

Трехцентровые взаимодействия и магнитные корреляции в проблеме высокотемпературной сверхпроводимости

В.В. Вальков, Д.М. Дзедзисашвили, В.А. Мицкан
 Институт физики им. Л.В.Киренского СО РАН, 660036, Красноярск
 Красноярский государственный университет, 660075, Красноярск
 Красноярский государственный технический университет, 660074, Красноярск

Большая часть работ по теории высокотемпературной сверхпроводимости основана на механизмах, связанных с сильными электронными корреляциями (см., например [1-7]). Этим объясняется значительная популярность модели Хаббарда [8], гамильтониан которой может быть записан в виде

$$H = \sum_{f\sigma} (\varepsilon - \mu) a_{f\sigma}^+ a_{f\sigma} + \sum_{fg\sigma} t_{fg} a_{f\sigma}^+ a_{g\sigma} + \frac{1}{2} U \sum_{f\sigma} a_{f\sigma}^+ a_{f\sigma} a_{f\bar{\sigma}}^+ a_{f\bar{\sigma}}, \quad (1)$$

где $a_{f\sigma}$ ($a_{f\sigma}^+$) - фермиевские операторы уничтожения (рождения) электрона на узле f с проекцией спинового момента σ , ε - значение энергии одноэлектронного состояния; t_{fg} - интегралы перескоков электронов с узла g на узел f , U - параметр кулоновского отталкивания двух электронов с противоположными значениями проекций спиновых моментов, находящихся на одном узле. В режиме сильных электронных корреляций ($U \gg t_{fg}$) и числе электронов в расчете на один узел n не превышающем единицу обычно переходят к описанию модели Хаббарда в рамках эффективного гамильтониана H_{eff} [9]. Гильбертово пространство, в котором действует H_{eff} , не содержит двоичных состояний и с точностью до членов пропорциональных t_{fg}^2/U включительно H_{eff} в атомном представлении имеет вид

$$H_{eff} = \sum_{f\sigma} (\varepsilon - \mu) X_f^{\sigma\sigma} + \sum_{fg\sigma} t_{fg} X_f^{\sigma 0} X_g^{0\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{fg\sigma} J_{fg} (X_f^{\sigma\bar{\sigma}} X_g^{\bar{\sigma}\sigma} - X_f^{\sigma\sigma} X_g^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}) + H_{(3)},$$

где $J_{fg} = 2t_{fg}^2/U$, а оператор

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

описывает так называемые трехцентровые взаимодействия. Если пренебречь $H_{(3)}$, то эффективный гамильтониан является гамильтонианом хорошо известной t-J модели. В большинстве случаев при работе с H_{eff} слагаемым $H_{(3)}$ пренебрегают, считая, что модель Хаббарда и t-J- модель физически

эквивалентны с точностью до членов, пропорциональных t_{fg}^2/U .

В первой части данной работы показывается, что игнорирование трехцентровыми слагаемыми приводит к потере соответствия между исходным гамильтонианом Хаббарда и H_{eff} . Этот вывод следует из результатов сравнения энергетических спектров двухэлектронной системы, полученных на основе точного решения уравнения Шредингера для исходной модели Хаббарда и t-J модели. В то же время учет $H_{(3)}$ восстанавливает эквивалентность

H_{eff} гамильтониану Хаббарда как только $8|t| < U$.

Выбор критерия неэквивалентности основан на хорошо известном утверждении о том, что при унитарных преобразованиях гамильтониана его энергетический спектр не меняется. Переход к эффективному гамильтониану может рассматриваться как результат проведения унитарного преобразования и, поэтому, спектры модели Хаббарда и H_{eff} должны совпадать с точностью до членов пропорциональных t_{fg}^2/U . Численное решение дисперсионного уравнения для t-J модели показывает, что в области энергий, лежащих ниже континуума состояний типа рассеяния, всегда имеется отщепленное решение. Очевидно, что оно соответствует связанному состоянию. Это означает, что между электронами возникает эффективное притяжение. С физической точки зрения механизм притяжения в t-J модели достаточно прозрачен. Если два электрона находятся далеко друг от друга, то вклад обменного слагаемого гамильтониана в энергию пары равен нулю. Если же электроны, находятся вблизи друг от друга, то в синглетном состоянии энергия обменной части гамильтониана равна $-2J$. Эта разница в энергиях и проявляется как эффективное взаимодействие между электронами. Сравнивая полученный результат с абсолютным отсутствием тенденции к связанному состоянию в исходной модели Хаббарда, следует признать наличие несоответствия между моделью Хаббарда и t-J моделью. Существенно, что область реализации связанного состояния хотя и уменьшается по мере увеличения параметра кулоновского отталкивания, но имеется всегда, если этот параметр конечен. Так, например, в точке $Q = (\pi, \pi)$ энергия связи $E=2J$ всегда положительна, если U конечно. Подчеркнем, что t-J мо-

дель, как самостоятельная модель, естественно, имеет большое значение и способна описать нетривиальные физические явления (включая ВТСП). Но утверждение об эквивалентности t-J модели и модели Хаббарда даже в режиме сильных электронных корреляций является некорректным.

При включении трехцентровых взаимодействий связанное состояние исчезает при $U > 8|t|$. Это означает, что в области сильных электронных корреляций гамильтониану Хаббарда соответствует не t-J модель, а t-J* модель, учитывающая $H_{(3)}$.

Во второй части работы показано, что трехцентровые взаимодействия играют принципиальную роль в формировании сверхпроводящей фазы с d- типом симметрии параметра порядка. Ранее было показано, что без учета магнитных флуктуаций трехцентровые слагаемые приводят к существенному уменьшению (примерно в 25 раз) температуры перехода в сверхпроводящую фазу [10]. В данной работе рассмотрены ренормировки фермиевского спектра при учете трехцентровых взаимодействий и магнитных флуктуаций (МФ). Для вычисления квазиспиновых корреляторов получены уравнения самосогласованной спиновой динамики сильно коррелированных фермионов с трехцентровыми взаимодействиями. На основе численного решения системы десяти уравнений самосогласования показано, что в приближении ближайших соседей одновременный учет $H_{(3)}$ и МФ при больших n приводит к качественным изменениям структуры энергетического спектра. При этом в плотности состояний индуцируется новая особенность Ван-Хова, а в концентрационной зависимости температуры перехода $T_c(n)$ в сверхпроводящую фазу с $d_{x^2-y^2}$ - типом симметрии параметра порядка появляется дополнительный максимум. Учитывая, что появление новой особенности Ван-Хова реализуется при малой концентрации дырок, можно сделать предположение о магнитополяронной природе ее индуцирования. Такой вывод коррелирует с недавними результатами по исследованию электронной структуры сильно коррелированной спин-фермионной жидкости с привлечением расширенного базиса, включающего магнитополяронные состояния [11]. Вторым аргументом в пользу данной гипотезы является структура $H_{(3)}$, в соответствие с которой перескок электронов становится связанным со спиновой динамикой соседних узлов. Отмеченные факторы объясняют, в частности, почему ранее включение $H_{(3)}$ без учета магнитных корреляций не приводило к существенным изменениям электронного спектра и плотности состояний фермиевских квазичастиц. Подчеркнем, что отмеченные существенные ренормировки в спектре возбуждений,

плотности состояний и зависимости $T_c(n)$ возникают только при одновременном учете магнитных корреляторов и трехцентровых взаимодействий.

Третья часть работы посвящена анализу спектральных представлений и спектральной теоремы для аномальных средних в теории сверхпроводимости сильно коррелированных систем. Показано, что для таких систем имеет место неоднозначное восстановление спектральной интенсивности аномальной корреляционной функции по спектральной теореме. Учет этой неоднозначности приводит к выполнению необходимых правил сумм и снимает запрет на реализацию сверхпроводящей фазы с S-типом симметрии параметра порядка. Представлены результаты исследований по влиянию перескоков носителей тока в дальние координационные сферы на квазиимпульсную зависимость параметра порядка для различных типов его симметрии.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант N 03-02-16124), INTAS (грант N 01-0654), а также Программы Президиума 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. P.W. Anderson, *Science*, **235**, 1196 (1987).
2. Р.О.Зайцев, В.А.Иванов, *Письма в ЖЭТФ*, **46**, 140 (1987).
3. N.M.Plakida, *High-temperature superconductivity*, Springer. - Berlin, 1995
4. Ю.А.Изюмов, *УФН*, **167**, 465 (1997).
5. С.Г.Овчинников, *УФН*, **167**, 1043 (1997).
6. Ю.А.Изюмов, *УФН*, **169**, 225 (1999).
7. Н.М.Плакида, *Письма в ЖЭТФ*, **74**, 38 (2001).
8. J.Hubbard, *Proc. Roy. Soc.* **A276**, 238 (1963).
9. Л.П.Булаевский, Э.Л.Нагаев, Д.Л.Хомский, *ЖЭТФ*, **54**, 1562 (1968).
10. В.В.Вальков, Т.А.Валькова, Д.М.Дзевисашвили, С.Г.Овчинников, *Письма в ЖЭТФ*, **75**, 450 (2002).
11. A.F.Barabanov, A.A.Kovalev, O.V.Urazaev, A.M.Belomouk, *Phys. Lett.*, **A265**, 221 (2000).