УДК 539.74; 53.011

МОДИФИКАЦИЯ СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО ПАРАМЕТРА ПОРЯДКА $\Delta_{\vec{k}}$ ДАЛЬНИМИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ

В.В.Вальков, Д.М.Дзебисашвили*

Показано, что учет дальних межузельных взаимодействий качественно изменяет вид зависимости сверхпроводящей щели от квазиимпульса. При учете перескоков и обменных взаимодействий в пределах трех координационных сфер интегральное уравнение для d-типа симметрии $\Delta_{\vec{k}}$ *удовлетворяется лишь при* $\Delta_{\vec{k}} = \Delta_0\left[\cos k_x - \cos k_y\right] + \Delta_1\left[\cos 2k_x - \cos 2k_y\right]$ *с* $\Delta_1 \neq 0$, *а сверхпроводящая фаза описывается системой двух уравнений самосогласования. При этом реализуется ситуация, когда теоретическая зависимость критической температуры от степени допирования соответствует экспериментальной.*

Известно, что t-J-модель [1] качественно правильно отражает магнитный механизм спаривания в высокотемпературных сверхпроводниках (см., например, обзор [2]). Если эта модель строится на основе модели Хаббарда в режиме сильных корреляций, то эффективный гамильтониан H_{eff} содержит так называемые трехцентровые слагаемые [3,4]. В работе [5] было показано, что трехцентровые слагаемые $H_{(3)}$ дают слабый вклад в дисперсионные зависимости энергетического спектра. Такой результат вполне естествен, так как поправки $H_{(3)}$ к параметрам перескоков содержат дополнительную малость. Иная ситуация возникает при анализе сверхпроводящей фазы. В случае магнитного механизма спаривания константой связи является обменное взаимодействие. Тот же порядок величины имеют и энергетические параметры в трехцентровых слагаемых. Поэтому вклад $H_{(3)}$ в уравнение самосогласования для сверхпроводящей щели оказывается существенным. Ранее влияние трехцентровых слагаемых на формирование сверхпроводимости изучалось в работах [6,7]. При этом в [7] было показано, что учет трехцентровых слагаемых приводит к перенормировке константы связи. Это вызывает существенное уменьшение области реализации сверхпроводящей фазы с $d_{x^2-y^2}$ типом симметрии параметра порядка [8].

При выходе за рамки приближения ближайших соседей эффективный гамильтониан будет включать обменные взаимодействия между спиновыми моментами квазичастиц, находящихся на расстояниях, больших, чем параметр решетки. Важность учета перескоков квазичастиц между узлами из дальних координационных сфер, а также обменных взаимодействий между неближайшими спинами была продемонстрирована во многих работах при описании особенностей энергетического спектра квазичастиц (см., например, [9,10,11,12,13]. В этом случае теоретические представления удовлетворительно согласовывались с ARPES данными. В частности, отмечалось, что учет фрустрированных связей ($J_2 > 0$) имеет важное значение для описания эволюции спектральной зависимости при допировании [12]. Поскольку, как отмечалось, параметры обменных взаимодействий выступают как константы связи при магнитном механизме сверхпроводящего спаривания, то можно ожидать существенного влияния J_2 и J_3 как на функциональный вид параметра порядка, так и на условия реализации сверхпроводящего состояния.

Ниже в рамках эффективного гамильтониана, следующего из модели Хаббарда в режиме сильных корреляций (расширенная t-J-модель с трехцентровыми взаимодействиями), показывается, что наличие обменных взаимодействий между спиновыми моментами, не являющимися ближайшими соседями, оказывает существенное влияние как на зависимость от квазиимпульса сверхпроводящего параметра порядка, так и на вид уравнения для определения сверхпроводящей щели и критической температуры T_c.

В качестве исходной модели выбирается модель Хаббарда

$$H = \sum_{f\sigma}(\varepsilon - \mu)a^{+}_{f\sigma}a_{f\sigma} + \sum_{fm\sigma} t_{fm}a^{+}_{f\sigma}a_{m\sigma} + U\sum_{f}\hat{n}_{f\uparrow}\hat{n}_{f\downarrow} \qquad (1)$$

и предполагается, что отличны от нуля три параметра перескоков:

$$t_{fm} = -\begin{cases} t_{1,} & \vec{R}_m = \vec{R}_f + \vec{\Delta}_{1,} \\ t_{2,} & \vec{R}_m = \vec{R}_f + \vec{\Delta}_{2,} \\ t_{3,} & \vec{R}_m = \vec{R}_f + \vec{\Delta}_{3,} \end{cases}$$

---

* © В.В.Вальков (vvv@iph.krasn.ru), Д.М.Дзебисашвили, Институт физики им.Л.В.Киренского Сибирского отделения РАН, Красноярск; Красноярский государственный университет, Красноярск; Красноярский государственный технический университет, Красноярск (ddm@iph.krasn.ru), 2003.

где $\vec{\Delta}_i$ - радиус-вектор узлов из i-й координационной сферы.

Хорошо известно, что в режиме сильных электронных корреляций ($U >> \left|t_{fm}\right|$) и узельной концентрации $n < 1$ можно перейти к эффективному гамильтониану, который с квадратичной по $\left|t_{fm}\right|/U$ точностью в представлении операторов Хаббарда имеет следующий вид [7,2,8]:

$$H = \sum_{f\sigma}(\varepsilon-\mu)X_f^{\sigma\sigma} + \sum_{fm\sigma} t_{fm} X_f^{\sigma 0} X_m^{0\sigma} + \sum_{fm\sigma}\left(\frac{t_{fm}t_{mf}}{U}\right)\left(X_f^{\sigma\bar{\sigma}}X_m^{\bar{\sigma}\sigma} - X_f^{\sigma\sigma}X_m^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}\right) +$$

$$+ \sum_{\substack{fmg\sigma \\ (f\neq g)}}\left(\frac{t_{fm}t_{mg}}{U}\right)\left(X_f^{\sigma 0}X_m^{\bar{\sigma}\sigma}X_g^{0\bar{\sigma}} - X_f^{\sigma 0}X_m^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}X_g^{0\sigma}\right). \qquad (2)$$

Обозначения стандартные, расшифровка их содержится в отмеченных статьях и обзоре [2]. Отметим лишь, что последнее слагаемое гамильтониана зависит от трех узлов и описывает коррелированный перескок.

Воспользовавшись диаграммной техникой для операторов Хаббарда [14,15] либо методом неприводимых функций Грина в атомном представлении с введением аномальных средних [16] получим, что уравнение самосогласования для сверхпроводящей щели при учете трехцентровых слагаемых записывается в следующем виде [8]:

$$\Delta_{\vec{k}} = \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}}\left\{2t_{\vec{q}} + \frac{n}{2}\left(J_{\vec{k}+\vec{q}} + J_{\vec{k}-\vec{q}}\right) + 4\left(1-\frac{n}{2}\right)\frac{t_{\vec{k}}t_{\vec{q}}}{U} - n\left(\frac{t_{\vec{q}}^2}{U} - \frac{J_0}{2}\right)\right\}\left(\frac{\Delta_{\vec{q}}}{2E_{\vec{q}}}\right)\tanh\left(\frac{E_{\vec{q}}}{2T}\right). \qquad (3)$$

В этом уравнении $t_{\vec{k}}$ и $J_{\vec{k}}$ обозначают фурье-образы параметров t_{fm} и $2t_{fm}^2/U$. Энергия боголюбовских квазичастиц обозначена посредством $E_{\vec{q}} = \sqrt{\left(\tilde{\varepsilon}_{\vec{q}}-\mu\right)^2 + \left|\Delta_{\vec{q}}\right|^2}$, а перенормированный электронный спектр $\tilde{\varepsilon}_{\vec{k}}$ описывается выражением

$$\tilde{\varepsilon}_{\vec{k}} = \varepsilon + \left(1-\frac{n}{2}\right)t_{\vec{k}} - \frac{n^2J_0}{8} - \frac{n}{2}\left(1-\frac{n}{2}\right)\frac{t_{\vec{k}}^2}{U} - \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}}\left\{t_{\vec{q}} + \frac{n}{2}J_{\vec{k}-\vec{q}} + \left[(2-n)t_{\vec{k}} + (1-n)t_{\vec{q}}\right]\frac{t_{\vec{q}}}{U}\right\}n_{\vec{q}\sigma}, \qquad (4)$$

где для $n_{\vec{q}\sigma}$ имеет место следующая формула:

$$n_{\vec{q}\sigma} = \frac{E_{\vec{q}} - \xi_{\vec{q}}}{2E_{\vec{q}}} + \frac{\xi_{\vec{q}}}{E_{\vec{q}}}\left(\exp\left(E_{\vec{q}}/T\right)+1\right)^{-1}, \quad \xi_{\vec{q}} = \tilde{\varepsilon}_{\vec{q}} - \mu. \qquad (5)$$

Будем искать решения уравнения (3), принимая во внимание наличие перескоков на узлы из дальних координационных сфер. Нетрудно убедиться, что связанное с дальними перескоками изменение ядра интегрального уравнения (3) налагает запрет на обычное решение $\Delta_{\vec{k}} = \Delta_0\left[\cos\left(k_x a\right) - \cos\left(k_y a\right)\right]$. Если же решение уравнения на параметр порядка искать в виде

$$\Delta_{\vec{k}} = \Delta_0\left[\cos\left(k_x a\right) - \cos\left(k_y a\right)\right] + \Delta_1\left[\cos\left(2k_x a\right) - \cos\left(2k_y a\right)\right] \qquad (6)$$

то интегральное уравнение удовлетворяется, если потребовать, чтобы коэффициенты Δ_0 и Δ_1 находились из решения системы уравнений

$$\Delta_0 = \left(\frac{t_1^2}{U}\right)n\Delta_0\Phi_0 + \left(\frac{t_1^2}{U}\right)n\Delta_1\Phi_1,$$

$$\Delta_1 = \left(\frac{t_3^2}{U}\right)n\Delta_0\Phi_1 + \left(\frac{t_3^2}{U}\right)n\Delta_1\Phi_2, \qquad (7)$$

где

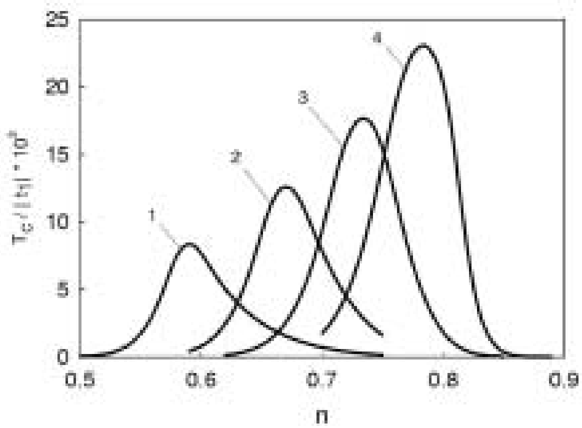

Рис. 1. Влияние перескоков в третью координационную сферу на концентрационную зависимость T_c при различных $\alpha_3=t_3/t_1$: 1) $\alpha_3=0$; 2) $\alpha_3=-0{,}1$; 3) $\alpha_3=-0{,}2$; 4) $\alpha_3=-0{,}3$. Параметры модели: $t_2/t_1=-0{,}2$, $|t_1|/U=0{,}2$

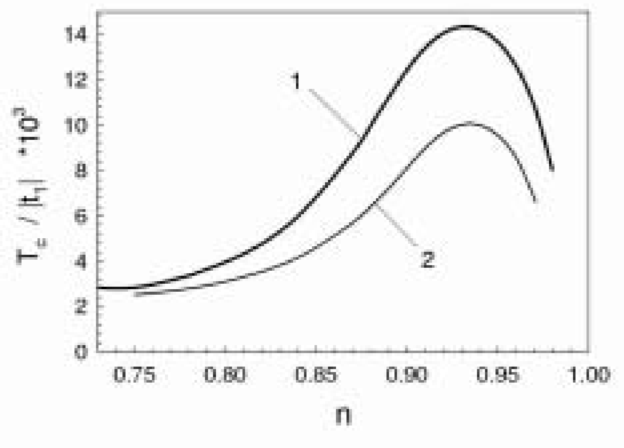

Рис. 2. Концентрационная зависимость T_c (n): t_2/t_1=0,4, t_2/t_1=0,3, $|t_1|$ /U=0,2

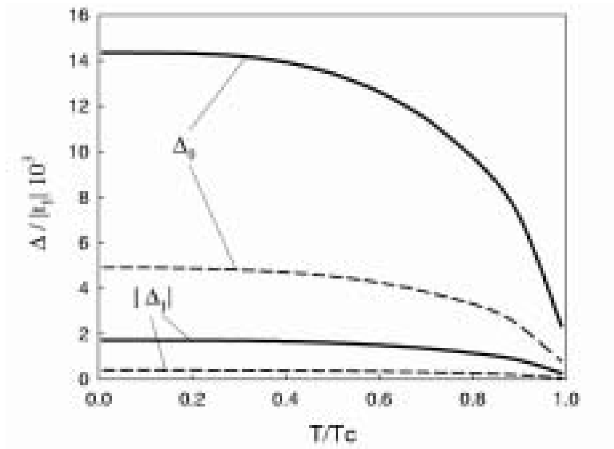

Рис.3. Температурная зависимость параметров Δ_0 и $|\Delta_1|$: n = 0,93 - сплошная линия; n = 0,84 - пунктирная линия. Параметры модели те же, что и на рис. 2

$$
\begin{aligned}
\Phi_0 &= \frac{1}{N}\sum_{\vec q}\frac{\left(\cos(q_x a)-\cos(q_y a)\right)^2}{E_{\vec q}}\tanh\left(\frac{E_{\vec q}}{2T}\right),\\
\Phi_1 &= \frac{1}{N}\sum_{\vec q}\frac{\left(\cos(q_x a)-\cos(q_y a)\right)\left(\cos(2q_x a)-\cos(2q_y a)\right)}{E_{\vec q}}\tanh\left(\frac{E_{\vec q}}{2T}\right),\\
\Phi_2 &= \frac{1}{N}\sum_{\vec q}\frac{\left(\cos(2q_x a)-\cos(2q_y a)\right)^2}{E_{\vec q}}\tanh\left(\frac{E_{\vec q}}{2T}\right).
\end{aligned}
\tag{8}
$$

Из (7) следует, что при $t_3 \neq 0$ Δ_1 всегда отлично от нуля. Условие совместности этой системы приводит к уравнению

$$
\left(1-\frac{nt_1^2}{U}\Phi_0\right)\left(1-\frac{nt_3^2}{U}\Phi_2\right)=\left(\frac{nt_1t_3}{U}\Phi_1\right)^2 ,
$$

которое удобно использовать при нахождении критической температуры. В частности, только при $t_3 = 0$ это уравнение сводится к известному уравнению для T_c t-J-модели.

На рис. 1 показано изменение концентрационной зависимости температуры перехода в сверхпроводящую фазу при включении параметра t_3. Видно, что перескок электронов на узлы из третьей координационной сферы существенно влияет на положение максимума кривой $T_c(n)$. Примечательно, что сравнительно легко достигается та экспериментально наблюдаемая ситуация, когда максимум T_c приходится на $n \approx 0,8$. Кривые 1 и 2 рис. 2 демонстрируют влияние дополнительных членов (обусловленных наличием обменного взаимодействия между спиновыми моментами, находящихся на расстояниях, которые определяются векторами $\vec{\Delta}_3$) уравнения (9) на значение критической температуры. Если первая кривая построена на основе решения полного уравнения (9), то зависимость, отраженная второй кривой, соответствует ситуации, когда $t_3 \neq 0$, а $J_3 = 2t_3^2/U = 0$. Видно, что учет перескоков на узлы третьей координационной сферы влияет на критическую температуру как через кинетическую часть, так и посредством косвенного обменного взаимодействия.

В сверхпроводящей фазе ($T < T_c$) параметры Δ_0 и Δ_1 отличны от нуля и изменяются синхронно при изменении температуры. Пример такого поведения продемонстрирован на рис. 3. Видно, что во всей температурной области, где реализуется сверхпроводящее решение, $|\Delta_1|$ ($\Delta_1 < 0$) повторяет температурное поведение параметра Δ_0.

В заключение отметим, что в настоящей работе влияние дальних перескоков как на условия реализации сверхпроводящего состояния, так и на импульсную зависимость параметра порядка продемонстрировано на примере эффективного гамильтониана, полученного из модели Хаббарда в режиме сильных электронных корреляций. В этом случае устанавливается сильная корреляция между значением t_3 и обменным параметром J_3. В принципе в настоящее время часто рассматривают ситуацию, когда параметры перескоков и обменные константы считаются независимыми. В этом случае принципиально может реализоваться ситуация, когда изменение обменного взаимодействия для неближайших соседей не обязательно связано с изменением амплитуды перескоков. Второе замечание, связанное с учетом дальних обменных взаимодействий, обусловлено возможностью реализации р-типа симметрии параметра порядка, как только J_2 отлично от нуля. Нетрудно убедиться, что в данном случае J_2 может индуцировать сверхпроводимость с триплетным спариванием. Однако рассмотрение этого вопроса выходит за рамки данной работы и будет изложено отдельно.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ+ККФН "Енисей" (грант № 02-02-97705), а также комплексной программы научных исследований РАН "Квантовая макрофизика". Один из авторов (Д.М.Дзебисашвили) признателен Благотворительному Фонду содействия отечественной науке и СО РАН (Лаврентьевский конкурс молодежных проектов СО РАН) за финансовую поддержку исследований.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Anderson P.W., Science, **235**, 1196 (1987).
2. Изюмов Ю.А., УФН, **167**, 465 (1997).
3. Булаевский Л.П., Нагаев Э.Л., Хомский Д.Л. ЖЭТФ, **54**, с.1562 (1968).
4. Chao K.A., Spalek J., Oles A.M. J.Phys.C **10**, p. L271 (1977).
5. Yushankhay V.Yu., Oudovehko V.S., Hayn R. Phys.Rev., **B55**, 15562 (1997).
6. Hirsch J.E. Phys.Lett A **136**, 163 (1989).
7. Yushankhay V.Yu., Vujicic G.M. and Zakula R.B. Phys.Lett A **151**, 254 (1990).
8. Вальков В.В.,.Валькова Т.А, Дзебисашвили Д.М., Овчинников С.Г. Письма в ЖЭТФ, **75**, 450 (2002).
9. Nazarenkoet A. al. Phys.Rev. **B51**, 8676 (1995).
10. Sushkov O.P. et al. Phys.Rev. **B56**, 11769 (1997).
11. Барабанов А.Ф. и др. Письма в ЖЭТФ, **68**, в.5, 386-391 (1998).
12. Hayn R. et al. Phys.Rev. **B53**, 11714 (1996).
13. Tohyama T., Maekawa S. Supercond. Sci. Technol. **13**, R17-R32 (2000).
14. Зайцев Р.О. ЖЭТФ, **70**, 1100 (1976)
15. Зайцев Р.О., Иванов В.А. Письма в ЖЭТФ, **46**, 140 (1987).
16. Plakida N.M., Yushankhay V.Yu., Stasyuk I.V. Physica C **162-164**, 787 (1989).

MODIFICATION OF THE SUPERCONDUCTING ORDER PARAMETER $\Delta_{\vec{k}}$ BY LONG-RANGE INTERACTIONS

V.V.Val'kov, D.M.Dzebisashvili

It is shown that long-range intersite interactions qualitatively change the quasi momentum dependence of the superconducting gap. When hoppings and exchange interactions within of three coordinate spheres are taken into account, the integral equation for d-type symmetry $\Delta_{\vec{k}}$ *is satisfied only when* $\Delta_{\vec{k}} = \Delta_0\left[\cos k_x - \cos k_y\right] + \Delta_1\left[\cos 2k_x - \cos 2k_y\right]$ *with* $\Delta_1 \neq 0$*, and the superconducting phase is described by the system of two self consistent equations. At the same time the situation, when theoretical doping dependence of the critical temperature is in agreement with the experimental one, is realized.*