

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ ВЕЩЕСТВА

УДК 539.74; 53.011

ВЛИЯНИЕ МАГНИТНЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ И ТРЕХЦЕНТРОВЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ НА СВЕРХПРОВОДЯЩЕЕ СОСТОЯНИЕ С $d_{x^2-y^2}$ -СИММЕТРИЕЙ ПАРАМЕТРА ПОРЯДКА¹

В.В.Вальков, Д.М.Дзедзисашвили*

Рассмотрено влияние трехцентровых взаимодействий и магнитных корреляций на концентрационную зависимость температуры перехода T_c в сверхпроводящую фазу с $d_{x^2-y^2}$ -типом симметрии параметра порядка. Показано, что трехцентровые взаимодействия $t - J^$ -модели приводят к двум характерным эффектам. Первый эффект проявляется в перенормировке константы связи и значительном уменьшении T_c . Вторым эффектом обусловливает качественное изменение зависимости $T_c(n)$ посредством появления дополнительного максимума в области малого допирования. Показано, что новый максимум индуцируется только при одновременном учете как трехцентровых взаимодействий, так и ренормировок электронного энергетического спектра магнитными корреляциями. Для нахождения сферически инвариантных магнитных корреляторов предложено развитие теории спиновой жидкости, позволившее выйти за рамки известных приближений.*

Принято считать [1, 2, 3, 4, 5], что сильные электронные корреляции (СЭК) играют существенную роль в механизме высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП). Одной из центральных моделей, отражающей СЭК, является модель Хаббарда [6], содержащая в простейшем случае два энергетических параметра: интеграл электронного перескока t между ближайшими узлами и энергию кулоновского отталкивания U двух электронов, находящихся на одном узле и обладающих противоположными проекциями спиновых моментов. В зависимости от соотношения между t и U реализуются различные сценарии электронного строения модели Хаббарда.

В режиме СЭК выполняется неравенство $U \gg |t|$. В этом случае имеет место мотт-хаббардовское расщепление затравочной электронной зоны, так что в каждой из полученных подзон в расчете на один узел может разместиться только один электрон. Дальнейшая сепарация типов основного состояния модели Хаббарда при $U \gg |t|$ связана с концентрацией электронов n .

В случае малых электронных концентраций $n \ll 1$ система не проявляет тенденции к каким-либо структурным или магнитным переходам [7] и ее поведение хорошо описывается теорией ферми-жидкости. В другом предельном случае $n \rightarrow 1$ реализуется состояние, соответствующее гамилтониану гейзенберговского антиферромагнетика (АФМ). Если же $n < 1$, то проблема основного состояния к настоящему времени поддается только приближенному описанию. При $U \gg t$ и $n < 1$ часто переходят к описанию модели Хаббарда в усеченном гильбертовом пространстве, не содержащем состояний с двумя электронами на одном узле (двойки). Обоснование такой редукции заключается в том, что при большой величине энергии кулоновского отталкивания статистический вес состояний, содержащих два электрона на одном узле, становится малым. При $n < 1$ все электроны мысленно можно распределить так, что будут присутствовать только одноузельные состояния, не содержащие двоек.

В действительности же при большом, но конечном отношении $|U/t|$ и $n < 1$ в системе всегда имеется конечное число двоек. В расчете на один узел концентрация двоек $n_2 \sim (t/U)^2$. Переход к описанию в усеченном гильбертовом пространстве, как известно, достигается посредством построения эффективного гамильтониана H_{eff} , содержащего только такие операторные структуры, по отношению к которым подпространство без двоек является инвариантным. В таком случае естествен вопрос: что же стало с двоичными состояниями? Ответ заключается в том, что процессы, связанные с реальным наличием двоек, при переходе к описанию в усеченном гильбертовом

¹ Авторы использовали поддержку грантов РФФИ (грант № 00-02-16110), РФФИ+ ККФН "Енисей" (грант № 02-02-97705), INTAS (грант № 01-0654), а также комплексной программы научных исследований РАН "Квантовая макрофизика". Второй автор признателен Благотворительному Фонду содействия отечественной науке и Сибирскому отделению РАН (Лаврентьевский конкурс молодежных проектов) за финансовую поддержку исследований.

* © В.В.Вальков, Д.М.Дзедзисашвили, Институт физики СО РАН; Красноярский государственный университет, 2005.

пространстве отражаются посредством появления в H_{eff} дополнительных эффективных взаимодействий. Ниже этот вопрос, вскрывающий физическое содержание новых взаимодействий в H_{eff} , обсужден математически строго.

Эффективный гамильтониан, как известно [8, 9], содержит антиферромагнитное взаимодействие между спиновыми моментами носителей тока, ответственное за наличие антиферромагнитных флуктуаций, а также трехцентровые взаимодействия, описывающие коррелированные перескоки.

К настоящему времени в литературе отражены результаты исследований раздельного влияния магнитных флуктуаций [3, 4, 14, 15, 16, 17] и трехцентровых взаимодействий [11, 12, 13] на условия реализации сверхпроводящей фазы с $d_{x^2-y^2}$ -симметрией параметра порядка. В то же время отсутствуют работы, в которых рассматривалось бы их совместное воздействие. Между тем уже простые расчеты показывают, что трехцентровые взаимодействия существенно влияют на энергию связи спин-синглетных состояний. В данной работе будет показано, что магнитные флуктуации в условиях включенных трехцентровых взаимодействий могут приводить к новым не только количественным, но и качественным эффектам.

Оператор числа двоек и эффективные взаимодействия

Переход к эффективному гамильтониану при $U \gg t$ и $n < 1$ может быть реализован либо на основе канонического преобразования [4], либо при использовании операторной формы теории возмущений [18]. С квадратичной по (t/U) точностью получение H_{eff} в атомном представлении по второму методу подробно описано в [13]. При этом эффективный гамильтониан H_{eff} (в дальнейшем H_{t-J}) представляет собой сумму [4, 13]

$$H_{eff} \equiv H_{t-J} = H_{t-J} + H_{(3)}, \tag{1}$$

где оператор

$$H_{t-J} = \sum_{f\sigma} (\epsilon - \mu) X_f^{\sigma\sigma} + \sum_{fm\sigma} t_{fm} X_f^{\sigma 0} X_m^{0\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{fm\sigma} J_{fm} (X_f^{\sigma\bar{\sigma}} X_m^{\bar{\sigma}\sigma} - X_f^{\sigma\sigma} X_m^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}) \tag{2}$$

является гамильтонианом $t-J$ -модели [19], записанным в атомном представлении ($J_{fm} = 2t_{fm}^2/U$), а трехцентровый оператор

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

соответствует учету эффектов коррелированных перескоков электронов как с изменением проекции спинового момента, так и без такого изменения.

Видно, что эффективный гамильтониан, действуя в подпространстве без двоек, формально не включает никаких процессов с участием двоичных состояний. Однако в действительности такие процессы, конечно, происходят и в эффективном гамильтониане они отражаются посредством появления новых операторных структур. Остановимся на этом вопросе подробнее и выясним физическую причину возникновения взаимодействий $\sim J_{fm}$ и $H_{(3)}$. С этой целью рассмотрим оператор $\hat{N}_2 = \sum_f X_f^{22}$, среднее значение которого определяет полное число двоек. В основном состоянии $|\Psi_0\rangle$ модели Хаббарда с гамильтонианом H это число определяется, как известно, средним $N_2 = \langle \hat{N}_2 \rangle = \langle \Psi_0 | \hat{N}_2 | \Psi_0 \rangle$. При проведении канонического преобразования $H \rightarrow H_{eff} = \exp(iS) H \exp(-iS)$ функция основного состояния преобразуется по закону $|\Psi_0\rangle \rightarrow |\Phi_0\rangle = \exp(iS) |\Psi_0\rangle$. Это означает, что в новом представлении число двоек вычисляется по формуле $N_2 = \langle \Phi_0 | \exp(iS) \hat{N}_2 \exp(-iS) | \Phi_0 \rangle$. Отсюда следует, что при описании модели Хаббарда в гильбертовом подпространстве без двоек в качестве оператора, отражающего наличие двоек в физической системе, выступает преобразованный оператор $\hat{N}_2 = \exp(iS) \hat{N}_2 \exp(-iS)$. Это выражение применимо и в статистике. Для этого достаточно заметить, что состояния $|\Phi_n\rangle = \exp(-iS) |\Psi_n\rangle$ удовлетворяют уравнению Шредингера с гамильтонианом H_{eff} как только состояния $|\Psi_n\rangle$ являются собственными состояниями оператора H . Поэтому термодинамическое среднее

$$\langle N_2 \rangle = \frac{Sp \{ \hat{N}_2 \exp(-\beta H) \}}{Sp \{ \exp(-\beta H) \}} = \frac{Sp \{ \hat{N}_2 \exp(-\beta H_{eff}) \}}{Sp \{ \exp(-\beta H_{eff}) \}}, \quad \beta = 1/T, \tag{4}$$

может быть вычислено с помощью матрицы плотности для эффективного гамильтониана, если в качестве преобразованного оператора двоек берется оператор $\tilde{N}_2$.

Нетрудно убедиться, что с квадратичной по (t/U) точностью

$$\begin{aligned} \tilde{N}_2 &= P(VP - V)(H_0 - E_0)^{-1} \hat{N}_2 (H_0 - E_0)^{-1} (PV - V)P = \\ &= - \sum_{fmg\sigma} \left(\frac{t_{fm} t_{mg}}{U^2} \right) \{ X_f^{\sigma 0} X_m^{\bar{\sigma} \sigma} X_g^{0 \bar{\sigma}} - X_f^{\sigma 0} X_m^{\bar{\sigma} \bar{\sigma}} X_g^{0 \sigma} \}. \end{aligned} \quad (5)$$

Отметим, что оператор двоек может быть записан следующим образом: $\tilde{N}_2 = -(H_{exch} + H_{(3)})/U$, где обменная часть $t - J$ -модели определяется известным выражением

$$H_{exch} = \frac{1}{2} \sum_{fm\sigma} J_{fm} \{ X_f^{\sigma \bar{\sigma}} X_m^{\bar{\sigma} \sigma} - X_f^{\sigma \sigma} X_m^{\bar{\sigma} \bar{\sigma}} \}, \quad (6)$$

а $H_{(3)}$ определяется (3). При этом гамильтониан $t - J^*$ -модели представим в виде

$$H_{t-J^*} = \sum_{f\sigma} (\epsilon - \mu) X_f^{\sigma \sigma} + \sum_{fm\sigma} t_{fm} X_f^{\sigma 0} X_m^{0 \sigma} - U \tilde{N}_2, \quad (7)$$

означающей, что возникновение обменных и трехузельных взаимодействий обусловлено фактическим наличием конечного числа двоек в системе. Таким образом, появление в гамильтониане H_{t-J^*} слагаемых H_{exch} и $H_{(3)}$ имеет одинаковую причину. В количественном отношении, как уже отмечалось, вклады этих слагаемых в физические характеристики могут варьироваться.

Уравнения самосогласования

Исследование вклада магнитных корреляций в ренормировки спектральных характеристик фермиевских квазичастиц, а также их влияния на условия реализации $d_{x^2-y^2}$ - сверхпроводимости проведем в рамках $t - J^*$ -модели. Для реализации этой программы можно воспользоваться методом диаграммной техники для операторов Хаббарда [21] либо методом неприводимых двухвременных температурных функций Грина. При изучении высокотемпературной сверхпроводимости эта идеология использовалась в работах [22, 23], где вводились антикоммутирующие функции Грина фермиевского типа, построенные на операторах Хаббарда.

Подробный вывод выражения для спектра фермиевских возбуждений и уравнения на сверхпроводящий параметр порядка $\Delta_{\vec{k}}$ $d_{x^2-y^2}$ -типа симметрии с помощью указанной методики был дан в работе [13]. Поэтому в данном разделе мы ограничимся тем, что приведем основные формулы из работы [13], необходимые для дальнейшего.

Перенормированный спектр фермиевских возбуждений нормальной фазы определяется выражением

$$\begin{aligned} \tilde{\epsilon}_{\vec{k}} &= \epsilon + t_{\vec{k}} \left(1 - \frac{n}{2} \right) \left(1 - \frac{n t_{\vec{k}}}{2 U} \right) - \\ &- \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \left\{ t_{\vec{q}} + \frac{n}{2} J_{\vec{k}-\vec{q}} + [(2-n) t_{\vec{k}} + (1-n) t_{\vec{q}}] \frac{t_{\vec{q}}}{U} \right\} \frac{K_{\vec{q}}}{1-n/2} + \\ &+ \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \left\{ t_{\vec{k}-\vec{q}} + \frac{n}{2} J_{\vec{q}} + (2-n) \frac{t_{\vec{k}} t_{\vec{k}-\vec{q}}}{U} - \frac{n t_{\vec{k}-\vec{q}}^2}{2 U} \right\} \frac{C_{\vec{q}}}{1-n/2}, \end{aligned} \quad (8)$$

где $t_{\vec{q}}$ и $J_{\vec{q}}$ Фурье-образы интеграла перескока и обменного интеграла соответственно. Вклад магнитных корреляций в ренормировки энергетического спектра реализуется посредством слагаемого с коррелятором

$$C_{\vec{q}} = \sum_f e^{-i(\vec{R}_f - \vec{R}_m)\vec{q}} \{ \langle S_f^z S_m^z \rangle + \langle S_f^+ S_m^- \rangle \}, \quad (9)$$

соответствующим спиновым степеням свободы. Кинематический коррелятор $K_{\vec{q}}$ в уравнении (8) определяется выражением

$$K_{\vec{q}} = \left(1 - \frac{n}{2} \right) \left(\frac{E_{\vec{k}} - \xi_{\vec{k}}}{2 E_{\vec{k}}} + \frac{\xi_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}} f(E_{\vec{k}}/T) \right),$$

$$f(x) = (\exp(x) + 1)^{-1}, \quad E_{\vec{k}} = \sqrt{\xi_{\vec{k}}^2 + |\Delta_{\vec{k}}|^2}, \quad \xi_{\vec{k}} = \varepsilon_{\vec{k}} - \mu, \quad (10)$$

а уравнение самосогласования для сверхпроводящего параметра порядка $\Delta_{\vec{k}}$ имеет вид

$$\Delta_{\vec{k}} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \left\{ 2t_{\vec{q}} + \frac{n}{2} (J_{\vec{k}+\vec{q}} + J_{\vec{k}-\vec{q}}) + 4 \left(1 - \frac{n}{2} \right) \frac{t_{\vec{k}} t_{\vec{q}}}{U} - n \frac{t_{\vec{q}}^2}{U} \right\} \frac{\Delta_{\vec{q}}}{2E_{\vec{q}}} \tanh \left(\frac{E_{\vec{q}}}{2T} \right). \quad (11)$$

Ранее [13] из анализа уравнения самосогласования для $d_{x^2-y^2}$ -типа симметрии параметра порядка был сделан вывод о существенной роли $H_{(3)}$ при формировании сверхпроводящей фазы. Поскольку магнитные корреляции не принимались во внимание, то приведенных здесь уравнений было достаточно для решения задачи.

Иная ситуация возникает, как только наряду с трехцентровыми взаимодействиями необходимо учесть вклад магнитных корреляций. В этом случае полученных электронных (нормальных и аномальных) функций Грина становится недостаточно, и необходимо вывести новые уравнения, описывающие динамику спиновых степеней свободы.

Корреляционные функции сферически инвариантной проводящей спиновой жидкости

При вычислении спиновых корреляторов $\langle S_f^z S_m^z \rangle$, $\langle S_f^+ S_m^- \rangle$ (см. (9)) в системе с развитыми антиферромагнитными корреляциями существенны следующие факторы. Во-первых, наличие дырок в системе приводит к тому, что операторы S_f^z , $S_f^{\pm}$ не являются в полном смысле спиновыми операторами, несмотря на то, что они удовлетворяют необходимым коммутационным соотношениям. В этом легко убедиться, если, например, вычислить скалярное произведение $(\vec{S}_f \vec{S}_f)$. В случае спиновых операторов $(\vec{S}_f \vec{S}_f) = 3/4$, т.к. $S = 1/2$. Для рассматриваемой проводящей спиновой жидкости

$$(\vec{S}_f \vec{S}_f) = \frac{3}{4} (X_f^{\uparrow\uparrow} + X_f^{\downarrow\downarrow}) = \frac{3}{4} - \frac{3}{4} X_f^{00}.$$

Видно, что только на классе гомеополарных состояний, когда дырки в системе отсутствуют, операторы $S_f^{z,\pm}$ представляют собой истинные спиновые операторы.

Второй фактор также связан с наличием в системе дырок и проявляется в виде усложнения теории по сравнению с теорией непроводящей спиновой жидкости. Напомним, что построенная в работах [24, 25] теория спиновой жидкости для гейзенберговской модели является теорией второго порядка, т.к. расщепление второй функции Грина приводило к замыканию уравнений движения в импульсном пространстве. В нашем случае, помимо спиновых степеней свободы, в динамические процессы включаются степени свободы, соответствующие фермиевским возбуждениям. С учетом динамики электронов проводимости спиновые корреляционные функции изучались в работе [26] на примере $t - J$ -модели. В данном параграфе мы обобщим результат работы [26], включив в рассмотрение трехцентровые взаимодействия (3), которые описывают перескок электрона на соседних узлах, коррелированный со спиновым состоянием другого электрона на третьем ближайшем узле.

Магнитные корреляторы, как известно, могут быть вычислены, если определены функции Грина $\langle\langle S_i^+ | S_j^- \rangle\rangle \equiv \langle\langle X_i^{\uparrow\downarrow} | X_j^{\downarrow\uparrow} \rangle\rangle$. Для их нахождения воспользуемся методом уравнений движения с привлечением идеологии квантовой спиновой жидкости, развивавшейся в работах [24, 25, 26].

Учитывая, что подсистема спиновых степеней свободы находится в состоянии квантовой спиновой жидкости (т.е. $\langle S_f^x S_g^x \rangle = \langle S_f^y S_g^y \rangle = \langle S_f^z S_g^z \rangle$ и $\langle S_f^\alpha \rangle = 0$, $(\alpha = x, y, z)$), для первого уравнения движения получаем

$$\omega \langle\langle X_{j+l}^{\sigma\bar{\sigma}} | X_j^{\bar{\sigma}\sigma} \rangle\rangle_\omega = \sum_n t_{nl} L_{nl}^{\sigma\bar{\sigma}}(\omega) + 2 \sum_n J_{ln} L_{ln}^z(\omega) + \langle\langle [X_{j+l}^{\sigma\bar{\sigma}}, H_{(3)}] | X_j^{\bar{\sigma}\sigma} \rangle\rangle_\omega, \quad (12)$$

где антисимметричные по индексам l и n функции $L_{nl}(\omega)$ определены следующим образом:

$$L_{nl}^{\sigma\bar{\sigma}}(\omega) = \langle\langle X_{j+n}^{\sigma 0} X_{j+l}^{0\bar{\sigma}} | X_j^{\bar{\sigma}\sigma} \rangle\rangle_\omega - [l \leftrightarrow n], \\ L_{ln}^z(\omega) = \frac{1}{2} \langle\langle (X_{j+l}^{\sigma\sigma} - X_{j+l}^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}) X_{j+n}^{\bar{\sigma}\sigma} | X_j^{\bar{\sigma}\sigma} \rangle\rangle_\omega - [l \leftrightarrow n]. \quad (13)$$

Здесь посредством $[l \leftrightarrow n]$ обозначено слагаемое, которое получается из предыдущего выражения путем взаимной замены индексов l и n .

При вычислении последнего слагаемого уравнения (12) проведем расщепление возникающих после коммутации с $H_{(3)}$ высших функций Грина по схеме

$$\begin{aligned} \langle\langle X_m^{\sigma\bar{\sigma}} X_n^{\sigma 0} X_l^{0\bar{\sigma}} | X_j^{\bar{\sigma}\sigma} \rangle\rangle_\omega &\Rightarrow \langle X_m^{\sigma\bar{\sigma}} \rangle \langle\langle X_n^{\sigma 0} X_l^{0\bar{\sigma}} | X_j^{\bar{\sigma}\sigma} \rangle\rangle_\omega, \\ \langle\langle X_m^{\sigma\bar{\sigma}} X_l^{\sigma 0} X_n^{0\bar{\sigma}} | X_j^{\bar{\sigma}\sigma} \rangle\rangle_\omega &\Rightarrow \langle X_l^{\sigma 0} X_n^{0\bar{\sigma}} \rangle \langle\langle X_m^{\sigma\bar{\sigma}} | X_j^{\bar{\sigma}\sigma} \rangle\rangle_\omega, \end{aligned} \quad (14)$$

где все m, n и l - разные. Тогда уравнение (12) после проведения Фурье-преобразования принимает вид

$$\omega G_q^{\sigma\bar{\sigma}}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_k \left(t_k + \frac{n t_k^2}{2U} \right) L_{k,q-k}^{\sigma\bar{\sigma}}(\omega) + 2 \frac{1}{N} \sum_k J_k L_{q-k,k}^z(\omega), \quad (15)$$

где Фурье-образы соответствующих функций Грина определены стандартно:

$$\langle\langle X_{j+l}^{\sigma\bar{\sigma}} | X_j^{\bar{\sigma}\sigma} \rangle\rangle_\omega = \frac{1}{N} \sum_q e^{iq l} G_q^{\sigma\bar{\sigma}}(\omega), \quad L_{nl}^\alpha = \frac{1}{N^2} \sum_{qp} e^{ig n + i p l} L_{qp}^\alpha, \quad \alpha = \{\sigma\bar{\sigma}, z\}. \quad (16)$$

При вычислении высших функций Грина $L_{nl}^{\sigma\bar{\sigma}}(\omega)$ и $L_{ln}^z(\omega)$ из-за громоздкости выражений не будем приводить промежуточные выкладки. Укажем лишь схему расщепления, при использовании которой получается замкнутая система уравнений. Прежде всего в высших функциях Грина выделяются слагаемые, содержащие произведения операторов, которые относятся к одному узлу. Использование алгебры операторов в таких слагаемых приводит к понижению ранга функций Грина. После такой процедуры, соответствующей строгому учету одноузельных корреляций, осуществляется расщепление только в тех высших функциях Грина, в которых индексы узлов операторов различны.

В результате проведения описанной выше схемы расщепления и последующего Фурье-преобразования (16) получаем для функции Грина $L_{qp}^{\sigma\bar{\sigma}}(\omega)$ уравнение

$$\begin{aligned} \omega L_{q,p}^{\sigma\bar{\sigma}}(\omega) &= 2(K_q - K_p) + \\ &+ G_{q+p}^{\sigma\bar{\sigma}}(\omega) \left\{ \frac{2}{U} \frac{1}{N} \sum_k t_k \left[t_q \left(K_k + \frac{2}{3} C_{k+q} \right) - t_p \left(K_k + \frac{2}{3} C_{k+p} \right) \right] + \frac{2}{U} t_q t_p (K_q - K_p) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{n}{2} (J_0 + J_{q+p}) (K_q - K_p) + \left(n \frac{t_q + t_p}{U} + 2 \right) (t_p K_p - t_q K_q) \right\} + \\ &+ M_{q,p}^{\sigma\bar{\sigma}}(\omega) \left\{ \left(1 - \frac{n}{2} \right) \left(t_q - t_p + \frac{n t_q^2 - t_p^2}{2U} \right) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{N} \sum_k \frac{t_k}{U} \left[t_q \left(K_k - \frac{2}{3} C_{k+q} \right) - t_p \left(K_k - \frac{2}{3} C_{k+p} \right) \right] + \frac{1}{2} \frac{1}{N} \sum_k J_k (K_{k+p} - K_{k+q}) \right\} + \\ &\quad + \left[\frac{n}{2} \left(1 - \frac{n}{2} \right) (t_p - t_q) + t_q K_q - t_p K_p \right] \frac{1}{U} \frac{1}{N} \sum_k t_k M_{q+p-k,k}^{\sigma\bar{\sigma}}(\omega) + \\ &\quad + (K_q - K_p) \frac{1}{N} \sum_k M_{q+p-k,k}^{\sigma\bar{\sigma}}(\omega) \left[\frac{t_k t_{q+p-k}}{U} - \frac{1}{2} J_{p-k} \right] + \\ &\quad + \frac{1}{U} \frac{1}{N} \sum_k t_k M_{q+p-k,k}^{\sigma\bar{\sigma}}(\omega) \frac{1}{N} \sum_{k_1} t_{k_1} \left[\frac{2}{3} C_{q+k_1} - \frac{2}{3} C_{p+k_1} + K_{q+k_1-k} - K_{p+k_1-k} \right]. \end{aligned} \quad (17)$$

Здесь $M_{q,p}^{\sigma\bar{\sigma}}(\omega)$ есть Фурье-образ симметричной по индексам n и l высшей функции Грина $M_{nl}^{\sigma\bar{\sigma}}(\omega) = \langle\langle X_{j+n}^{\sigma 0} X_{j+l}^{0\bar{\sigma}} | X_j^{\bar{\sigma}\sigma} \rangle\rangle_\omega + [n \longleftrightarrow l]$.

Дальше будем решать задачу в приближении, которое неявно использовали авторы работы [26] при изучении t - J -модели. Именно будем считать, что вклады от функций $M_{n,l}^{\sigma\bar{\sigma}}(\omega)$ в уравнение (17) пренебрежимо малы, если $n \neq l$. Для $n = l$ в силу определения $M_{n,l}^{\sigma\bar{\sigma}}(\omega)$ имеем $M_{l,l}^{\sigma\bar{\sigma}}(\omega) = 2G_n^{\sigma\bar{\sigma}}(\omega)$. Таким образом, полагаем, что $M_{n,l}^{\sigma\bar{\sigma}}(\omega) = 2\delta_{nl} G_n^{\sigma\bar{\sigma}}(\omega)$, или в квазиимпульсном представлении

$$M_{qp}^{\sigma\bar{\sigma}}(\omega) = 2G_{q+p}^{\sigma\bar{\sigma}}(\omega). \quad (18)$$

В этом приближении для уравнения (17) получаем значительно более простое выражение:

$$\omega L_{k,q-k}^{\sigma\bar{\sigma}}(\omega) = 2(K_k - K_{q-k}) +$$

$$+G_q^{\sigma\bar{\sigma}}(\omega) \left[(t_k - t_{q-k}) \left(2 - n + \frac{4}{U} \frac{1}{N} \sum_{k_1} K_{k_1} t_{k_1} \right) + n \left(1 - \frac{n}{2} \right) \frac{t_k^2 - t_{q-k}^2}{U} + \right. \\ \left. + (K_k - K_{q-k}) \left(\frac{2t_k t_{q-k}}{U} + n \frac{J_0 + J_q}{2} + J_q \right) + (t_{q-k} K_{q-k} - t_k K_k) \left(2 + n \frac{t_k + t_{q-k}}{U} \right) \right]. \quad (19)$$

Отметим, что в полученном приближенном уравнении (19), по сравнению с исходным уравнением (17), исчезла зависимость от спиновых корреляторов C_q .

При выводе уравнения движения для третьей функции Грина $L_{nl}^z(\omega)$ также применим описанную выше схему расщепления. Тогда для Фурье-образа этой функции $L_{q,k}^z(\omega)$, определенного согласно (16), в приближении (18) находим

$$\omega L_{q-k,k}^z(\omega) = \frac{4}{3} (C_{q-k} - C_k) + \frac{4}{3} G_q^{\sigma\bar{\sigma}}(\omega) \frac{1}{N} \sum_{k_1} J_{k_1} (\tilde{C}_{q-k+k_1} - \tilde{C}_{k-k_1}) + \\ + \frac{4}{3} G_q^{\sigma\bar{\sigma}}(\omega) [J_q \tilde{C}_{q-k} - J_{q-k} \tilde{C}_{q-k} - J_q \tilde{C}_k + J_k \tilde{C}_k] + \\ + G_q^{\sigma\bar{\sigma}}(\omega) \left[\frac{n}{2} (J_{q-k} - J_k) + \frac{2}{U} \frac{1}{N} \sum_{k_1} t_{k_1} (t_{k-k_1} K_{k-k_1} - t_{q-k-k_1} K_{q-k-k_1}) \right], \quad (20)$$

где $\tilde{C}_q = \alpha C_q + (1 - \alpha) 3n/4$. Вершинная поправка α (см., например, [24, 25, 26]) определена согласно уравнению $\tilde{C}_{nl} = (\alpha(1 - \delta_{nl}) + \delta_{nl}) C_{nl}$ и позволяет сгладить неточность, вносимую процедурой расщепления. Конкретное значение α определяется из условия $C_{ll} = 3n/4$. Отметим также, что все слагаемые в последней строчке уравнения (20) своим появлением обязаны взаимодействию $H_{(3)}$.

Далее подставим уравнения движения (19) и (20) в выражение (15), умноженное на ω , и получим замкнутое уравнение на искомую функцию Грина $G_q^{\sigma\bar{\sigma}}(\omega)$, определяющую спиновые корреляции. При этом, однако, учтем следующее обстоятельство. Гамильтониан $t - J^*$ - модели был получен из гамильтониана модели Хаббарда в пределе больших значений константы кулоновского взаимодействия U . Таким образом, величина $\lambda = 2|t|/U$ в данной задаче является малым параметром. Кроме того, нас интересует область малых дырочных допирований (n -близко к единице). Легко видеть, что при $n \rightarrow 1$, $K_p = (1 - n/2)f(\varepsilon_p) \rightarrow 1/2$ и в уравнениях (19) и (20) сокращаются все слагаемые, связанные с кинематикой задачи. Остаются только две первые строчки уравнения (20), которые описывают спиновые корреляции в гейзенберговском пределе [24, 25]. Можно показать, что все такие, связанные с кинематикой, слагаемые пропорциональны либо концентрации дырок $\delta = (1 - n)$, либо кинематическим корреляторам K_f ($f \neq 0$), которые также пропорциональны $(1 - n)$. Таким образом, в нашей задаче имеется два малых параметра: λ и δ . Если мы выберем $\lambda = 0,25$ и будем интересоваться концентрацией электронов $n > 0,75$, то оба указанных параметра будут одинакового порядка малости. Фактически, как показывают конкретные расчеты, в малой области допирования значения кинематических корреляторов K_f ($f \neq 0$) значительно меньше значений параметров λ и магнитных корреляторов C_f (при $f \neq 0$).

Имея в виду отмеченную особенность, оставим слагаемые порядка δ , $\lambda\delta$ и λ^2 , отбросив при этом все слагаемые порядка $\lambda^2\delta$ как малые. Тогда из уравнений (19), (20) и (15) для функции Грина $G_q^{\sigma\bar{\sigma}}(\omega)$ окончательно находим

$$G_q^{\sigma\bar{\sigma}}(\omega) = \frac{A_q(\omega)}{\omega^2 - \omega^2(q)}, \quad A_q(\omega) = \frac{1}{N} \sum_k \left[\left(2t_k + \frac{n}{U} t_k^2 \right) (K_k - K_{q-k}) + \frac{8}{3} J_k (C_{q-k} - C_k) \right], \quad (21)$$

где спектр магнитных возбуждений $\omega(q)$ определяется уравнением

$$\omega^2(q) = \frac{1}{N} \sum_k \left[t_k (t_k - t_{q-k}) \left((2 - n) \left(1 + n \frac{t_k}{U} \right) - 2n K_k \frac{t_k + t_{q-k}}{U} + \frac{4}{U} \frac{1}{N} \sum_{k_1} t_{k_1} K_{k_1} \right) + \right. \\ \left. + 2t_k (t_{q-k} K_{q-k} - t_k K_k) + t_k (K_k - K_{q-k}) \left(\frac{2t_k t_{q-k}}{U} + n \frac{J_0 + J_q}{2} + J_q \right) + \right. \\ \left. + \frac{8}{3} J_k \frac{1}{N} \sum_{k_1} J_{k_1} (\tilde{C}_{q-k+k_1} - \tilde{C}_{k-k_1}) + \frac{8}{3} J_k (J_q \tilde{C}_{q-k} - J_{q-k} \tilde{C}_{q-k} - J_q \tilde{C}_k + J_k \tilde{C}_k) \right]. \quad (22)$$

В пределе $n \rightarrow 1$ остается только последняя строчка уравнения (22), что соответствует спектру магнонов модели Гейзенберга [24, 25].

$(\cos(2k_x a) + \cos(2k_y a))/2$, что эквивалентно возникновению эффективных перескоков электронов между ближайшими и следующими за ближайшими соседями. Из рис. 1 видно, что в рассмотренном режиме ренормировки являются несущественными. Это вполне соответствует результатам работ [10, 20], в которых анализировалось влияние $H_{(3)}$ на энергетический спектр.

Существенно иная ситуация имеет место при рассмотрении спектра фермиевских возбуждений $t - J^*$ -модели с учетом ренормировок, обусловленных спиновыми флуктуациями. В этом случае выражение для спектра

$$\tilde{\epsilon}_{tJ^*}(\vec{k}) = -4|t|\gamma_1(\vec{k}) \left[\left(1 - \frac{n}{2}\right) + \frac{(4 - 3n/2)\lambda K_1 + C_1}{(1 - n/2)} \right] - |t|\lambda_2\gamma_2(\vec{k}) \left[\left(1 - \frac{n}{2}\right)n - 4C_1 + \frac{nC_2}{(1 - n/2)} \right] - |t|\lambda_3\gamma_3(\vec{k}) \left[\left(1 - \frac{n}{2}\right)n - 4C_1 + \frac{nC_3}{(1 - n/2)} \right] \quad (25)$$

содержит магнитные корреляторы второй C_2 и третьей C_3 координационных сфер.

Самосогласованные расчеты при $n = 0,92$ дают следующие значения корреляторов: $C_1 = -0,2639$; $C_2 = 0,1347$; $C_3 = 0,1115$; $K_1 = 0,0037$. Спектр, вычисленный при этих значениях корреляторов, для трех характерных направлений в пространстве квазиимпульса представлен кривой 3 (рис. 1). Видно, что главная особенность, отличающая кривую 3 от двух предыдущих, это наличие минимума в M -точке зоны Бриллюэна. Подобная структура энергетической поверхности приводит к тому, что в плотности состояний, соответствующей спектру (25), возникает вторая дополнительная особенность Ван-Хова логарифмического типа, тогда как для спектров без учета магнитных корреляций имеется лишь одна такая особенность. Важно отметить, что эта дополнительная особенность Ван-Хова располагается в окрестности потолка зоны проводимости и возникает только при концентрациях электронов, больших некоторого критического значения n_1 . Для спектра (25) $t - J^*$ -модели (с $\lambda = 0,25$) $n_1 \approx 0,72$.

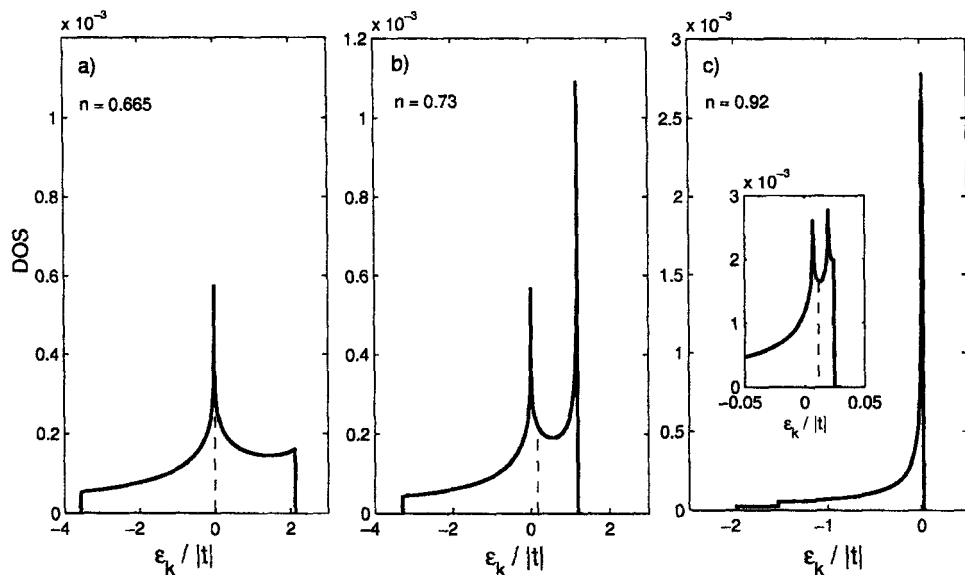


Рис. 2. Плотность состояний в $t - J^*$ -модели с учетом спиновых корреляций при $n > n_1$

Сказанное отражено на рис. 2, на котором представлена типичная плотность состояний для спектра (25) при $n > n_1$, соответствующая кривой 3 на рис. 1. Здесь показана только часть плотности состояний, соответствующая области самых высоких энергий, в которой содержатся отмеченные особенности. Левая особенность на рис.2 соответствует седловым X -точкам зоны Бриллюэна. Эта особенность присутствует для всех трех спектров (23-25) и при всех концентрациях квазичастиц n . Заполнение состояний с энергиями, соответствующими этой особенности, происходит при концентрации $n \approx 0,66$, причем эта концентрация примерно одинакова для всех трех вариантов спектров. Поэтому максимум на концентрационной зависимости T_c также имеет место при $n \approx 0,66$.

Вторая особенность Ван-Хова (правая на рис.2b и на вставке рис.2c), как уже было сказано, характерна только для спектра (25) (рис. 1, кривая 3) и возникает лишь при одновременном учете как спиновых корреляций, так и трехцентровых взаимодействий.

Зависимость температуры сверхпроводящего перехода от концентрации электронов

В предыдущем параграфе было показано, что одновременный учет трехцентровых взаимодействий и спиновых флуктуаций приводит к новой особенности Ван-Хова в плотности фермиевских состояний. Очевидно, что эта особенность будет проявляться во многих кинетических характеристиках $t - J^*$ -модели. Далее будет продемонстрировано, что отмеченная аномалия в плотности состояний приводит к качественному изменению концентрационной зависимости температуры перехода в сверхпроводящее состояние с d -типом симметрии параметра порядка по сравнению с известной зависимостью для $t - J$ -модели.

Сверхпроводящее состояние может реализоваться, если интегральное уравнение (11) имеет нетривиальное решение $\Delta_{\vec{k}} \neq 0$. Ядро интегрального уравнения (11) записано в виде суммы четырех слагаемых. Первый член ядра $\sim 2t_{\vec{q}}$ происходит от кинематического механизма спаривания [2]. Происхождение второго слагаемого обусловлено как обменным, так и трехцентровым взаимодействием. Обменное взаимодействие дает слагаемое $\sim (J_{\vec{k}+\vec{q}} + J_{\vec{k}-\vec{q}})$, которое ответственно за d -тип симметрии в $t - J$ -модели. Трехцентровые взаимодействия вносят поправку $\sim (-1 + n/2)(J_{\vec{k}+\vec{q}} + J_{\vec{k}-\vec{q}})$, действующую в направлении подавления сверхпроводимости. В результате суперпозиции отмеченных вкладов перед слагаемым $\sim (J_{\vec{k}+\vec{q}} + J_{\vec{k}-\vec{q}})$ вместо 1 (как в $t - J$ -модели) возникает перенормировочный фактор $n/2$. Эта ренормировка константы связи в $t - J^*$ -модели и приводит к существенному подавлению T_c [13].

В рассматриваемом приближении ближайших соседей уравнение (11) может быть сведено к трансцендентному, если зависимость сверхпроводящей щели от квазиимпульса выбрать в виде $\Delta(\vec{k}) = \Delta_0(\cos k_x - \cos k_y)$, что соответствует решению $d_{x^2-y^2}$ -типа симметрии сверхпроводящего параметра порядка. В этом случае уравнение, определяющее температуру сверхпроводящего перехода, записывается следующим образом:

$$1 = \left(\frac{n}{2}\right) \left(\frac{J}{N}\right) \sum_{\vec{q}} \frac{(\cos q_x - \cos q_y)^2}{(\tilde{\epsilon}_{\vec{q}} - \mu)} \tanh\left(\frac{\tilde{\epsilon}_{\vec{q}} - \mu}{2T_c}\right). \quad (26)$$

Заметим, что для $d_{x^2-y^2}$ -типа симметрии первое, третье и четвертое слагаемые ядра интегрального уравнения (11) вклада не дают. Поэтому трехцентровые взаимодействия в данном подходе проявляются двояким образом. Во-первых, эти взаимодействия перенормируют константу связи по разобранному выше сценарию. Во-вторых, они сказываются на энергии фермиевских квазичастиц.

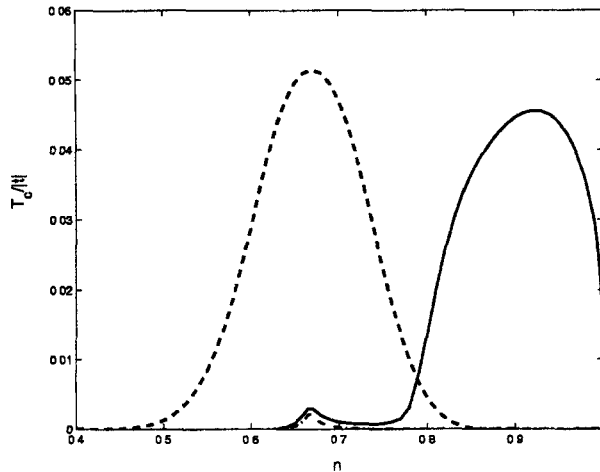


Рис. 3. Концентрационные зависимости T_c для $t - J^*$ -модели без учета магнитных флуктуаций (кривая 3) и с их учетом (кривая 2). Для сравнения приведена кривая 1, отражающая зависимость $T_c(n)$ без учета трехцентровых взаимодействий

Результаты численного анализа уравнения (26) представлены на рис. 3. Кривая 1 приведена для сравнения и отражает концентрационную зависимость критической температуры T_c в $t - J$ -модели без учета спиновых флуктуаций и идентична известной зависимости $T_c(n)$, полученной в [4].

Ситуация кардинально меняется, если включаются трехцентровые взаимодействия и учитываются спиновые корреляторы. В этом случае зависимость $T_c(n)$ отражается кривой 2. Из сравнения с первой кривой следует, что трехцентровые взаимодействия приводят к следующим качественным изменениям зависимости $T_c(n)$. Во-первых, эта зависимость характеризуется наличием двух максимумов, а не одним. В области первого максимума (химпотенциал лежит в окрестности левой особенности Ван-Хова на рис. 2) включение трехцентровых взаимодействий существенно (более чем на порядок) уменьшило критическую температуру. В области слабого допирования (химпотенциал лежит в окрестности правой особенности Ван-Хова) трехцентровые взаимодействия совместно с магнитными корреляторами индуцировали второй всплеск в зависимости $T_c(n)$. Причем максимальное значение T_c незначительно меньше наибольшего T_c , для кривой 1 (рис. 3).

В связи с полученным качественным изменением зависимости $T_c(n)$ необходимо подчеркнуть, что существенным явилось не только включение трехцентровых взаимодействий, но и учет спиновых флуктуаций. Без последних второго всплеска в зависимости $T_c(n)$ не происходит. Это видно из кривой 3, которая отражает зависимость $T_c(n)$, полученную при учете трехцентровых взаимодействий, но без учета перенормировок энергии за счет магнитных флуктуаций.

Представленные результаты исследований показывают существенную роль трехцентровых взаимодействий $t - J^*$ -модели при формировании и спектра фермиевских возбуждений, и сверхпроводящей фазы. Последовательный вывод эффективного гамильтониана, действующего в усеченном гильбертовом пространстве без двоек, приводит к одинаковой параметрической малости ($\sim t^2/U$, как обменных слагаемых H_{eff} , так и трехцентровых. Этим обстоятельством объясняется существенная ренормировка константы связи уравнения для сверхпроводящего параметра порядка. Второй важный эффект влияния $H_{(3)}$ связан с нетривиальным изменением электронного энергетического спектра, как только учтены магнитные корреляции. В этом случае в плотности состояний фермиевских квазичастиц в области высоких энергий индуцируется новая особенность Ван-Хова. Учитывая, что появление этой особенности реализуется при малой концентрации дырок, можно сделать предположение о магнитополяронной природе индуцирования новой особенности Ван-Хова. Такой вывод коррелирует с недавними результатами по исследованию электронной структуры сильно коррелированной спин-фермионной жидкости с привлечением расширенного базиса для включения магнитополяронных состояний [27]. Вторым аргументом в пользу данной гипотезы является структура $H_{(3)}$, в соответствии 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.

Список литературы

- [1] ANDERSON P.W. // Science. – 1987. – V. 235. – P. 1196-1198.
- [2] ЗАЙЦЕВ Р.О., ИВАНОВ В.А. // Письма в ЖЭТФ. – 1987. – № 46. – С. 140.
- [3] PLAKIDA N.M. *High-temperature superconductivity*. Berlin: Springer Verlag, 1995.
- [4] ИЗЮМОВ Ю.А. // УФН. – 1997. – Т. 167. – С. 465.
- [5] ОВЧИННИКОВ С.Г. // УФН. – 1997. – Т. 167. – С. 1043.
- [6] HUBBARD J. // Proc. Roy. Soc. – 1963. – V. A276. – P. 238.
- [7] BARANOV M.A., CHUBUKOV A.V., KAGAN M.YU. // Int. J. Mod. Phys.B. – 1992. – V.6. – P. 2471.
- [8] БУЛАЕВСКИЙ Л.П., НАГАЕВ Э.Л., ХОМСКИЙ Д.Л. // ЖЭТФ. – 1968. – Т. 54. – С. 1562.
- [9] CHAO K.A., SPALEK J., OLES A.M. // J. Phys. – 1977. – V. C10. – P. L271.
- [10] YUSHANKHAI V.YU., OUDOVENKO V.S., HAYN R. // Phys. Rev. B. – 1997. – V. 55. – P. 15562.
- [11] HIRSCH J.E. // Phys. Lett. – 1989. – V. A136. – P. 153.
- [12] YUSHANKHAI V.YU., VUJICIC G.M., ZAKULA R.B. // Phys. Lett. – 1990. – V. A151. – P. 254.

- [13] ВАЛЬКОВ В.В., ВАЛЬКОВА Т.А., ДЗЕВИСАШВИЛИ Д.М., ОВЧИННИКОВ С.Г. // Письма в ЖЭТФ. – 2002. – Т. 75. – С. 450.
- [14] KAMPF A.P. // Phys. Rep. – 1994. – V. 249. – P. 219.
- [15] ИЗЮМОВ Ю.А. // УФН. – 1999. – Т. 169. – С. 225.
- [16] ПЛАКИДА Н.М. // Письма в ЖЭТФ. – 2001. – Т. 74. – С. 38.
- [17] KUZIAN R.O., HAYN R., BARABANOV A.F., MAKSIMOV L.A. // Phys. Rev. B. – 1998. – V. 58. – P. 6194.
- [18] БОГОЛЮБОВ Н.Н. *Лекции по квантовой статистике* / Н.Н.Боголюбов. – Киев: Наукова думка, 1949.
- [19] BASKARAN G., ZOU Z., ANDERSON P.W. // Solid St. Comm. – 1987. – V. 63. – P. 973.
- [20] LI Q.L., KOLTENBAH E.C., ROBERT JOYNT. // Phys. Rev. B. – 1993. – V. 48. – P. 437.
- [21] ЗАЙЦЕВ Р.О. // ЖЭТФ. – 1976. – Т. 70. – С. 1100.
- [22] PLAKIDA N.M., YUSHANKHAY V.YU., STASYUK I.V. // Physica C. – 1989. – V. 162-164. – P. 787.
- [23] YUSHANKHAY V.YU., PLAKIDA N.M., KALINAY P. // Physica C. – 1991. – V. 174. – P. 401.
- [24] SHIMAHARA H., TAKADA S. // JPSJ. – 1991. – V. 60. – P. 2394-2405.
- [25] БАРАБАНОВ А.Ф., БЕРЕЗОВСКИЙ В.М. // ЖЭТФ. – 1994. – Т. 106. – С. 1156-168.
- [26] SHIMAHARA H., TAKADA S. // JPSJ. – 1992. – V. 61. – P. 989-997.
- [27] BARABANOV A.F., KOVALEV A.A., URAZAEV O.V., BELEMOUK A.M. // Phys. Lett. A. – 2000. – V. 265. – P. 221.

**INFLUENCE OF MAGNETIC CORRELATIONS AND THREE CENTER
INTERACTIONS ON SUPERCONDUCTING STATE WITH $d_{x^2-y^2}$ -ORDER
PARAMETER SYMMETRY**

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

The influence of three center interactions and magnetic correlations on concentration dependence of the transition temperature T_c in superconducting phase with $d_{x^2-y^2}$ order parameter symmetry is considered. It is shown, that the three center interactions in $t - J^$ -model result in two characteristic effects. The first one consists in coupling constant renormalization and significant decreasing of T_c . The second effect causes qualitative change of $T_c(n)$ dependence due to additional maximum, arising in the small doping region. The new maximum is shown to appear only when both three center interactions and electron spectrum renormalizations due to magnetic correlations are taken into account. To derive spherically invariant magnetic correlators it was proposed to extend the spin liquid theory, which allows us to go beyond the known approximations.*