ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ ВЕЩЕСТВА

УДК 537.312.62

КОНЦЕНТРАЦИОННАЯ ЗАВИСИМОСТЬ КРИТИЧЕСКОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ БИСЛОЙНЫХ ВТСП[1]

В.В.Вальков, А.С.Кравцов*

В рамках t-J модели методом неприводимых функций Грина исследована концентрационная зависимость $T_c(n)$ критической температуры бислойных ВТСП. Рассмотрен случай d-симметрии параметра порядка. Показано, что концентрационная зависимость имеет два максимума, обусловленных удвоением особенности Ван Хова в плотности состояний.

При описании сверхпроводимости в высокотемпературных сверхпроводниках (ВТСП) одной из базовых теоретических моделей является так называемая t-J модель [1], в рамках которой описываются многие важные особенности поведения ВТСП. Поскольку практически все ВТСП имеют ярко выраженную слоистую структуру, их сверхпроводящие свойства должны отражать признаки квазидвумерности. Так, например, оказывается, что критическая температура T_c зависит от числа слоев на элементарную ячейку [2]. Этот эффект в последнее время привлекает все большее внимание и, в частности, исследован в работах [3], [4] и [5] с позиций модели Хаббарда. В данной работе проведен учет межслойных взаимодействий в рамках t-J модели.

Рассмотрим систему из двух плоскостей, каждая из которых представляет собой простую квадратную решетку. В рамках t-J модели гамильтониан может быть записан в виде

$$H = -\mu \sum_{f\sigma} X_f^{\sigma\sigma} + \sum_{fm\sigma} t_{fm} X_f^{\sigma 0} X_m^{0\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{fm\sigma} J_{fm} \left(X_f^{\sigma\bar{\sigma}} X_m^{\bar{\sigma}\sigma} - X_f^{\sigma\sigma} X_m^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} \right), \tag{1}$$

где t_{fm} и J_{fm} - матричные элементы интеграла перескока и обменного интеграла соответственно; μ — химпотенциал системы. Здесь индексы узлов пробегают по всем значениям в пределах двух рассматриваемых плоскостей. При этом в случае, когда индексы относятся к разным плоскостям, соответствующий матричный элемент описывает либо интеграл межплоскостного перескока, либо межплоскостную константу обменной связи.

Для исследования свойств рассматриваемой системы удобным формализмом являются антикоммутаторные двухвременные температурные функции Грина [6]:

$$\langle\langle A(t) \,|B(t')\rangle\rangle = -i\theta(t-t') \langle \{A(t), B(t')\} \rangle . \tag{2}$$

Фурье-образ функции Грина (2) удовлетворяет уравнению

$$\omega \langle\langle A|B \rangle\rangle_\omega = \langle \{A, B\} \rangle + \langle\langle [A, H] \,|B \rangle\rangle_\omega \tag{3}$$

и связан с соответствующей корреляционной функцией спектральной теоремой

$$\langle B(t') A(t) \rangle = -\frac{1}{2\pi i} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \frac{\left[\langle\langle A|B \rangle\rangle_{\omega+i\delta} - \langle\langle A|B \rangle\rangle_{\omega-i\delta} \right]}{e^{\beta\omega}+1} e^{-i\omega(t-t')} d\omega. \tag{4}$$

Для решения задачи нам потребуются функции Грина, в которых в качестве оператора $A(t)$ и $B(t')$ используются операторы $X_f^{0\sigma}(t)$ и $X_m^{\sigma 0}(t')$ соответственно. Тогда уравнение (3) имеет вид

$$\begin{aligned} \omega \left\langle\left\langle X_f^{0\sigma} | X_g^{\sigma 0} \right\rangle\right\rangle_\omega &= \left\langle \left\{ X_f^{0\sigma}, X_g^{\sigma 0} \right\} \right\rangle - \mu \left\langle\left\langle X_f^{0\sigma} | X_g^{\sigma 0} \right\rangle\right\rangle_\omega + \\ &+ \sum_m t_{fm} \left\langle\left\langle X_m^{0\sigma} | X_g^{\sigma 0} \right\rangle\right\rangle_\omega + \left\langle\left\langle L_f | X_g^{\sigma 0} \right\rangle\right\rangle_\omega ; \end{aligned} \tag{5}$$

[1]Работа выполнена при финансовой поддержке Программы II.3. Отделения физических наук, РФФИ (грант є 03-02-16124), РФФИ+ККФН "Енисей"(грант є 02-02-97705), а также Лаврентьевского конкурса молодежных проектов СО РАН.

* © В.В.Вальков, Институт физики СО РАН, vvv@iph.krasn.ru; А.С.Кравцов, Красноярский государственный университет, Красноярский государственный технический университет, ask@iph.krasn.ru, 2004.

$$L_f = \sum_m t_{fm} \left(X_f^{\bar{\sigma}\sigma} X_m^{0\bar{\sigma}} - X_f^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} X_m^{0\sigma} \right) + \sum_m J_{fm} \left(X_m^{\bar{\sigma}\sigma} X_f^{0\bar{\sigma}} - X_m^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} X_f^{0\sigma} \right). \tag{6}$$

Линеаризация уравнения (5) в рамках метода неприводимых функций Грина выполняется по схеме

$$\tilde{L}_f = \sum_n \frac{\left\langle \left\{ L_f, X_n^{\sigma 0} \right\} \right\rangle}{\left\langle \left\{ X_n^{\sigma 0}, X_n^{0\sigma} \right\} \right\rangle} X_n^{0\sigma} + \sum_n \frac{\left\langle \left\{ L_f, X_n^{0\bar{\sigma}} \right\} \right\rangle}{\left\langle \left\{ X_n^{0\bar{\sigma}}, X_n^{\bar{\sigma}0} \right\} \right\rangle} X_n^{\bar{\sigma}0}. \tag{7}$$

Отметим, что при этом выделяются как нормальные, так и аномальные функции Грина. Принимая во внимание наличие только двух плоскостей, запишем уравнение (5) с учетом схемы линеаризации (7) в форме, явно отражающей двухплоскостную структуру рассматриваемой системы. В дальнейшем будем обозначать операторы Хаббарда первого слоя как и прежде, а второго — посредством символа Z. Переход от узельного представления к импульсному с помощью преобразования Фурье, в приближении "Хаббард I"[7], дает

$$\omega \left\langle \left\langle X_{k\sigma} | X_{k\sigma}^+ \right\rangle \right\rangle_\omega = \left(1 - \frac{n}{2} \right) + \xi_k \left\langle \left\langle X_{k\sigma} | X_{k\sigma}^+ \right\rangle \right\rangle_\omega + \Delta_k \left\langle \left\langle X_{-k\bar{\sigma}}^+ | X_{k\sigma}^+ \right\rangle \right\rangle_\omega + \\ + \xi^\perp \left\langle \left\langle Z_{k\sigma} | X_{k\sigma}^+ \right\rangle \right\rangle_\omega + \Delta^\perp \left\langle \left\langle Z_{-k\bar{\sigma}}^+ | X_{k\sigma}^+ \right\rangle \right\rangle_\omega , \tag{8}$$

где $\xi_k = \left(1 - \frac{n}{2}\right) t_k - \tilde{\mu}$, $\xi^\perp = \left(1 - \frac{n}{2}\right) t^\perp$, $t_k = 2t \left(\cos\left(k_x\right) + \cos\left(k_y\right)\right)$;

$$\Delta_k = \left(1 - \frac{n}{2} \right)^{-1} \left[\frac{1}{N} \sum_p \left(2t_p + J_{k+p} + J_{k-p} \right) \left\langle X_{p\sigma} X_{-p\bar{\sigma}} \right\rangle + 2t^\perp \left\langle Z_f^{0\sigma} X_f^{0\bar{\sigma}} \right\rangle \right];$$

$$\Delta^\perp = \left(1 - \frac{n}{2} \right)^{-1} 2J^\perp \left\langle Z_f^{0\sigma} X_f^{0\bar{\sigma}} \right\rangle .$$

Решение соответствующей системы уравнений на функции Грина имеет следующий вид:

$$\left\langle \left\langle X_{k\sigma} | X_{k\sigma}^+ \right\rangle \right\rangle_E = \frac{1}{2} \left(G_E^+ + G_E^- \right); \tag{9}$$

$$\left\langle \left\langle X_{-k\bar{\sigma}}^+ | X_{k\sigma}^+ \right\rangle \right\rangle_E = \frac{1}{2} \left(F_E^+ + F_E^- \right); \tag{10}$$

$$\left\langle \left\langle Z_{k\sigma} | X_{k\sigma}^+ \right\rangle \right\rangle_E = \frac{1}{2} \left(G_E^+ - G_E^- \right); \tag{11}$$

$$\left\langle \left\langle Z_{-k\bar{\sigma}}^+ | X_{k\sigma}^+ \right\rangle \right\rangle_E = \frac{1}{2} \left(F_E^+ - F_E^- \right); \tag{12}$$

$$G_E^\pm = \left(1 - \frac{n}{2} \right) \frac{E + \xi_k^\pm}{E^2 - \left(E_k^\pm \right)^2}; \tag{13}$$

$$F_E^\pm = \left(1 - \frac{n}{2} \right) \frac{\left(\Delta_k^\pm \right)^*}{E^2 - \left(E_k^\pm \right)^2}, \tag{14}$$

где $\left(E_k^\pm\right)^2 = \left(\xi_k^\pm\right)^2 + \left|\Delta_k^\pm\right|^2$; $\xi_k^\pm = \xi_k \pm \xi^\perp$; $\Delta_k^\pm = \Delta_k \pm \Delta^\perp$. По спектральной теореме (4) находим средние:

$$\left\langle X_{k\sigma}^+ X_{k\sigma} \right\rangle = n_{k\sigma} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{n}{2} \right) \left[1 - \frac{\xi_k^+}{2E_k^+} th \left(\frac{E_k^+}{2T} \right) - \frac{\xi_k^-}{2E_k^-} th \left(\frac{E_k^-}{2T} \right) \right]; \tag{15}$$

$$\left\langle X_{k\sigma}^+ Z_{k\sigma} \right\rangle = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{n}{2} \right) \left[- \frac{\xi_k^+}{2E_k^+} th \left(\frac{E_k^+}{2T} \right) + \frac{\xi_k^-}{2E_k^-} th \left(\frac{E_k^-}{2T} \right) \right]; \tag{16}$$

$$\left\langle X_{k\sigma}^+ X_{-k\bar{\sigma}}^+ \right\rangle = \left(1 - \frac{n}{2} \right) \left[\frac{\Delta_k^+}{4E_k^+} th \left(\frac{E_k^+}{2T} \right) + \frac{\Delta_k^-}{4E_k^-} th \left(\frac{E_k^-}{2T} \right) \right]; \tag{17}$$

$$\left\langle X_{k\sigma}^+ Z_{-k\bar{\sigma}}^+ \right\rangle = \left(1 - \frac{n}{2} \right) \left[\frac{\Delta_k^+}{4E_k^+} th \left(\frac{E_k^+}{2T} \right) - \frac{\Delta_k^-}{4E_k^-} th \left(\frac{E_k^-}{2T} \right) \right]. \tag{18}$$

Учитывая, что $\left\langle X_f^{0\sigma} Z_f^{0\bar{\sigma}} \right\rangle = \frac{1}{N} \sum\limits_k \left\langle X_{k\sigma} Z_{-k\bar{\sigma}} \right\rangle$, находим уравнения самосогласования:

$$n=\frac{1}{N}\sum_{p\sigma}n_{p\sigma}=\left(1-\frac{n}{2}\right)\frac{1}{N}\sum_{p}\left[1-\frac{\xi_p^+}{2E_p^+}th\left(\frac{E_p^+}{2T}\right)-\frac{\xi_p^-}{2E_p^-}th\left(\frac{E_p^-}{2T}\right)\right];\qquad(19)$$

$$\Delta_k=\frac{1}{N}\sum_p\left[2t_p\left(\frac{\Delta_p^+}{4E_p^+}th\left(\frac{E_p^+}{2T}\right)+\frac{\Delta_p^-}{4E_p^-}th\left(\frac{E_p^-}{2T}\right)\right)+2t^\perp\left(\frac{\Delta_p^+}{4E_p^+}th\left(\frac{E_p^+}{2T}\right)-\frac{\Delta_p^-}{4E_p^-}th\left(\frac{E_p^-}{2T}\right)\right)\right]+$$
$$+\frac{1}{N}\sum_p\left[\left(J_{k+p}+J_{k-p}\right)\left(\frac{\Delta_p^+}{4E_p^+}th\left(\frac{E_p^+}{2T}\right)+\frac{\Delta_p^-}{4E_p^-}th\left(\frac{E_p^-}{2T}\right)\right)\right];\qquad(20)$$

$$\Delta^\perp=\frac{1}{N}\sum_p 2J^\perp\left[\frac{\Delta_p^+}{4E_p^+}th\left(\frac{E_p^+}{2T}\right)-\frac{\Delta_p^-}{4E_p^-}th\left(\frac{E_p^-}{2T}\right)\right].\qquad(21)$$

В общем случае уравнения самосогласования (20)-(21) представляют собой сложную систему нелинейных интегральных уравнений. В случае простой квадратной решетки эта система легко факторизуется. Дополнительное упрощение можно получить, рассматривая температуры, близкие к T_c. В этом случае допустима замена $E_k^\pm\to\xi_k^\pm$, и мы приходим к системе линейных однородных уравнений на коэффициенты разложения параметра порядка. Для интересующего нас случая d-симметрии параметра порядка

$$\Delta_k=\Delta_0\left[\cos\left(k_x\right)-\cos\left(k_y\right)\right],\ \Delta^\perp=0,$$

и уравнение самосогласования приводится к виду

$$\frac{1}{J}=\frac{1}{N}\sum_p\frac{1}{2}\left[\cos\left(p_x\right)-\cos\left(p_y\right)\right]^2\left[\frac{1}{E_p^+}th\left(\frac{E_p^+}{2T}\right)+\frac{1}{E_p^-}th\left(\frac{E_p^-}{2T}\right)\right].\qquad(22)$$

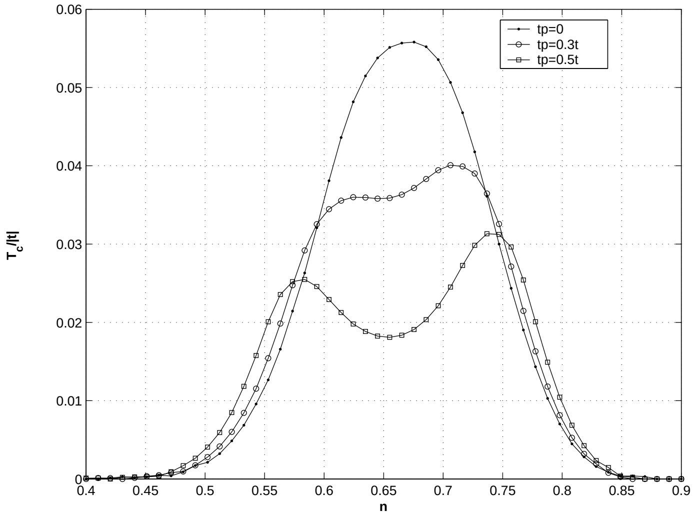

Рис. 1: Концентрационная зависимость $T_c(n)$ для нескольких значений $t^\perp$ при $J=0.25t$

При $T\to T_c$ имеем

$$\frac{1}{J}=\frac{1}{N}\sum_p\frac{1}{2}\left[\cos\left(p_x\right)-\cos\left(p_y\right)\right]^2\left[\frac{1}{\xi_p^+}th\left(\frac{\xi_p^+}{2T_c}\right)+\frac{1}{\xi_p^-}th\left(\frac{\xi_p^-}{2T_c}\right)\right],\qquad(23)$$

$$n=\left(1-\frac{n}{2}\right)\frac{1}{N}\sum_p\frac{1}{2}\left[2-sign\left(\xi_p^+\right)th\left(\frac{\xi_p^+}{2T_c}\right)-sign\left(\xi_p^-\right)th\left(\frac{\xi_p^-}{2T_c}\right)\right].\qquad(24)$$

Результаты численных вычислений представлены на рис. 1, где приведены значения критической температуры для различных концентраций (в расчете на один узел) электронов проводимости.

Видно, что характерная "парабола"концентрационной зависимости T_c для однослойной системы в двухслойном случае расщепляется на два пика. Такое поведение связано с тем, что в случае биплоскостной системы, в плотности состояний возникают две особенности Ван Хова (см. рис. 2). Поэтому при увеличении концентрации n уровень химпотенциала дважды проходит через экстремумы в плотности состояний, что и приводит к наличию двух экстремумов в зависимости $T_c(n)$.

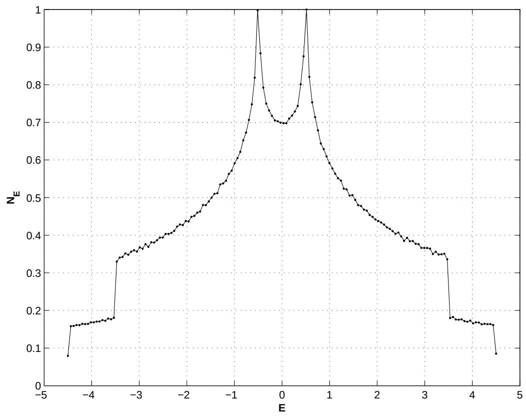

Рис. 2: Плотность состояний в нормальной фазе при $t^{\perp} = 0.5t$

Список литературы

[1] Изюмов Ю.А. *Сильно коррелированные электроны: t-J модель* /Ю.А.Изюмов// УФН – 1997. – Т. 167 – С. 465-497.

[2] Kulic M. *Interplay of electron-phonon interaction and strong correlations: the possible way to high-temperature superconductivity* / M.Kulic // Phys. Rep. – 2000. – V. 338. – P. 1-264.

[3] Tripathi R.S. *Role of interlayer interactions on transition temperature in high-Tc cuprate superconductors* / R.S.Tripathi // Physica C – 1997. – V. 274. – P. 73-80.

[4] Tripathi R.S. *Thermodynamic properties of bilayer cuprate superconductors* / R.S.Tripathi, A.Pratar // Physica C – 1999. – V. 323. – P. 42-50.

[5] Tripathi R.S. *Superconducting properties of bilayer cuprates: role of CuO chains* / R.S.Tripathi // Physica C – 2000. – V. 334. – P. 215-228.

[6] Тябликов С.В. *Методы квантовой теории магнетизма* /С.В.Тябликов. – М.: Наука, 1965.

[7] Hubbard J. *Electron correlations in narrow energy bands* / J.Hubbard // Proc. Roy. Soc. – 1963. – V. A276. – P. 238.

CONCENTRATION DEPENDENCE OF CRITICAL TEMPERATURE IN BILAYER HTSC

V.V.Valkov, A.S.Kravtsov

In the frame of t-J-model, using irreducible Green's functions method, concentration dependence of critical temperature $T_c(n)$ of bilayered HTSC is investigated. The case of d-type order parameter symmetry is considered. It is shown that the concentration dependence has two maxima, resulting from doubling of the Van Hove singularity in density of states.