no. 5. — P. 254–256.
89. *Zaitsev, R. O.* Peculiarities of the electron mechanism of superconductivity [Текст] / R. O. Zaitsev // Journal of Experimental and Theoretical Physics. — 2004. — Vol. 98, no. 4. — P. 780–792.
90. Exchange and spin-fluctuation mechanisms of superconductivity in cuprates [Текст] / N. M. Plakida [et al.] // Journal of Experimental and Theoretical Physics. — 2003. — Vol. 97, no. 2. — P. 331–342.
91. *Vladimirov, A. A.* Static spin susceptibility in the t – J model [Текст] / A. A. Vladimirov, D. Ihle, N. M. Plakida // Theoretical and Mathematical Physics. — 2007. — Vol. 152, no. 3. — P. 1331–1341.
92. *Val'kov, V. V.* Splitting of the lower subband of Hubbard fermions in the Shubin–Vonsowsky model under the influence of strong intersite correlations [Текст] / V. V. Val'kov, M. M. Korovushkin // Journal of Experimental and Theoretical Physics. — 2011. — Vol. 112, no. 1. — P. 108–120.
93. *Misawa, T.* Origin of high- T_c superconductivity in doped Hubbard models and their extensions: Roles of uniform charge fluctuations [Текст] / T. Misawa, M. Imada // Physical Review B. — 2014. — Vol. 90, no. 11. — P. 115137.

94. *Plakida, N. M.* Kinematic spin-fluctuation mechanism of high-temperature superconductivity [Текст] / N. M. Plakida, V. S. Oudovenko // Journal of Experimental and Theoretical Physics. — 2014. — Vol. 119, no. 3. — P. 554–566.
95. *Izyumov, Y. A.* Strongly correlated electrons: The t – J model [Текст] / Y. A. Izyumov // Physics-Uspekhi. — 1997. — Vol. 40, no. 5. — P. 445.
96. *Izyumov, Y. A.* Spin-fluctuation mechanism of high- T_c superconductivity and order-parameter symmetry [Текст] / Y. A. Izyumov // Physics-Uspekhi. — 1999. — Vol. 42, no. 3. — P. 215.
97. The strong effect of three-center interactions on the formation of superconductivity with $d_{x^2-y^2}$ symmetry in the t – J^* model [Текст] / V. V. Val'kov [et al.] // Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters. — 2002. — Vol. 75, no. 8. — P. 378–382.
98. *Moriya, T.* Antiferromagnetic spin fluctuation and superconductivity [Текст] / T. Moriya, K. Ueda // Reports on Progress in Physics. — 2003. — Vol. 66, no. 8. — P. 1299.
99. *Val'kov, V. V.* The electron energy spectrum and superconducting transition temperature of strongly correlated fermions with three-center interactions [Текст] / V. V. Val'kov, D. M. Dzebisashvili // Journal of Experimental and Theoretical Physics. — 2005. — Vol. 100, no. 3. — P. 608–616.
100. *Shneyder, E. I.* Isotope effect in the model of strongly correlated electrons with the magnetic and phonon superconducting pairing mechanisms [Текст] / E. I. Shneyder, S. G. Ovchinnikov // Journal of Experimental and Theoretical Physics. — 2009. — Vol. 109, no. 6. — P. 1017–1021.
101. *Ovchinnikov, S. G.* Lifshits quantum phase transitions and rearrangement of the Fermi surface upon a change in the hole concentration in high-temperature superconductors [Текст] / S. G. Ovchinnikov, M. M. Korshunov, E. I. Shneyder // Journal of Experimental and Theoretical Physics. — 2009. — Vol. 109, no. 5. — P. 775.
102. Spin-polaron damping in the spin-fermion model for cuprate superconductors [Текст] / R. O. Kuzian [et al.] // Physical Review B. — 1998. — Vol. 58, no. 10. — P. 6194.

103. *Barabanov, A. F.* Theory of the spin-polaron for 2D antiferromagnets [Текст] / A. F. Barabanov, L. A. Maksimov, A. V. Mikheyenkov // AIP Conference Proceedings. Vol. 527. — American Institute of Physics, 2000. — P. 1—117.
104. Evolution of the Fermi surface of cuprates on the basis of the spin-polaron approach [Текст] / A. F. Barabanov [et al.] // Journal of Experimental and Theoretical Physics. — 2001. — Vol. 92, no. 4. — P. 677—695.
105. *Barabanov, A. F.* A spin polaron in a two-dimensional antiferromagnet: From a local singlet to a complex quasiparticle [Текст] / A. F. Barabanov, A. Mikheenkov, A. M. Belemuk // Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters. — 2002. — Vol. 75, no. 2. — P. 107—118.
106. *Maksimov, L. A.* One spin-polaron problem in the two-dimensional Kondo lattice [Текст] / L. A. Maksimov, A. F. Barabanov, R. O. Kuzian // Physics Letters A. — 1997. — Vol. 232, no. 3/4. — P. 286—292.
107. *Maksimov, L. A.* Spectral weight and band filling in the Kondo lattice [Текст] / L. A. Maksimov, R. Hayn, A. F. Barabanov // Physics Letters A. — 1998. — Vol. 238, no. 4/5. — P. 288—292.
108. *Barabanov, A. F.* Frustrated quantum two-dimensional J_1 - J_2 - J_3 antiferromagnet in a spherically symmetric self-consistent approach [Текст] / A. F. Barabanov, A. V. Mikheenkov, A. V. Shvartsberg // Theoretical and Mathematical Physics. — 2011. — Vol. 168, no. 3. — P. 1192—1215.
109. *Shimahara, H.* Green's function theory of the two-dimensional Heisenberg model—spin wave in short range order— [Текст] / H. Shimahara, S. Takada // Journal of the Physical Society of Japan. — 1991. — Vol. 60, no. 7. — P. 2394—2405.
110. *Zwanzig, R.* Memory effects in irreversible thermodynamics [Текст] / R. Zwanzig // Physical Review. — 1961. — Vol. 124, no. 4. — P. 983.
111. *Mori, H.* Transport, collective motion, and Brownian motion [Текст] / H. Mori // Progress of Theoretical Physics. — 1965. — Vol. 33, no. 3. — P. 423—455.
112. *Roth, L. M.* New method for linearizing many-body equations of motion in statistical mechanics [Текст] / L. M. Roth // Physical Review Letters. — 1968. — Vol. 20, no. 25. — P. 1431.

113. *Roth, L. M.* Electron correlation in narrow energy bands. I. The two-pole approximation in a narrow S band [Текст] / L. M. Roth // Physical Review. — 1969. — Vol. 184, no. 2. — P. 451.
114. *Rowe, D. J.* Equations-of-motion method and the extended shell model [Текст] / D. J. Rowe // Reviews of Modern Physics. — 1968. — Vol. 40, no. 1. — P. 153.
115. *Tserkovnikov, Y. A.* A method of solving infinite systems of equations for two-time thermal Green's functions [Текст] / Y. A. Tserkovnikov // Theoretical and Mathematical Physics. — 1981. — Vol. 49, no. 2. — P. 219–233.
116. *Tserkovnikov, Y. A.* Correlation functions of a Heisenberg ferromagnet in the paramagnetic region [Текст] / Y. A. Tserkovnikov // Theoretical and Mathematical Physics. — 1982. — Vol. 52, no. 1. — P. 712–721.
117. *Plakida, N.* High-temperature cuprate superconductors: Experiment, theory, and applications [Текст]. Vol. 166 / N. Plakida. — Springer Science & Business Media, 2010.
118. *Nolting, W.* Spectral density approach for the quasiparticle concept in the $s-f$ model (ferromagnetic semiconductors) [Текст] / W. Nolting, A. M. Oles // Journal of Physics C: Solid State Physics. — 1980. — Vol. 13, no. 12. — P. 2295.
119. *Mancini, F.* The Hubbard model within the equations of motion approach [Текст] / F. Mancini, A. Avella // Advances in Physics. — 2004. — Vol. 53, no. 5/6. — P. 537–768.
120. *Prelovšek, P.* Two band model for superconducting copper oxides [Текст] / P. Prelovšek // Physics Letters A. — 1988. — Vol. 126, no. 4. — P. 287–290.
121. *Ramak, A.* Comparison of effective models for CuO_2 layers in oxide superconductors [Текст] / A. Ramak, P. Prelovek // Physical Review B. — 1989. — Vol. 40, no. 4. — P. 2239.
122. Spin-polaron excitations in the two-dimensional Kondo lattice with spin frustration [Текст] / A. F. Barabanov [et al.] // Physics Letters A. — 2000. — Vol. 265, no. 3. — P. 221–224.
123. *Kampf, A. P.* Spectral function and photoemission spectra in antiferromagnetically correlated metals [Текст] / A. P. Kampf, J. R. Schrieffer // Physical Review B. — 1990. — Vol. 42, no. 13. — P. 7967.

124. Low-energy electronic structure of the high- T_c cuprates $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ studied by angle-resolved photoemission spectroscopy [Текст] / T. Yoshida [et al.] // Journal of Physics: Condensed Matter. — 2007. — Vol. 19, no. 12. — P. 125209.
125. *Barabanov, A. F.* Spin polaron approach to superconductivity [Текст] / A. F. Barabanov, L. A. Maksimov, A. V. Mikheenkoy // Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters. — 2001. — Vol. 74, no. 6. — P. 328—331.
126. *Val'kov, V. V.* Effective interactions and the nature of Cooper instability of spin polarons in the 2D Kondo lattice [Текст] / V. V. Val'kov, M. M. Korovushkin, A. F. Barabanov // Journal of Experimental and Theoretical Physics letters. — 2008. — Vol. 88, no. 6. — P. 370.
127. *Val'kov, V. V.* d -Wave pairing in an ensemble of spin polaron quasiparticles in the spin-fermion model of the electronic structure of the CuO_2 plane [Текст] / V. V. Val'kov, D. M. Dzebisashvili, A. F. Barabanov // Physics Letters A. — 2015. — Vol. 379, no. 5. — P. 421—426.
128. Coulomb repulsion of holes and competition between $d_{x^2-y^2}$ -wave and s -wave pairings in cuprate superconductors [Текст] / V. V. Val'kov [et al.] // Journal of Experimental and Theoretical Physics. — 2017. — Vol. 125, no. 5. — P. 810—821.
129. *Kamerlingh-Onnes, H.* Communications from the Physical Laboratory of the University of Leiden [Текст] / H. Kamerlingh-Onnes, W. Tuyn. — 1911.
130. *Meissner, W.* A new effect when superconductivity occurs [Текст] / W. Meissner, R. Ochsenfeld // Natural Sciences (Germany). — 1933. — Vol. 21. — P. 787.
131. *London, F.* The electromagnetic equations of the supraconductor [Текст] / F. London, H. London // Proceedings of the Royal Society of London. Series A-Mathematical and Physical Sciences. — 1935. — Vol. 149, no. 866. — P. 71—88.
132. Magnetic penetration depth in superconducting $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ films [Текст] / K. M. Paget [et al.] // Physical Review B. — 1999. — Vol. 59, no. 1. — P. 641.

133. *Misawa, S.* London penetration depth in a tight-binding model of layered narrow-band anisotropic superconductors [Текст] / S. Misawa // Physical Review B. — 1995. — Vol. 51, no. 17. — P. 11791.
134. *Radtke, R. J.* Theory of the c -axis penetration depth in the cuprates [Текст] / R. J. Radtke, V. N. Kostur, K. Levin // Physical Review B. — 1996. — Vol. 53, no. 2. — R522.
135. *Atkinson, W. A.* Effect of proximity coupling of chains and planes on the penetration-depth anisotropy in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ [Текст] / W. A. Atkinson, J. P. Carbotte // Physical Review B. — 1995. — Vol. 52, no. 14. — P. 10601.
136. *Benfatto, L.* Gap and pseudogap evolution within the charge-ordering scenario for superconducting cuprates [Текст] / L. Benfatto, S. Caprara, C. di Castro // The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems. — 2000. — Vol. 17, no. 1. — P. 95–102.
137. *Sheehy, D. E.* Unified theory of the ab -plane and c -axis penetration depths of underdoped cuprates [Текст] / D. E. Sheehy, T. P. Davis, M. Franz // Physical Review B. — 2004. — Vol. 70, no. 5. — P. 054510.
138. Effect of pseudogap formation on the penetration depth of underdoped high- T_c cuprates [Текст] / J. P. Carbotte [et al.] // Physical Review B. — 2010. — Vol. 81, no. 1. — P. 014522.
139. *Eremin, M. V.* London penetration depth in the tight binding approximation: orthorhombic distortion and oxygen isotope effects in cuprates [Текст] / M. V. Eremin, I. A. Larionov, I. E. Lyubin // Journal of Physics: Condensed Matter. — 2010. — Vol. 22, no. 18. — P. 185704.
140. *Huang, Z.* Magnetic-field-induced reduction of the low-temperature superfluid density in cuprate superconductors [Текст] / Z. Huang, H. Zhao, S. Feng // Physical Review B. — 2011. — Vol. 83, no. 14. — P. 144524.
141. *Bardeen, J.* Theory of superconductivity [Текст] / J. Bardeen, L. N. Cooper, J. R. Schrieffer // Physical Review. — 1957. — Vol. 108, no. 5. — P. 1175.
142. *Peierls, R.* On the theory of the diamagnetism of conduction electrons [Текст] / R. Peierls //. Vol. 80. — 1933. — P. 763.
143. *Landau, L. D.* Course of theoretical physics: Volume 9: Statistical physics. Part 2: Theory of condensed state [Текст] / L. D. Landau, E. M. Lifšic. — Pergamon Press, 1981.

144. *Schrieffer, J. R.* Theory of superconductivity [Текст] / J. R. Schrieffer. — CRC Press, 2018.
145. *Tinkham, M.* Introduction to superconductivity [Текст] / M. Tinkham. — Courier Corporation, 2004.
146. *Nam, S. B.* Theory of electromagnetic properties of superconducting and normal systems. I [Текст] / S. B. Nam // Physical Review. — 1967. — Vol. 156, no. 2. — P. 470.
147. *Scalapino, D. J.* Superfluid density and the Drude weight of the Hubbard model [Текст] / D. J. Scalapino, S. R. White, S. C. Zhang // Physical Review Letters. — 1992. — Vol. 68, no. 18. — P. 2830.
148. *Feng, S.* Doping dependence of Meissner effect in cuprate superconductors [Текст] / S. Feng, Z. Huang, H. Zhao // Physica C: Superconductivity. — 2010. — Vol. 470, no. 21. — P. 1968–1976.
149. *Landau, L. D.* Course of theoretical physics. Volume 3: Quantum mechanics. Nonrelativistic theory [Текст] / L. D. Landau, E. M. Lifšic. — 1976.
150. Precision measurements of the temperature dependence of λ in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.95}$: Strong evidence for nodes in the gap function [Текст] / W. N. Hardy [et al.] // Physical Review Letters. — 1993. — Vol. 70, no. 25. — P. 3999.
151. In-plane and \hat{c} -axis microwave penetration depth of $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_1\text{Cu}_2\text{O}_{8+\delta}$ crystals [Текст] / T. Jacobs [et al.] // Physical Review Letters. — 1995. — Vol. 75, no. 24.
152. Anisotropic magnetic penetration depth of grain-aligned $\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8+\delta}$ [Текст] / C. Panagopoulos [et al.] // Physical Review B. — 1996. — Vol. 53, no. 6. — R2999.
153. a – b Plane microwave surface impedance of a high-quality $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ single crystal [Текст] / S.-F. Lee [et al.] // Physical Review Letters. — 1996. — Vol. 77, no. 4. — P. 735.
154. In-plane microwave conductivity of the single-layer cuprate $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{CuO}_{6+\delta}$ [Текст] / D. M. Broun [et al.] // Physical Review B. — 1997. — Vol. 56, no. 18. — R11443.

155. *Panagopoulos, C.* Systematic behavior of the in-plane penetration depth in d -wave cuprates [Текст] / C. Panagopoulos, J. R. Cooper, T. Xiang // Physical Review B. — 1998. — Vol. 57, no. 21. — P. 13422.
156. Absolute measurement of penetration depth in a superconducting film by the two-coil technique [Текст] / R. F. Wang [et al.] // Applied Physics Letters. — 1999. — Vol. 75, no. 24. — P. 3865—3867.
157. Field induced reduction of the low-temperature superfluid density in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.95}$ [Текст] / J. E. Sonier [et al.] // Physical Review Letters. — 1999. — Vol. 83, no. 20. — P. 4156.
158. Microwave spectroscopy of thermally excited quasiparticles in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.99}$ [Текст] / A. Hosseini [et al.] // Physical Review B. — 1999. — Vol. 60, no. 2. — P. 1349.
159. c -Axis superfluid response and pseudogap in high- T_c superconductors [Текст] / C. Panagopoulos [et al.] // Physical Review B. — 2000. — Vol. 61, no. 6. — R3808.
160. *Prozorov, R.* Magnetic penetration depth in unconventional superconductors [Текст] / R. Prozorov, R. W. Giannetta // Superconductor Science and Technology. — 2006. — Vol. 19, no. 8. — R41.
161. Superfluid density in a highly underdoped $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+y}$ superconductor [Текст] / D. M. Broun [et al.] // Physical Review Letters. — 2007. — Vol. 99, no. 23. — P. 237003.
162. Anomalously sharp superconducting transitions in overdoped $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ films [Текст] / T. R. Lemberger [et al.] // Physical Review B. — 2010. — Vol. 82, no. 21. — P. 214513.
163. Temperature dependence of the London penetration depth in Pr_2CuO_4 from millimeter-wave optical experiments [Текст] / A. V. Pronin [et al.] // Physica C: Superconductivity. — 2012. — Vol. 473. — P. 11—13.
164. *Sonier, J. E.* μSR studies of cuprate superconductors [Текст] / J. E. Sonier // Journal of the Physical Society of Japan. — 2016. — Vol. 85, no. 9. — P. 091005.

165. Cooperative coupling of static magnetism and bulk superconductivity in the stripe phase of $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$: Pressure- and doping-dependent studies [Текст] / Z. Guguchia [et al.] // Physical Review B. — 2016. — Vol. 94, no. 21. — P. 214511.
166. Dependence of the critical temperature in overdoped copper oxides on superfluid density [Текст] / I. Božović [et al.] // Nature. — 2016. — Vol. 536, no. 7616. — P. 309–311.
167. Muon spin relaxation studies of magnetic-field-induced effects in high- T_c superconductors [Текст] / A. T. Savici [et al.] // Physical Review Letters. — 2005. — Vol. 95, no. 15. — P. 157001.
168. Experimental evidence for two gaps in the high-temperature $\text{La}_{1.83}\text{Sr}_{0.17}\text{CuO}_4$ superconductor [Текст] / R. Khasanov [et al.] // Physical Review Letters. — 2007. — Vol. 98, no. 5. — P. 057007.
169. Multiple gap symmetries for the order parameter of cuprate superconductors from penetration depth measurements [Текст] / R. Khasanov [et al.] // Physical Review Letters. — 2007. — Vol. 99, no. 23. — P. 237601.
170. s -Wave symmetry along the c -Axis and $s+d$ in-plane superconductivity in bulk $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ [Текст] / R. Khasanov [et al.] // Journal of Superconductivity and Novel Magnetism. — 2008. — Vol. 21, no. 2. — P. 81–85.
171. Mixed state of $\text{La}_{1.83}\text{Sr}_{0.17}\text{CuO}_4$ studied by means of muon-spin rotation and magnetization experiments in a low magnetic field [Текст] / B. M. Wojek [et al.] // Physical Review B. — 2011. — Vol. 84, no. 14. — P. 144521.
172. Effect of hole doping on the London penetration depth in $\text{Bi}_{2.15}\text{Sr}_{1.85}\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ and $\text{Bi}_{2.1}\text{Sr}_{1.9}\text{Ca}_{0.85}\text{Y}_{0.15}\text{Cu}_2\text{O}_{8+\delta}$ [Текст] / W. Anukool [et al.] // Physical Review B. — 2009. — Vol. 80, no. 2. — P. 024516.
173. *Keller, H.* Muon-spin rotation experiments in high- T_c superconductors and related materials [Текст] / H. Keller // IBM Journal of Research and Development. — 1989. — Vol. 33, no. 3. — P. 314–323.
174. Magnetic penetration depth of $(\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x)_2\text{CuO}_4$ single crystals [Текст] / Q. Li [et al.] // Physical Review B. — 1993. — Vol. 47, no. 5. — P. 2854.

175. Magnetic penetration depth and condensate density of cuprate high- T_c superconductors determined by muon-spin-rotation experiments [Текст] / C. Bernhard [et al.] // Physical Review B. — 1995. — Vol. 52, no. 14. — P. 10488.
176. Muon-spin-rotation studies of the temperature dependence of the magnetic penetration depth in the $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$ family and related compounds [Текст] / P. Zimmermann [et al.] // Physical Review B. — 1995. — Vol. 52, no. 1. — P. 541.
177. Evidence for a generic quantum transition in high- T_c cuprates [Текст] / C. Panagopoulos [et al.] // Physical Review B. — 2002. — Vol. 66, no. 6. — P. 064501.
178. Superfluid density in cuprate high- T_c superconductors: A new paradigm [Текст] / J. L. Tallon [et al.] // Physical Review B. — 2003. — Vol. 68, no. 18. — P. 180501.
179. Superfluid response in monolayer high- T_c cuprates [Текст] / C. Panagopoulos [et al.] // Physical Review B. — 2003. — Vol. 67, no. 22. — P. 220502.
180. The Meissner effect in a strongly underdoped cuprate above its critical temperature [Текст] / E. Morenzoni [et al.] // Nature communications. — 2011. — Vol. 2, no. 1. — P. 1–8.
181. *Harshman, D. R.* Concerning the superconducting gap symmetry in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$, $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$, and $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ determined from muon spin rotation in mixed states of crystals and powders [Текст] / D. R. Harshman, A. T. Fiory // Journal of Physics: Condensed Matter. — 2011. — Vol. 23, no. 31. — P. 315702.
182. Superconductivity drives magnetism in δ -doped La_2CuO_4 [Текст] / A. Suter [et al.] // Physical Review B. — 2018. — Vol. 97, no. 13. — P. 134522.
183. Unexpected effects of thickness and strain on superconductivity and magnetism in optimally doped $\text{La}_{1.84}\text{Sr}_{0.16}\text{CuO}_4$ thin films [Текст] / L. Howald [et al.] // Physical Review B. — 2018. — Vol. 97, no. 9. — P. 094514.
184. *Hardy, W. N.* Magnetic penetration depths in cuprates: A short review of measurement techniques and results [Текст] / W. N. Hardy, S. Kamal, D. A. Bonn. — Springer, Boston, 2002. — P. 373–402.

185. Possible secondary component of the order parameter observed in London penetration depth measurements [Текст] / A. Valli [et al.] // Physical Review B. — 2010. — Vol. 82, no. 13. — P. 132504.
186. Key features of the hole spectrum in three-band Hubbard model for High- T_c superconductors [Текст] / A. Barabanov [et al.] // Physica C: Superconductivity. — 1995. — Vol. 252, no. 3/4. — P. 308–312.
187. *Zubarev, D. N.* Double-time Green functions in statistical physics [Текст] / D. N. Zubarev // Soviet Physics Uspekhi. — 1960. — Vol. 3, no. 3. — P. 320–345.
188. *Val'kov, V. V.* Effect of the concentration-dependent spin-charge correlations on the evolution of the energy structure of the 2D Emery model [Текст] / V. V. Val'kov, D. M. Dzebisashvili, A. F. Barabanov // Journal of Experimental and Theoretical Physics. — 2014. — Vol. 118, no. 6. — P. 959–970.
189. *Val'kov, V. V.* Nature of Cooper instability of spin polarons in cuprate high- T_c superconductors [Текст] / V. V. Val'kov, D. M. Dzebisashvili, A. F. Barabanov // Journal of Low Temperature Physics. — 2015. — Vol. 181, no. 3/4. — P. 134–138.
190. *Val'kov, V. V.* Spin-polaron nature of fermion quasiparticles and their d -wave pairing in cuprate superconductors [Текст] / V. V. Val'kov, D. M. Dzebisashvili, A. F. Barabanov // Journal of Experimental and Theoretical Physics letters. — 2016. — Vol. 104, no. 10. — P. 730–741.
191. *Lee, J.* Penetration depth $\lambda(T)$ of $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ films determined from the kinetic inductance [Текст] / J. Lee, T. R. Lemberger // Applied Physics Letters. — 1993. — Vol. 62, no. 19. — P. 2419–2421.
192. *Kagan, M. Y.* Superconductivity in the two-dimensional t - J model at low electron density [Текст] / M. Y. Kagan, T. M. Rice // Journal of Physics: Condensed Matter. — 1994. — Vol. 6, no. 20. — P. 3771.
193. Stability of the superconducting d -wave pairing toward the intersite Coulomb repulsion in CuO_2 plane [Текст] / V. V. Val'kov [et al.] // Journal of Low Temperature Physics. — 2018. — Vol. 191, no. 5/6. — P. 408–425.

194. *Val'kov, V. V.* Influence of the Coulomb repulsions on the formation of the superconducting gap of the spin-polaron quasiparticles in cuprates [Текст] / V. V. Val'kov, M. M. Korovushkin, A. F. Barabanov // Journal of Low Temperature Physics. — 2019. — Vol. 196, no. 1/2. — P. 242–252.
195. Bulk superconductivity in both tetragonal and orthorhombic solid solutions of $(\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x)_2\text{CuO}_{4-\delta}$ [Текст] / T. Nagano [et al.] // Physical Review B. — 1993. — Vol. 48, no. 13. — P. 9689.
196. Structural and superconducting properties of $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ as a function of Sr content [Текст] / P. G. Radaelli [et al.] // Physical Review B. — 1994. — Vol. 49, no. 6. — P. 4163.
197. Electronic phase diagram of high- T_c cuprate superconductors from a mapping of the in-plane resistivity curvature [Текст] / Y. Ando [et al.] // Physical Review Letters. — 2004. — Vol. 93, no. 26. — P. 267001.
198. Emergence of superconductivity in the cuprates via a universal percolation process [Текст] / D. Pelc [et al.] // Nature Communications. — 2018. — Vol. 9, no. 1. — P. 1–10.

Список рисунков

1.1	Эволюция критических температур с момента открытия сверхпроводимости	12
1.2	Фазовая диаграмма купратов	13
1.3	Энергетическая схема, демонстрирующая происхождение гибридных полос	15
1.4	Медная ($d_{x^2-y^2}$) и кислородные (p_x, p_y) орбитали дырок в CuO_2 -плоскости, рассматриваемые в модели Эмери	19
1.5	Взаимодействия в спин-фермионной модели в структуре CuO_2 -плоскости	23
2.1	Схема проникновения магнитного поля в сверхпроводник при $T < T_c$	35
3.1	Зависимость лондоновской глубины от температуры, измеренная на монокристалле $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.95}$ [150]	43
3.2	Точка перегиба в температурной зависимости $\sigma_{sc} \propto \lambda_{ab}^{-2}$ на монокристалле $\text{La}_{1.83}\text{Sr}_{0.17}\text{CuO}_4$ [168]	44
3.3	Спектр фермиевских возбуждений в спин-фермионной модели в нормальной фазе	48
3.4	Теоретическая и экспериментальная температурные зависимости обратного квадрата лондоновской глубины при пяти уровнях легирования	57
3.5	Точка перегиба в температурной зависимости обратного квадрата лондоновской глубины в рамках спин-поляронного подхода при $x = 0.17$	59
3.6	Вклад слагаемого (3.34), определяющего точку перегиба, в температурную зависимость обратного квадрата лондоновской глубины	60
3.7	Причина возникновения точки перегиба в температурной зависимости лондоновской глубины, рассчитанной в рамках спин-поляронной концепции	61
4.1	Взаимодействия в расширенной спин-фермионной модели в структуре CuO_2 -плоскости	68

4.2	Влияние кулоновского отталкивания на температурную зависимость обратного квадрата лондоновской глубины при легировании $x = 0.16$	75
4.3	Сопоставление теоретических и экспериментальных (для LSCO) данных концентрационной зависимости обратного квадрата лондоновской глубины при $T \rightarrow 0$	76
4.4	Сопоставление теоретической и экспериментальной (для LSCO) фазовых T_c-x -диаграмм	77
4.5	Теоретические и экспериментальные (для LSCO) температурные зависимости обратного квадрата лондоновской глубины при пяти уровнях легирования	78

Список таблиц

1	Значения параметров для модели Эмери (в эВ)	20
2	Значения параметров спин-фермионной модели (в эВ)	24
3	Значения легирования и соответствующие им значения параметра фрустрации и спиновых корреляционных функций	26
4	Значения параметров спин-фермионной модели (в эВ)	68

Приложение А

Расчет элементов энергетической матрицы $D(k)$

В приложении представлены частные расчеты элементов энергетической матрицы: $D_{13}(k)$, $D_{23}(k)$, $D_{33}(k)$ и $D_{36}(k)$, для которых были использованы аппроксимации.

Уравнениями движения для двух первых базисных операторов $a_{k\uparrow}$ и $b_{k\uparrow}$ являются

$$[a_{k\uparrow}, \hat{\mathcal{H}}] = \xi_{k,x} a_{k\uparrow} + \Gamma_k b_{k\uparrow} + J s_{k,x} L_{k\uparrow}, \quad (\text{A.1})$$

$$[b_{k\uparrow}, \hat{\mathcal{H}}] = \xi_{k,y} b_{k\uparrow} + \Gamma_k a_{k\uparrow} + J s_{k,y} L_{k\uparrow}. \quad (\text{A.2})$$

Используя уравнение (A.1) и определение элементов матрицы (1.17), находим для элемента $D_{13}(k)$ выражение:

$$D_{13}(k) = (\xi_{k,x} s_{k,x} + \Gamma_k s_{k,y}) \frac{1}{N} \sum_f \langle \tilde{S}_f^{\uparrow\uparrow} \rangle + J s_{k,x} K_k, \quad (\text{A.3})$$

где

$$K_k = \langle \{L_{k\uparrow}, L_{k\uparrow}^\dagger\} \rangle. \quad (\text{A.4})$$

Поскольку система находится в SU(2)-инвариантной спин-жидкостной фазе (1.11), имеем: $\langle \tilde{S}_f^{\uparrow\uparrow} \rangle \equiv \langle S_f^z \rangle = 0$. Таким образом, из (A.3) следует выражение для $D_{13}(k)$ представленное в (3.1). Аналогично находим выражение для матричного элемента $D_{23}(k)$, используя уравнение движения (A.2).

Вычисляя антикоммутиатор в (A.4), получаем:

$$K_k = \sum_q s_q^2 \langle (\tilde{S}_{k-q} \tilde{S}_{q-k})_{\uparrow\uparrow} \rangle + \sum_{q,p,\alpha,\beta} \langle u_{p\beta}^\dagger u_{q\alpha} [\tilde{S}_{p-k}^{\beta\uparrow}, \tilde{S}_{k-q}^{\uparrow\alpha}] \rangle, \quad (\text{A.5})$$

где $s_q^2 = s_{q,x}^2 + s_{q,y}^2$. Второй член в правой части (A.5) содержит фермиевские операторы и, следовательно, в соответствии с приближением низкой плотности, может быть пренебрежен. Выполнение преобразования Фурье в первом члене и с учетом определения $s_{k,x(y)}$ (см. (2.8)) дает:

$$K_k = \frac{3}{4} - \frac{C_1}{2} (\cos(k_x - 2\alpha_x) + \cos(k_y)), \quad (\text{A.6})$$

где $C_1 = \langle (\tilde{S}_f \tilde{S}_{f+2\delta})_{\uparrow\uparrow} \rangle = \langle \vec{S}_f \vec{S}_{f+2\delta} \rangle$ в согласии с определением спиновых корреляторов (1.12). Таким образом, (A.6) соответствует (3.4).

Для получения матричных элементов $D_{33}(k)$ и $D_{36}(k)$ запишем сначала уравнение движения для $L_{k\uparrow}$:

$$\begin{aligned}
[L_{k\uparrow}, \hat{\mathcal{H}}] &= \sum_{q,\alpha} \tilde{S}_{k-q}^{\uparrow\alpha} \left((\xi_{k,x} s_{k,x} + \Gamma_q s_{q,y}) a_{k\uparrow} + (\xi_{k,y} s_{k,y} + \Gamma_q s_{q,x}) b_{k\uparrow} \right) \\
&+ J \sum_{q,p,\alpha} s_q^2 \left(\tilde{S}_{k-q} \tilde{S}_{q-p} \right)_{\uparrow\alpha} u_{p\alpha} + J \sum_{\substack{q,p,k' \\ \alpha,\beta,\gamma}} \left[\tilde{S}_{k-q}^{\uparrow\alpha}, \tilde{S}_{k'-p}^{\beta\gamma} \right] u_{k'\beta}^\dagger u_{p\gamma} u_{q\alpha} \\
&+ \frac{i}{N} \sum_{f,m,q,\alpha} I_{fm} e^{-im(k-q)} \vec{\sigma}_{\uparrow\alpha} \left(\vec{S}_f \times \vec{S}_m \right) u_{q\alpha},
\end{aligned} \tag{A.7}$$

где для удобства рассматривается обменное взаимодействие между произвольными узлами f и m , не ограниченное приближением ближайших соседей, как в основном тексте. Используя это уравнение, мы можем выразить элемент $D_{33}(k)$ как сумму пяти членов:

$$\begin{aligned}
D_{33}(k) &= \sum_{q,p,\alpha,\beta} (\xi_{q,x} s_{q,x} + \Gamma_q s_{q,y}) \langle \left\{ \tilde{S}_{k-q}^{\uparrow\alpha} a_{q\alpha}, u_{p\beta}^\dagger \tilde{S}_{p-k}^{\beta\uparrow} \right\} \rangle \\
&+ \sum_{q,p,\alpha,\beta} (\xi_{q,y} s_{q,y} + \Gamma_q s_{q,x}) \langle \left\{ \tilde{S}_{k-q}^{\uparrow\alpha} b_{q\alpha}, u_{p\beta}^\dagger \tilde{S}_{p-k}^{\beta\uparrow} \right\} \rangle \\
&+ J \sum_{\substack{q,p,p' \\ \alpha,\beta}} s_q^2 \langle \left\{ \left(\tilde{S}_{k-q} \tilde{S}_{q-p} \right)_{\uparrow\alpha} u_{p\alpha}, u_{p'\beta}^\dagger \tilde{S}_{p'-k}^{\beta\uparrow} \right\} \rangle \\
&+ J \sum_{\substack{q,p,k',p' \\ \alpha,\beta,\gamma,\beta'}} \langle \left\{ \left[\tilde{S}_{k-q}^{\uparrow\alpha}, \tilde{S}_{k'-p}^{\beta\gamma} \right] u_{k'\beta}^\dagger u_{p\gamma} u_{q\alpha}, u_{p'\beta'}^\dagger \tilde{S}_{p'-k}^{\beta'\uparrow} \right\} \rangle \\
&+ \frac{i}{N} \sum_{\substack{f,m,q,p \\ \alpha,\beta}} I_{fm} e^{-im(k-q)} \langle \left\{ \vec{\sigma}_{\uparrow\alpha} \left(\vec{S}_f \times \vec{S}_m \right) u_{q\alpha}, u_{p\beta}^\dagger \tilde{S}_{p-k}^{\beta\uparrow} \right\} \rangle.
\end{aligned} \tag{A.8}$$

Каждый из этих пяти слагаемых включает антикоммутатор вида $[S_1 f_1, f_2 S_2]$, где $S_{1(2)}$ -Бозе-подобный (спиновый) оператор, а $f_{1(2)}$ -Ферми-подобный оператор. Поскольку антикоммутатор может быть выражен как

$$\{S_1 f_1, f_2 S_2\} = f_1 f_2 [S_1, S_2] + \{f_1, f_2\} S_1 S_2, \tag{A.9}$$

каждый из пяти членов в (A.8) можно разделить на две составляющие. Первая составляющая, соответствующая первому члену в (A.9), содержит фермиевские операторы и, согласно принятому приближению низкой плотности, может быть проигнорирована и опущена. Вторая составляющая, соответствующая второму

члену в (A.9), после вычисления антикоммутиатора либо содержит фермиевские операторы (как четвертая сумма в (A.8)), либо не содержит. Сохраняя только эти последние члены (без операторов Ферми), получаем:

$$\begin{aligned}
D_{33}(k) = & \sum_q (\xi_{q,x} s_{q,x}^2 + \xi_{q,y} s_{q,y}^2 + 2\Gamma_q s_{q,x} s_{q,y}) \langle (\tilde{S}_{k-q} \tilde{S}_{q-k})_{\uparrow\uparrow} \rangle \\
& + J \sum_{q,p} s_q^2 s_p^2 \langle (\tilde{S}_{k-q} \tilde{S}_{q-p} \tilde{S}_{p-k})_{\uparrow\uparrow} \rangle \\
& + \frac{i}{N} \sum_{q,f,m,\alpha} I_{fm} e^{-im(k-q)} s_q^2 \langle \vec{\sigma}_{\uparrow\alpha} (\vec{S}_f \times \vec{S}_m) \tilde{S}_{q-k}^{\alpha\uparrow} \rangle.
\end{aligned} \tag{A.10}$$

Выполняя обратное преобразование Фурье для спиновых операторов, можем выразить среднее значение парного спина в (A.10) как

$$\langle (\tilde{S}_{k-q} \tilde{S}_{q-k})_{\uparrow\uparrow} \rangle = \frac{1}{N} C_{q-k},$$

где $C_k = \sum_f e^{-ifk} C_f$ является преобразованием Фурье спинового коррелятора (1.12). Аналогично для среднего значения тройного спина в (A.10) получаем

$$\langle (\tilde{S}_{k-q} \tilde{S}_{q-p} \tilde{S}_{p-k})_{\uparrow\uparrow} \rangle = \frac{1}{N^2} (C_{q-p} - C_{p-k} - C_{k-q}),$$

где учтено, что когда все три спина находятся на разных узлах, среднее значение равно нулю из-за SU(2)-инвариантности.

Условие SU(2)-инвариантности и вытекающее из него тождество: $\langle S_f^+ S_m^- - S_f^- S_m^+ \rangle \equiv 0$ ($f \neq m$), также использовались при вычислении третьего среднего в (A.10). Конечный результат для $D_{33}(k)$ выглядит как

$$\begin{aligned}
D_{33}(k) = & \frac{1}{N} \sum_q (\xi_{q,x} s_{q,x}^2 + \xi_{q,y} s_{q,y}^2 + 2\Gamma_q s_{q,x} s_{q,y}) C_{q-k} \\
& + \frac{J}{N^2} \sum_{q,p} s_q^2 s_p^2 (C_{q-p} - C_{p-k} - C_{k-q}) \\
& + \frac{1}{N} \sum_q I_q \left(\frac{1}{N} \sum_p s_{k+p-q}^2 C_p - C_q \right).
\end{aligned} \tag{A.11}$$

Выполняя обратное преобразование Фурье в уравнении (A.11) и принимая аппроксимацию ближайшего соседнего узла для обменного интеграла I_{fm} , приходим к выражению для $D_{33}(k)$, приведенному в (3.1).

Единственный вклад от аномальных матричных элементов для d -волнового спаривания содержится в D_{36} и обусловлен обменным взаимодействием между локализованными спинами. Принимая во внимание только

это взаимодействие в уравнении движения (A.7), получаем

$$D_{36}(k) = \frac{i}{N} \sum_{\substack{q,p,f,m \\ \alpha,\beta}} I_{fm} e^{-im(k-q)} \left\langle \left\{ \vec{\sigma}_{\uparrow\alpha} \left(\vec{S}_f \times \vec{S}_m \right) u_{q\alpha}, \tilde{S}_{-k-p}^{\downarrow\beta} u_{p\beta} \right\} \right\rangle. \quad (\text{A.12})$$

При вычислении аномального среднего в правой части (A.12) приближение низкой плотности, используемое выше для нормальных средних, не требуется. Вместо этого наша цель теперь состоит в том, чтобы выразить результат антикоммутиации в аномальном среднем через два оператора разрушения базиса. Простое вычисление (A.12) дает

$$\begin{aligned} D_{36}(k) = & -\frac{1}{N} \sum_{q,p,q'} I_{q'} \left(3 \left\langle \left(\vec{S}_{-q'} \vec{S}_{-q-p+q'} \right) u_{q\downarrow} u_{p\uparrow} \right\rangle \right. \\ & + \left\langle \left(\tilde{S}_{-q'} u_p \right)_{\downarrow} \left(\tilde{S}_{-q-p+q'} u_q \right)_{\uparrow} \right\rangle - 3 \left\langle \left(\vec{S}_{-q'-k-p} \vec{S}_{k-q+q'} \right) u_{q\downarrow} u_{p\uparrow} \right\rangle \\ & \left. + \left\langle \left(\tilde{S}_{-q'-k-p} u_q \right)_{\uparrow} \left(\tilde{S}_{k-q+q'} u_p \right)_{\downarrow} \right\rangle \right). \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

Первые два члена в (A.13) не способствуют спариванию d -волны и поэтому могут быть отброшены. Последний член, обусловленный SU(2)-инвариантностью (в частности, инвариантностью системы при вращении на угол π), может быть выражен как

$$\begin{aligned} \left\langle \left(\tilde{S}_{-q'-k-p} u_q \right)_{\uparrow} \left(\tilde{S}_{k-q+q'} u_p \right)_{\downarrow} \right\rangle = & 2 \left\langle \left(\vec{S}_{-q'-k-p} \vec{S}_{k-q+q'} \right) u_{q\downarrow} u_{p\uparrow} \right\rangle \\ & - \left\langle \left(\tilde{S}_{-q'-k-p} u_p \right)_{\uparrow} \left(\tilde{S}_{k-q+q'} u_q \right)_{\downarrow} \right\rangle. \end{aligned}$$

Это тождество после суммирования по квазиимпульсам q и p позволяет выразить аномальный элемент $D_{36}(k)$ в терминах базисных операторов $L_{k\sigma}$:

$$D_{36}(k) = \frac{1}{N} \sum_{q'} I_{q'} \langle L_{-q'-k,\uparrow} L_{k+q',\downarrow} \rangle + \frac{1}{N} \sum_{q,p,q'} I_{q'} \left\langle \left(\vec{S}_{-q'-k-p} \vec{S}_{k-q+q'} \right) u_{q\downarrow} u_{p\uparrow} \right\rangle. \quad (\text{A.14})$$

Расщепление второго слагаемого в уравнении (A.14) позволяет перейти к выражению (3.12).

Приложение Б

Дополнительные функции

Б.1 Миноры матриц $M^{(3)}(k, \omega)$ и $\bar{M}^{(3)}(k, \omega)$

Матрицу $M^{(6)}(k, \omega)$ удобно выражается в блочной форме (3.14), где верхний левый 3×3 блок $M^{(3)}(k, \omega)$ определяется в (3.5). Нижний правый блок $\bar{M}^{(3)}(k, \omega)$ получается из верхнего левого $M^{(3)}(k, \omega)$ путем замены элементов $D_{ij}(k)$ на $-D_{ij}(-k)$. Миноры матрицы $M^{(3)}(k, \omega)$ имеют вид

$$\begin{aligned}
 Q_{11}(k, \omega) &= (\omega - D_{22}(k)) \left(\omega - \frac{D_{33}(k)}{K_k} \right) - \frac{D_{23}(k)D_{23}(k)}{K_k}, \\
 Q_{12}(k, \omega) &= -D_{12}(k) \left(\omega - \frac{D_{33}(k)}{K_k} \right) - \frac{D_{13}(k)D_{23}(k)}{K_k}, \\
 Q_{13}(k, \omega) &= D_{13}(k)(\omega - D_{22}(k)) + D_{12}(k)D_{23}(k), \\
 Q_{22}(k, \omega) &= (\omega - D_{11}(k)) \left(\omega - \frac{D_{33}(k)}{K_k} \right) - D_{13}(k)D_{13}(k), \\
 Q_{23}(k, \omega) &= D_{23}(k)(\omega - D_{11}(k)) - D_{12}(k)D_{13}(k), \\
 Q_{33}(k, \omega) &= (\omega - D_{11}(k))(\omega - D_{22}(k)) - D_{12}(k)D_{12}(k),
 \end{aligned} \tag{Б.1}$$

миноры матрицы $\bar{M}^{(3)}(k, \omega)$:

$$\begin{aligned}
 \bar{Q}_{11}(k, \omega) &= (\omega + D_{22}(-k)) \left(\omega + \frac{D_{33}(-k)}{K_{-k}} \right) - \frac{D_{23}(-k)D_{23}(-k)}{K_{-k}}, \\
 \bar{Q}_{12}(k, \omega) &= D_{12}(-k) \left(\omega + \frac{D_{33}(-k)}{K_{-k}} \right) - \frac{D_{13}(-k)D_{23}(-k)}{K_{-k}}, \\
 \bar{Q}_{13}(k, \omega) &= -D_{13}(-k)(\omega + D_{22}(-k)) + D_{12}(-k)D_{23}(-k), \\
 \bar{Q}_{22}(k, \omega) &= (\omega + D_{11}(-k)) \left(\omega + \frac{D_{33}(-k)}{K_{-k}} \right) - D_{13}(-k)D_{13}(-k), \\
 \bar{Q}_{23}(k, \omega) &= -D_{23}(-k)(\omega + D_{11}(-k)) - D_{12}(-k)D_{13}(-k), \\
 \bar{Q}_{33}(k, \omega) &= (\omega + D_{11}(-k))(\omega + D_{22}(-k)) - D_{12}(-k)D_{12}(-k).
 \end{aligned} \tag{Б.2}$$

Использованные здесь матричные элементы $D_{ij}(k)$ определены в (3.1). Функция K_k представлена формулой (3.4).

Б.2 Определение функции $\mathfrak{R}(k, \omega)$

В главе 4 в рамках спин-поляронной концепции с учетом кулоновского взаимодействия рассчитывается спектр фермиевских возбуждений в сверхпроводящей фазе. Этот спектр определяется нулями детерминанта $\det M^{(6)}(k, \omega)$, который может быть выражен через произведение детерминантов третьего порядка и функции $\mathfrak{R}(k, \omega)$, как это видно в формуле (3.14). Функция $\mathfrak{R}(k, \omega)$ имеет следующий вид

$$\begin{aligned}
\mathfrak{R}(k, \omega) = & \\
& + Q_{11}(k, \omega) \bar{Q}_{11}(k, \omega) (D_{14}(k))^2 + 2Q_{12}(k, \omega) \bar{Q}_{12}(k, \omega) D_{14}(k) D_{25}(k) \\
& + Q_{22}(k, \omega) \bar{Q}_{22}(k, \omega) (D_{25}(k))^2 + 2Q_{13}(k, \omega) \bar{Q}_{13}(k, \omega) \frac{D_{14}(k) D_{36}(k)}{K_k K_{-k}} \\
& + Q_{33}(k, \omega) \bar{Q}_{33}(k, \omega) \frac{(D_{36}(k))^2}{K_k K_{-k}} + 2Q_{23}(k, \omega) \bar{Q}_{23}(k, \omega) \frac{D_{25}(k) D_{36}(k)}{K_k K_{-k}} \\
& - (\omega - D_{11}(k)) (\omega + D_{11}(-k)) \frac{(D_{25}(k) D_{36}(k))^2}{K_k K_{-k}} \\
& - (\omega - D_{22}(k)) (\omega + D_{22}(-k)) \frac{(D_{14}(k) D_{36}(k))^2}{K_k K_{-k}} \\
& - \left(\omega - \frac{D_{33}(k)}{K_k} \right) \left(\omega + \frac{D_{33}(-k)}{K_{-k}} \right) (D_{14}(k) D_{25}(k))^2 \\
& + 2D_{12}(k) D_{12}(-k) \frac{D_{14}(k) D_{25}(k) (D_{36}(k))^2}{K_k K_{-k}} \\
& + 2D_{13}(k) D_{13}(-k) \frac{D_{14}(k) (D_{25}(k))^2 D_{36}(k)}{K_k K_{-k}} \\
& + 2D_{23}(k) D_{23}(-k) \frac{(D_{14}(k))^2 D_{25}(k) D_{36}(k)}{K_k K_{-k}} + \frac{(D_{14}(k) D_{25}(k) D_{36}(k))^2}{K_k K_{-k}}.
\end{aligned} \tag{Б.3}$$

Здесь $Q_{ij}(k, \omega)$ и $\bar{Q}_{ij}(k, \omega)$ — миноры матриц $M^{(3)}(k, \omega)$ и $\bar{M}^{(3)}(k, \omega)$, определение которых вынесено в приложение Б.1. Напомним, что аномальные элементы матрицы $D^{(6)}(k)$ приводятся в (4.5), а нормальные элементы — в (3.1), определение функции K_k представлено в (3.4).

Б.3 Определение переменных, входящих в функции Грина

Функций Грина, рассчитываемые с учетом кулоновского взаимодействия в главе 4, определяются через Q -функции, которые имеют следующий вид

$$\begin{aligned}
Q_{aa^\dagger}(k, \omega) = & +Q_{11}(k, \omega) \det \bar{M}^{(3)}(k, \omega) + 2D_{23}(k)\bar{Q}_{23}(k, \omega) \frac{D_{25}(k)D_{36}(k)}{K_k K_{-k}} \\
& - \left(\omega - \frac{D_{33}(k)}{K_k} \right) \bar{Q}_{22}(k, \omega) (D_{25}(k))^2 \\
& - (\omega - D_{22}(k)) \bar{Q}_{33}(k, \omega) \frac{(D_{36}(k))^2}{K_k K_{-k}} \\
& + (\omega + D_{11}(-k)) \frac{(D_{25}(k)D_{36}(k))^2}{K_k K_{-k}},
\end{aligned} \tag{Б.4}$$

$$\begin{aligned}
Q_{ba^\dagger}(k, \omega) = & -Q_{12}(k, \omega) \det \bar{M}^{(3)}(k, \omega) + D_{23}(k)\bar{Q}_{13}(k, \omega) \frac{D_{14}(k)D_{36}(k)}{K_k K_{-k}} \\
& - D_{13}(k)\bar{Q}_{23}(k, \omega) \frac{D_{25}(k)D_{36}(k)}{K_k K_{-k}} - D_{12}(k)\bar{Q}_{33}(k, \omega) \frac{(D_{36}(k))^2}{K_k K_{-k}} \\
& - \left(\omega - \frac{D_{33}(k)}{K_k} \right) \bar{Q}_{12}(k, \omega) D_{14}(k) D_{25}(k) \\
& + D_{12}(-k) \frac{D_{14}(k)D_{25}(k)(D_{36}(k))^2}{K_k K_{-k}},
\end{aligned} \tag{Б.5}$$

$$\begin{aligned}
Q_{La^\dagger}(k, \omega) = & +Q_{13}(k, \omega) \det \bar{M}^{(3)}(k, \omega) - D_{12}(k)\bar{Q}_{23}(k, \omega) \frac{D_{25}(k)D_{36}(k)}{K_{-k}} \\
& - D_{13}(k)\bar{Q}_{22}(k, \omega) (D_{25}(k))^2 - D_{23}(k)\bar{Q}_{12}(k, \omega) D_{14}(k) D_{25}(k) \\
& + (\omega - D_{22}(k)) \bar{Q}_{13}(k, \omega) \frac{D_{14}(k)D_{36}(k)}{K_{-k}} \\
& + D_{13}(-k) \frac{D_{14}(k)(D_{25}(k))^2 D_{36}(k)}{K_{-k}},
\end{aligned} \tag{Б.6}$$

$$\begin{aligned}
Q_{bb^\dagger}(k, \omega) = & +Q_{22}(k, \omega) \det \bar{M}^{(3)}(k, \omega) - 2D_{13}(k)\bar{Q}_{13}(k, \omega) \frac{D_{14}(k)D_{36}(k)}{K_k K_{-k}} \\
& - \left(\omega - \frac{D_{33}(k)}{K_k} \right) \bar{Q}_{11}(k, \omega) (D_{14}(k))^2 \\
& - (\omega - D_{11}(k)) \bar{Q}_{33}(k, \omega) \frac{(D_{36}(k))^2}{K_k K_{-k}} \\
& + (\omega + D_{22}(-k)) \frac{(D_{14}(k)D_{36}(k))^2}{K_k K_{-k}},
\end{aligned} \tag{Б.7}$$

$$\begin{aligned}
Q_{aa}(k, \omega) = & +Q_{11}(k, \omega)\bar{Q}_{11}(k, \omega)D_{14}(k) + Q_{12}(k, \omega)\bar{Q}_{12}(k, \omega)D_{25}(k) \\
& + D_{12}(k)D_{12}(-k)\frac{D_{25}(k)(D_{36}(k))^2}{K_k K_{-k}} + D_{13}(k)D_{13}(-k)\frac{(D_{25}(k))^2 D_{36}(k)}{K_k K_{-k}} \\
& + Q_{13}(k, \omega)\bar{Q}_{13}(k, \omega)\frac{D_{36}(k)}{K_k K_{-k}} + \frac{D_{14}(k)(D_{25}(k)D_{36}(k))^2}{K_k K_{-k}} \\
& - \left(\omega - \frac{D_{33}(k)}{K_k}\right)\left(\omega + \frac{D_{33}(-k)}{K_{-k}}\right)D_{14}(k)(D_{25}(k))^2 \\
& - (\omega - D_{22}(k))(\omega + D_{22}(-k))\frac{D_{14}(k)(D_{36}(k))^2}{K_k K_{-k}} \\
& + 2D_{23}(k)D_{23}(-k)\frac{D_{14}(k)D_{25}(k)D_{36}(k)}{K_k K_{-k}},
\end{aligned} \tag{B.8}$$

$$\begin{aligned}
Q_{ab}(k, \omega) = & -Q_{11}(k, \omega)\bar{Q}_{12}(k, \omega)D_{14}(k) - Q_{12}(k, \omega)\bar{Q}_{22}(k, \omega)D_{25}(k) \\
& - Q_{13}(k, \omega)\bar{Q}_{23}(k, \omega)\frac{D_{36}(k)}{K_k K_{-k}} - D_{23}(k)D_{13}(-k)\frac{D_{14}(k)D_{25}(k)D_{36}(k)}{K_k K_{-k}} \\
& - D_{12}(k)(\omega + D_{11}(-k))\frac{D_{25}(k)(D_{36}(k))^2}{K_k K_{-k}} \\
& + (\omega - D_{22}(k))D_{12}(-k)\frac{D_{14}(k)(D_{36}(k))^2}{K_k K_{-k}},
\end{aligned} \tag{B.9}$$

$$\begin{aligned}
Q_{ba}(k, \omega) = & -Q_{12}(k, \omega)\bar{Q}_{11}(k, \omega)D_{14}(k) - Q_{22}(k, \omega)\bar{Q}_{12}(k, \omega)D_{25}(k) \\
& - Q_{23}(k, \omega)\bar{Q}_{13}(k, \omega)\frac{D_{36}(k)}{K_k K_{-k}} - D_{13}(k)D_{23}(-k)\frac{D_{14}(k)D_{25}(k)D_{36}(k)}{K_k K_{-k}} \\
& + (\omega - D_{11}(k))D_{12}(-k)\frac{D_{25}(k)(D_{36}(k))^2}{K_k K_{-k}} \\
& - D_{12}(k)(\omega + D_{22}(-k))\frac{D_{14}(k)(D_{36}(k))^2}{K_k K_{-k}},
\end{aligned} \tag{B.10}$$

$$\begin{aligned}
Q_{bb}(k, \omega) = & +Q_{12}(k, \omega)\bar{Q}_{12}(k, \omega)D_{14}(k) + Q_{22}(k, \omega)\bar{Q}_{22}(k, \omega)D_{25}(k) \\
& + Q_{23}(k, \omega)\bar{Q}_{23}(k, \omega)\frac{D_{36}(k)}{K_k K_{-k}} + D_{12}(k)D_{12}(-k)\frac{D_{14}(k)(D_{36}(k))^2}{K_k K_{-k}} \\
& + D_{23}(k)D_{23}(-k)\frac{(D_{14}(k))^2 D_{36}(k)}{K_k K_{-k}} + \frac{(D_{14}(k))^2 D_{25}(k)(D_{36}(k))^2}{K_k K_{-k}} \\
& - \left(\omega - \frac{D_{33}(k)}{K_k}\right)\left(\omega + \frac{D_{33}(-k)}{K_{-k}}\right)(D_{14}(k))^2 D_{25}(k) \\
& - (\omega - D_{11}(k))(\omega + D_{11}(-k))\frac{D_{25}(k)(D_{36}(k))^2}{K_k K_{-k}} \\
& + 2D_{13}(k)D_{13}(-k)\frac{D_{14}(k)D_{25}(k)D_{36}(k)}{K_k K_{-k}},
\end{aligned} \tag{B.11}$$

$$\begin{aligned}
Q_{LL}(k, \omega) = & +Q_{13}(k, \omega)\bar{Q}_{13}(k, \omega)D_{14}(k) + Q_{23}(k, \omega)\bar{Q}_{23}(k, \omega)D_{25}(k) \\
& + Q_{33}(k, \omega)\bar{Q}_{33}(k, \omega)D_{36}(k) + D_{13}(k)D_{13}(-k)D_{14}(k)(D_{25}(k))^2 \\
& + D_{23}(k)D_{23}(-k)(D_{14}(k))^2 D_{25}(k) + (D_{14}(k)D_{25}(k))^2 D_{36}(k) \\
& - (\omega - D_{11}(k))(\omega + D_{11}(-k))(D_{25}(k))^2 D_{36}(k) \\
& - (\omega - D_{22}(k))(\omega + D_{22}(-k))(D_{14}(k))^2 D_{36}(k) \\
& + 2D_{12}(k)D_{12}(-k)D_{14}(k)D_{25}(k)D_{36}(k).
\end{aligned} \tag{B.12}$$

Явный вид функций $Q_{ij}(k, \omega)$ и $\bar{Q}_{ij}(k, \omega)$ приведен в приложении **Б.1**. Компоненты энергетической матрицы $D^{(3)}(k)$ определены в (3.1), компоненты сверхпроводящего параметра порядка $D_{14}(k)$, $D_{25}(k)$ и $D_{36}(k)$ — в (4.5). Функция K_k представлена формулой (3.4).

Б.4 Определение матрицы $w(k, \omega)$

Элементы $w_{ij}(k, \omega)$ 3×3 матрицы $w(k, \omega)$ (4.18):

$$\begin{aligned}
w_{11}(k, \omega) &= -2V_2 \cos(k_x) (\cos(k_x) - \cos(k_y)) Q_{11}(k, \omega) \bar{Q}_{11}(k, \omega), \\
w_{12}(k, \omega) &= -2V_2 \cos(k_x) (\cos(k_x) - \cos(k_y)) Q_{12}(k, \omega) \bar{Q}_{12}(k, \omega), \\
w_{13}(k, \omega) &= -2V_2 \cos(k_x) (\cos(k_x) - \cos(k_y)) Q_{13}(k, \omega) \bar{Q}_{13}(k, \omega) / K_k K_{-k}, \\
w_{21}(k, \omega) &= -2V_2 \cos(k_x) (\cos(k_x) - \cos(k_y)) Q_{12}(k, \omega) \bar{Q}_{12}(k, \omega), \\
w_{22}(k, \omega) &= -2V_2 \cos(k_x) (\cos(k_x) - \cos(k_y)) Q_{22}(k, \omega) \bar{Q}_{22}(k, \omega), \\
w_{23}(k, \omega) &= -2V_2 \cos(k_x) (\cos(k_x) - \cos(k_y)) Q_{23}(k, \omega) \bar{Q}_{23}(k, \omega) / K_k K_{-k}, \\
w_{31}(k, \omega) &= (\cos(k_x) - \cos(k_y)) \left(U_p C_1 Q_{11}(k, \omega) \bar{Q}_{11}(k, \omega) / 2 \right. \\
&\quad - V_2 C_1 \cos(k_x) (Q_{11}(k, \omega) \bar{Q}_{11}(k, \omega) + Q_{12}(k, \omega) \bar{Q}_{12}(k, \omega)) \\
&\quad + (\cos(k_x) - \cos(k_y)) (Q_{13}(k, \omega) \bar{Q}_{13}(k, \omega) \\
&\quad - C_1 (s_{k,x} Q_{11}(k, \omega) - s_{k,y} Q_{12}(k, \omega)) \\
&\quad \left. \times (s_{-k,x} \bar{Q}_{11}(k, \omega) - s_{-k,y} \bar{Q}_{12}(k, \omega)) \right), \\
w_{32}(k, \omega) &= (\cos(k_x) - \cos(k_y)) \left(U_p C_1 Q_{12}(k, \omega) \bar{Q}_{12}(k, \omega) / 2 \right. \\
&\quad - V_2 C_1 \cos(k_x) (Q_{12}(k, \omega) \bar{Q}_{12}(k, \omega) + Q_{22}(k, \omega) \bar{Q}_{22}(k, \omega)) \\
&\quad + (\cos(k_x) - \cos(k_y)) (Q_{23}(k, \omega) \bar{Q}_{23}(k, \omega) \\
&\quad - C_1 (s_{k,x} Q_{12}(k, \omega) - s_{k,y} Q_{22}(k, \omega)) \\
&\quad \left. \times (s_{-k,x} \bar{Q}_{12}(k, \omega) - s_{-k,y} \bar{Q}_{22}(k, \omega)) \right), \\
w_{33}(k, \omega) &= (\cos(k_x) - \cos(k_y)) \left(U_p C_1 Q_{13}(k, \omega) \bar{Q}_{13}(k, \omega) / 2 \right. \\
&\quad - V_2 C_1 \cos(k_x) (Q_{13}(k, \omega) \bar{Q}_{13}(k, \omega) + Q_{23}(k, \omega) \bar{Q}_{23}(k, \omega)) \\
&\quad + (\cos(k_x) - \cos(k_y)) (Q_{33}(k, \omega) \bar{Q}_{33}(k, \omega) \\
&\quad - C_1 (s_{k,x} Q_{13}(k, \omega) - s_{k,y} Q_{13}(k, \omega)) \\
&\quad \left. \times (s_{-k,x} \bar{Q}_{13}(k, \omega) - s_{-k,y} \bar{Q}_{23}(k, \omega)) \right) / K_k K_{-k}.
\end{aligned}$$

Явный вид функции $Q_{ij}(k, \omega)$ и $\bar{Q}_{ij}(k, \omega)$ приводится в приложении **Б.1**. Выражения для $s_{k,x}$ и $s_{k,y}$ определены в **(2.8)**. Функция K_k представлена формулой **(3.4)**. C_1 — спиновая корреляционная функция, значение которой приведено в таблице **3**. Значения параметров U_p и V_2 расширенной спин-фермионной модели даны в таблице **4**.