

Влияние магнитных корреляций и трехцентровых взаимодействий на фазовую диаграмму высокотемпературных сверхпроводников с $d_{x^2-y^2}$ симметрией параметра порядка

В.В. Вальков, Д.М. Дзедзисашвили,
Институт физики им.Л.В.Киренского СО РАН 660036, Красноярск, Россия
Красноярский государственный университет, 660075, Красноярск, Россия

Известно [1], что в режиме сильных электронных корреляций в эффективном гамильтониане модели Хаббарда, помимо взаимодействий, соответствующих t - J -модели, возникают дополнительные, так называемые трехцентровые взаимодействия (ТЦВ). В работах [3-5] было показано, что учет этих взаимодействий имеет принципиальное значение при получении условий формирования $d_{x^2-y^2}$ -сверхпроводимости. Известно также, что магнитные флуктуации (МФ) играют существенную роль в магнитном механизме ВТСП [5-7]. В этом отношении интересны исследования, связанные с явным введением в теорию электронного строения CuO_2 -плоскости магнитополяронных связанных состояний [8], обусловленных учетом двухузельных взаимодействий.

К настоящему времени в литературе отражены результаты исследований отдельного влияния, как ТЦВ так и МФ на формирование SC-фазы. В то же время отсутствуют данные по их совместному воздействию.

В данной работе рассмотрено одновременное влияние ТЦВ и МФ на концентрационную зависимость температуры перехода T_c в сверхпроводящую фазу с $d_{x^2-y^2}$ -типом симметрии параметра порядка.

Рассмотрение проведено на основе модели Хаббарда, гамильтониан которой в режиме сильных электронных корреляций (СЭК) (до второго порядка по параметру t/U) и в представлении операторов Хаббарда имеет вид

$$H_{IJ^*} = H_{IJ} + H_{(3)}, \quad (1)$$

где H_{IJ} представляет собой гамильтониан обычной $t-J$ модели:

$$H_{IJ} = \sum_{f\sigma} (\varepsilon - \mu) X_f^{\sigma\sigma} + \sum_{fm\sigma} t_{fm} X_f^{\sigma 0} X_m^{0\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{fm\sigma} J_{fm} (X_f^{\sigma\bar{\sigma}} X_m^{\bar{\sigma}\sigma} - X_f^{\sigma\sigma} X_m^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}),$$

а трехцентровые взаимодействия описываются слагаемым

$$H_{(3)} = \sum_{\substack{fmg\sigma \\ (f \neq g)}} \left(\frac{t_{fm} t_{mg}}{U} \right) (X_f^{\sigma 0} X_m^{\bar{\sigma}\sigma} X_g^{0\bar{\sigma}} - X_f^{\sigma 0} X_m^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} X_g^{0\sigma}).$$

Здесь все обозначения стандартные. Важно отметить, что появление, как обменного взаимодей-

ствия, так и ТЦВ имеет одну причину и обусловлено фактическим наличием двоечных состояний в системе, поскольку эффективный оператор двоек на подпространстве, не содержащем состояния с двумя электронами на узле, имеет вид

$$\hat{N}_2 = - \sum_{fmg\sigma} \left(\frac{t_{fm} t_{mg}}{U^2} \right) (X_f^{\sigma 0} X_m^{\bar{\sigma}\sigma} X_g^{0\bar{\sigma}} - X_f^{\sigma 0} X_m^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} X_g^{0\sigma}).$$

Отсюда ясно, что для последовательного изучения модели Хаббарда в режиме СЭК необходимо учитывать ТЦВ.

Главный эффект ТЦВ в уравнении на температуру T_c для $d_{x^2-y^2}$ -симметрии сверхпроводящего параметра порядка проявляется в перенормировке константы связи по сценарию $J \rightarrow Jn/2$ [3,4]. Само уравнение на T_c в приближении ближайших соседей имеет вид

$$1 = \left(\frac{n}{2} \right) \left(\frac{J}{N} \right) \sum_q \frac{(\cos q_x - \cos q_y)^2}{(\tilde{\varepsilon}_q - \mu)} \text{th} \left(\frac{\tilde{\varepsilon}_q - \mu}{2T_c} \right). \quad (2)$$

Как показано в [4] данное обстоятельство приводит к тому, что область существования сверхпроводящего состояния на $T-n$ диаграмме сильно уменьшается.

Второй эффект ТЦВ заключается в возникновении эффективных перескоков в более далекие координационные сферы. Так, при учете перескоков электронов только между ближайшими соседями, квазиимпульсная зависимость фермиевского спектра $\tilde{\varepsilon}_q$, входящего в (2), благодаря $H_{(3)}$, помимо инварианта $\gamma_1(q) = (\cos q_x + \cos q_y)/2$, будет включать в себя также инварианты $\gamma_2(q) = \cos q_x \cos q_y$ и $\gamma_3(q) = (\cos 2q_x + \cos 2q_y)/2$ которые эффективно описывают перескоки во 2-ю и 3-ю координационные сферы. Важное обстоятельство заключается в том, что амплитуды дальних перескоков существенно перенормируются магнитными корреляционными функциями $C_i = \langle \bar{S}_f \bar{S}_{f+i} \rangle$ которые отражают интенсивность МФ. В приближении ближайших соседей $i = 1, 2, 3$.

Отметим, что в работе [4] магнитные корреляторы не учитывались. В этой связи возникает естественный вопрос о влиянии магнитных корреляций на фазовую диаграмму системы при учете ТЦВ. Для ответа на поставленный вопрос было проведено

вычисление спиновых корреляционных функций с использованием идеологии квантовой спиновой жидкости [9-11]. Спиновые корреляторы предполагались сферически симметричными, а для их вычисления была составлена система уравнений движения второго порядка для функций Грина, записанных на операторах Хаббарда, с дальнейшим расщеплением высших функций Грина с учетом алгебры операторов Хаббарда.

Результат самосогласованного численного расчета концентрационной зависимости температуры сверхпроводящего перехода для $t-J^*$ -модели в приближении ближайших соседей представлен на рисунке 1 (сплошная линия). Для сравнения здесь же приведены аналогичные зависимости для $t-J^*$ -модели без учета спиновых корреляторов (штрих-пунктирная линия) и для $t-J$ -модели (пунктирная линия).

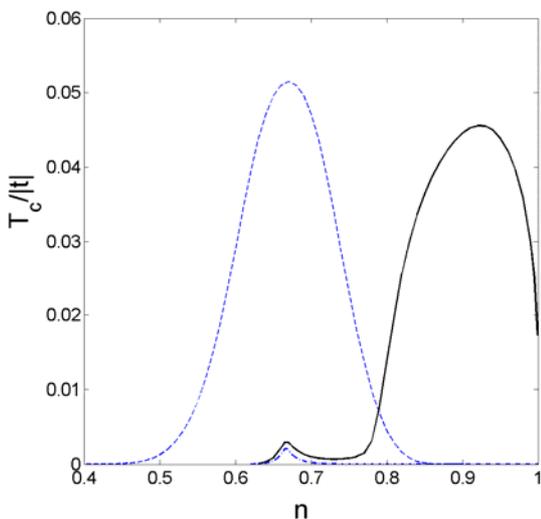


Рисунок 1. Концентрационная зависимость температуры сверхпроводящего перехода.

Из сравнения этих трех зависимостей видны качественные изменения фазовой диаграммы при последовательном включении ТЦВ и магнитных флуктуаций. Так, включение только трёхцентровых взаимодействий существенно уменьшает область реализации сверхпроводящей фазы. Как было показано в работе [4] данное обстоятельство связано исключительно с перенормировкой константы по сценарию отмеченному выше.

Учет в $t-J^*$ -модели спиновых корреляционных функций приводит к качественному изменению зависимости $T_c(n)$, индуцируя появления дополнительного максимума в области малого допирования. Важно отметить, что этот максимум возникает только при одновременном учете как ТЦВ, так и ренормировок электронного спектра за счет магнитных корреляций, и обусловлен сильной модификацией плотности состояний фермиевских квазичастиц при допировании.

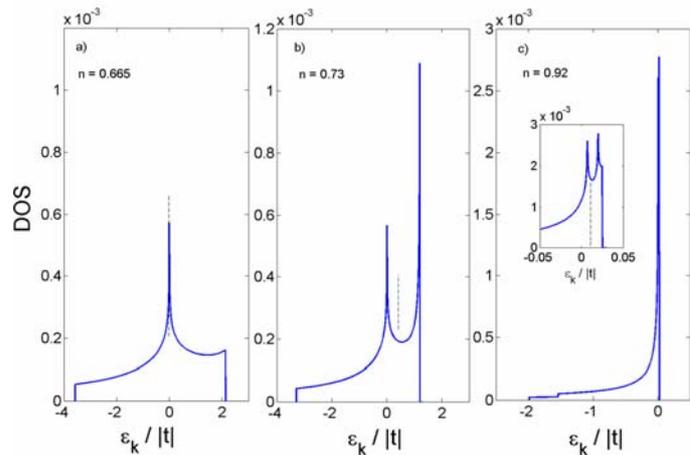


Рисунок 2. Эволюция плотности состояний фермиевских квазичастиц при допировании. Положение химпотенциала обозначено вертикальной пунктирной линией.

Как видно из рисунка 2а при концентрации электронов $n = 0.665$ в плотности состояний имеется одна особенность Ван-Хова. Положению химпотенциала на этой особенности соответствует первый максимум в $T_c(n)$ на рисунке 1 (сплошная линия). При дальнейшем увеличении концентрации n происходит сильное сужение зоны в области высоких энергий и, в частности, к появлению второй особенности Ван-Хован в окрестности потолка валентной зоны. Такая эволюция плотности состояний приводит к увеличению числа электронов на уровне Ферми и как следствие к повторному всплеску в зависимости $T_c(n)$.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ+ ККФН "Енисей" (грант N 02-02-97705), РФФИ (грант N 03-02-16124), INTAS (грант N 01-0654), а также комплексной программы научных исследований РАН "Квантовая макрофизика". Один из авторов (Д.М.Д.) признателен Благотворительному Фонду содействия отечественной науке, а также Лаврентьевскому конкурсу молодежных проектов СО РАН за финансовую поддержку исследований.

1. Изюмов Ю.А., УФН, **167**, 465 (1997).
 2. Hirsch J.E., Phys.Lett A **136**, 163 (1989);
 3. Yushankhay V.Yu., Vujicic G.M., Zakula R.B., Phys.Lett A **151**, 254 (1990);
 4. Вальков В.В., Валькова Т.А., Дзедзисавили Д.М., Овчинников С.Г., Письма в ЖЭТФ, **75**, 450 (2002).
 5. Kampf A.P., Phys. Rep., **249**, 219 (1994);
 6. Изюмов Ю.А., УФН, **169**, 225 (1999);
 7. Плакида Н.М., Письма в ЖЭТФ, **74**, 38 (2001).
 8. Kuzian R.O., Hayn R., Barabanov A.F., Maksimov L.A., Phys. Rev., **58**, 6194 (1998).
 9. Shimahara H., Takada S., JPSJ, **61**, 989 (1992).
 10. Shimahara H., Takada S., JPSJ, **60**, 2394-2405 (1991).
- Барабанов А.Ф., Березовский В.М., ЖЭТФ, **106**, 1156 (1994).