Высокотемпературная сверхпроводимость в модели Хаббарда с дальнодействующим кулоновским взаимодействием.

В.И. Пентегов[1], Э.А. Пашицкий[1], Д. Манске[2], И. Ерёмин[2]
[1]*Институт физики, НАН Украины*
пр. Науки 46, Киев, 03028, Украина
[2]*Institut für Theoretische Physik,*
Freie Universität Berlin, D-14195 Berlin, Germany

Исследуется возможность одновременного учёта в диаграммной технике дальнодействующего кулоновского взаимодействия и локального хаббардовского отталкивания на узле при рассмотрении сверхпроводящего состояния высокотемпературных сверхпроводников на основе купратных металло-оксидных соединений. Полученные выражения позволяют вычислить нормальную и аномальную собственные энергии квазичастиц вблизи температуры сверхпроводящего перехода T_c. При этом явно учитываются многочастичные кулоновские корреляции, которые описываются вершинными функциями, удовлетворяющими обобщённому тождеству Уорда. Предлагаемый самосогласованный подход позволяет исследовать в узельном приближении сильной связи роль кулоновского взаимодействия в формировании синглетного сверхпроводящего состояния с *d*-волновой симметрией параметра порядка.

1. Рассмотрим слоистый кристалл с простой квадратной решёткой в плоскости слоёв $a-b$. Если ограничиться однозонной моделью, оператор кулоновского взаимодействия в гамильтониане можно представить в следующем виде:

$$H_{\text{int}} = \frac{1}{2}\frac{1}{N}\left[\sum_{\substack{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}\\ \sigma,\sigma'}} \upsilon(\mathbf{q})\, a^{+}_{\mathbf{k}\sigma} a^{+}_{\mathbf{k}'\sigma'} a_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\sigma'} a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma} + u \sum_{\substack{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}\\ \sigma}} a^{+}_{\mathbf{k}\sigma} a^{+}_{\mathbf{k}'-\sigma} a_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}-\sigma} a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma}\right]; \qquad (10)$$

здесь $a^{+}_{\mathbf{k}\sigma}$, $a_{\mathbf{k}\sigma}$ — операторы рождения и уничтожения квазичастиц в блоховских состояниях с проекцией спина σ, $\upsilon(\mathbf{q})$ — дальнодействующая часть неэкранированного кулоновского взаимодействия

$$\upsilon(\mathbf{q}_{\parallel}, q_z) = \frac{e^2}{\varepsilon_i} \sum_{\substack{\boldsymbol{\rho}_i, z_i\\ \boldsymbol{\rho}_i^2 + z_i^2 \neq 0}} \frac{e^{i(\mathbf{q}_{\parallel}\boldsymbol{\rho}_i + q_z z_i)}}{\sqrt{\boldsymbol{\rho}_i^2 + z_i^2}}, \qquad (11)$$

где $\boldsymbol{\rho}_i$ и z_i — координаты узлов решётки в плоскости слоёв и перпендикулярно слоям, соответственно, ε_i — высокочастотная диэлектрическая постоянная ионной решётки, а u — кулоновское отталкивание на узле (константа Хаббарда) для электронов с противоположными спинами в состояниях, которые определяются функциями Ванье $\phi(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i)$:

$$u = \int V_C(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\left|\phi(\mathbf{r})\right|^2 \left|\phi(\mathbf{r}')\right|^2 d\mathbf{r}d\mathbf{r}'. \qquad (12)$$

Как показано в [1], взаимодействие υ может быть с хорошей точностью аппроксимировано во всей зоне Бриллюэна выражением

$$\upsilon(q_{\parallel}, q_z) \approx \frac{2\pi e^2}{\varepsilon_i a^2}\frac{1}{Q(\mathbf{q}_{\parallel})}\frac{\sinh Q(\mathbf{q}_{\parallel})c}{\cosh Q(\mathbf{q}_{\parallel})c - \cos q_z c} - \upsilon_0 \qquad (13)$$

где a and c — постоянные решётки в направлениях вдоль и поперёк купратных слоёв, а функция $Q(\mathbf{q}_{\parallel})$ определена как

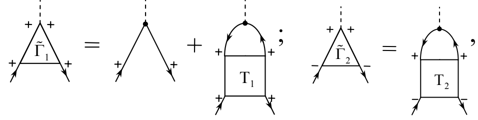
$$Q(\mathbf{q}_{\parallel}) = \frac{2}{a}\sqrt{\sin(\tfrac{q_x a}{2})^2 + \sin(\tfrac{q_y a}{2})^2} \qquad (14)$$

Константа $\upsilon_0 = \dfrac{2e^2}{\varepsilon_i a}\alpha$ пропорциональна постоянной Маделунга $\alpha \approx 1.95$ двумерного металла с простой квадратной элементарной ячейкой.

2. Наличие двух слагаемых в операторе взаимодействия (1) определяет следующее выражение для нормальной собственной энергии:

$$\begin{aligned}\Sigma(k) &= \Sigma_1(k) + \Sigma_2(k)\\ &= -T\sum_{k'}\big[\upsilon(k-k')\tilde{\Gamma}_1(k,k')\\ &\quad + (\upsilon(k-k') + u)\tilde{\Gamma}_2(k,k')\big]G(k')\end{aligned} \qquad (15)$$

где G — точная функция Грина, а k обозначает импульс $\mathbf{k}$ и фермионную мацубаровскую частоту $i\omega_n = i\pi T(2n+1)$. Скалярные вершины $\tilde{\Gamma}_1$ and $\tilde{\Gamma}_2$ даются следующими интегральными уравнениями:



(16)

где T_1 и T_2 обозначают полные четырёхполюсники, а знаки «плюс» и «минус» соответствуют проекциям спина. С помощью уравнений Бете-Солпитера для неприводимых четырёхполюсников в двух разных каналах взаимодействия получим окончательно выражение для собственной энергии [1]:

$$\begin{aligned}\Sigma(k) = -T\sum_{k'}\big[&V_1(k-k')\Gamma_1(k,k')\\ &+ V_2(k-k')\Gamma_2(k,k')\big]G(k')\end{aligned} \qquad (17)$$

с перенормированными вершинами $\Gamma_{1,2}$, удовлетворяющими уравнениям

$$\tilde{\Gamma}_{1,2} = \frac{\Gamma_{1,2}\left[1+\upsilon\Pi_1+(\upsilon+u)\Pi_2\right]-\Gamma_{2,1}\left[(\upsilon+u)\Pi_1+\upsilon\Pi_2\right]}{\left[1+(2\upsilon+u)(\Pi_1+\Pi_2)\right]\left[1-u(\Pi_1-\Pi_2)\right]} \quad (18)$$

и с экранированным взаимодействием $V_{1,2}$ между квазичастицами с параллельными и антипараллельными спинами, соответственно:

$$\left.\begin{matrix} V_1 \\ V_2 \end{matrix}\right\} = \left.\begin{matrix} \upsilon-u(2\upsilon+u)\Pi_1 \\ \upsilon+u+u(2\upsilon+u)\Pi_2 \end{matrix}\right\} \times\frac{1}{\left[1+(2\upsilon+u)(\Pi_1+\Pi_2)\right]\left[1-u(\Pi_1-\Pi_2)\right]} \quad (19)$$

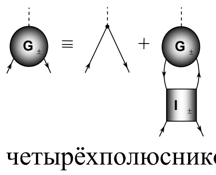
Здесь $\Pi_{1,2}$ — электронные поляризационные операторы

$$\Pi_{1,2}(q)=-T\sum_k G(k+q)G(k)\Gamma_{1,2}(k+q,k) \quad (20)$$

3. Введём новые вершинные и поляризационные операторы, определяемые как

$$\mathsf{G}_{\pm}=\Gamma_1\pm\Gamma_2;\quad \mathsf{P}_{\pm}=\Pi_1\pm\Pi_2 \quad (21)$$

Вершины $\mathsf{G}_{\pm}$ удовлетворяют обычным интегральным уравнениям



(22)

с неприводимым четырёхполюсником $\mathsf{I}_{\pm}$.

Поскольку для обеих вершин $\mathsf{G}_{\pm}$ должно выполняться обобщённое тождество Уорда, при их вычислении используется подход, предложенный в [2], в явном виде обеспечивающий выполнение этого соотношения. Мы получаем, таким образом,

$$\mathsf{G}_{\pm}(k,k+q) \approx\left[1-\mathsf{f}_{\pm}(k,k+q)\mathsf{P}_{\pm}(q)\right]\frac{G(k+q)^{-1}-G(k)^{-1}}{G^0(k+q)^{-1}-G^0(k)^{-1}}, \quad (23)$$

где G^0 — функция Грина невзаимодействующих частиц,

$$\mathsf{f}_{+}(k,k+q)=\left\langle \mathsf{I}_{+}(k,k+q;k',k'+q)\right\rangle_{k'}\approx\left\langle V_1\right\rangle_{FS}; \quad (24)$$

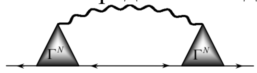
$$\mathsf{f}_{-}(k,k+q)=\left\langle \mathsf{I}_{-}(k,k+q;k',k'+q)\right\rangle_{k'}\approx\left\langle V_H\right\rangle_{FS} \quad (25)$$

а взаимодействие V_H определяется как

$$V_H=\frac{U^2\Pi^{(0)}}{1-U\Pi^{(0)}};\quad U=\left\langle V_2\right\rangle_{FS}; \quad (26)$$

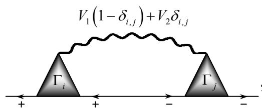
здесь поляризационный оператор Π_0 вычисляется с использованием точных функций Грина, однако вершина Γ полагается равной единице.

5. Для описания сверхпроводящего состояния необходимо вычислить аномальную собственную энергию, которая содержит как нормальную Γ^N, так и аномальную Γ^A вершинные функции. Как было показано в [3] для случая элетрон-фононного взаимодействия, вблизи критической температуры T_c линеаризованная по отношению к параметру порядка аномальная собственная энергия может быть с хорошей точностью представлена диаграммой



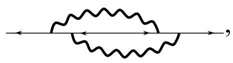
(27)

В случае рассматриваемого взаимодействия (1) выражение (18) записывается в виде суммы четырёх слагаемых

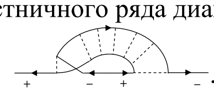


$, \; i,j=1,2.$ (28)

Однако, в выражении (19) для аномальной собственной энергии не учитываются диаграммы с пересекающимися линиями взаимодействия, например


, (29)

которые в случае кулоновского взаимодействия не малы. Такие диаграммы учитываются введением в выражение для аномальной собственной энергии дополнительного слагаемого, представляющего собой сумму лестничного ряда диаграмм типа



. (30)

Таким образом, система уравнений для сверхпроводящего параметра порядка записывается как

$$\Phi(k,\omega_n)=\Sigma_1^A(k,\omega_n)+\Sigma_2^A(k,\omega_n) \quad (31)$$

$$\Sigma_1^A(k,\omega_n)=-\frac{T}{N^2}\sum_{\substack{k'\omega_m\\ ij}}\Big[V_1(k-k',\omega_n-\omega_m)(1-\delta_{ij}) +V_2(k-k',\omega_n-\omega_m)\delta_{ij}\Big]\Phi(k',\omega_m) \times\Gamma_i(k,\omega_n;k',\omega_m)\left|G(k',\omega_m)\right|^2\Gamma_j(k',\omega_m;k,\omega_n) \quad (32)$$

$$\Sigma_2^A(k,\omega_n) =\frac{T}{N^2}\sum_{k'\omega_m}V_H(k-k',\omega_n-\omega_m)\Phi(k',\omega_m)\left|G(k',\omega_m)\right|^2 \quad (33)$$

Предварительные вычисления показывают, что одновременный учёт дальнодействующего кулоновского и хаббардовского взаимодействий приводит к более высоким критическим температурам сверхпроводящего перехода в $d_{x^2-y^2}$-волновом канале, по сравнению с результатами для каждого из этих взаимодействий, взятых в отдельности.

1. E. A. Pashitskii, V. I. Pentegov, D. Manske, I. Eremin, J.Supercond. **17**, 421 (2004).

2. Y. Takada, Phys. Rev. Lett. **87**, 226402 (2001).

3. О. В. Долгов, Е. Г. Максимов, Труды ФИАН, **148**, 3 (1983).