

СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ d -СИММЕТРИИ КАК СЛЕДСТВИЕ КОРРЕЛЯЦИЙ ТИПА ВАЛЕНТНЫХ СВЯЗЕЙ

А. А. Овчинников*, М. Я. Овчинникова†, Е. А. Плеханов

Институт химической физики Российской академии наук
117977, Москва, Россия

Поступила в редакцию 24 декабря 1997 г.

Показана возможность сверхпроводящего порядка d -симметрии, обязанного корреляциям типа валентных связей. Корреляции валентных связей совместимы с антиферромагнитным спиновым порядком. Для явного построения однородного состояния со структурой валентных связей для двумерной модели Хаббарда при произвольном допировании использован вариационный метод унитарных локальных преобразований. Притяжение дырок в d -канале обязано модуляции прыжков заселенностями центров при образовании валентных связей, и параметры его определены вариационно. Важное значение для величины щели имеет увеличение плотности состояний на границе Ферми при антиферромагнитном расщеплении зоны. Величина щели и отношение ее к T_c имеют порядок $2\Delta \simeq 0.1t$ и $2\Delta/kT_c \simeq 4.5 \div 4$ при $U/t \simeq 8$. Обсуждается соответствие найденной фазовой диаграммы эксперименту. Зависимость T_c от допирования $\delta = |n - 1|$ и форма поверхности Ферми очень чувствительны к малому взаимодействию t' диагональных прыжков. При $t' > 0$ и дырочном допировании максимуму T_c на кривой $T_c(\delta)$ отвечает уровень допирования δ_{opt} , при котором энергия наиболее плоских участков нижней хаббардовской зоны при $k \sim (\pi, 0)$ пересекает уровень Ферми. В недодопированных образцах, $\delta < \delta_{opt}$, анизотропная псевдощель нормального состояния отвечает энергии $|E(\pi, 0) - \mu|$ смещения этой области спектра относительно уровня Ферми.

1. ВВЕДЕНИЕ

В последние годы методы высокого разрешения в фотоэмиссионной спектроскопии (ARPES) [1, 2], в нейтронном рассеянии [3] и в фазочувствительных экспериментах [4, 5] сильно обогатили знание электронной структуры ВТСП. Самые последние результаты относятся к открытию «малой» поверхности Ферми [6] и анизотропной псевдощели в спектре возбуждений в нормальном состоянии «недодопированных» (underdoped) ВТСП [7, 8]. Зонный подход, служащий естественным языком для обсуждения этих экспериментов, должен включать в себя обязательный учет всех типов корреляций, роль которых ожидается существенной из рассмотрений в локализованном пределе $U \rightarrow \infty$ или из численных расчетов конечных кластеров.

Во всех теоретических работах ведется поиск ответов на важнейшие вопросы — о возможной корреляционной природе притяжения и механизме спаривания, о роли антиферромагнитных корреляций и корреляций типа образования валентных связей (см. обзоры [9–12]). Идея корреляционной природы сверхпроводящего спаривания отстаивалась и обосновывалась в работах [13].

* E-mail: ovchin@glas.apc.org.

† E-mail: movchin@center.chph.ras.ru

Цель данной работы — исследовать эти же вопросы на основе вариационного подхода и явного представления коррелированного состояния. Мы надеемся выявить роль отдельных типов корреляций, в частности, корреляций типа валентных связей. Рассмотрение ведется на классической базовой модели сильно коррелированных систем — двумерной модели Хаббарда:

$$H = -t \sum_{\langle nm \rangle, \sigma} (c_{n\sigma}^\dagger c_{m\sigma} + \text{H.c.}) + \sum_n U n_{n\uparrow} n_{n\downarrow}. \quad (1)$$

Ее соответствие электронной структуре CuO_2 -плоскости и основные параметры достаточно надежно установлены [14, 15].

Впервые введенные Андерсоном [16, 17] состояния резонирующих валентных связей (RVB) означали, что конфигурации системы состоят из синглетных компонент двух частиц, локализованных на узлах, образующих связь. Позже [18–20] для модели Хаббарда были построены вариационные функции — зонные аналоги состояний с периодической димерной структурой и однородные состояния валентных связей [20]. В этих решениях, в отличие от RVB, синглетные пары сопровождаются изменением зарядового состояния узлов, образующих связь. Были исследованы также и некоторые свойства таких состояний (совместимость с антиферромагнетизмом, спектр дырочных возбуждений и его проявления в фотоэмиссионных спектрах и др.). Вне рассмотрения остались вопросы о сверхпроводящем порядке. Между тем предложенный в [19, 20] метод унитарных локальных преобразований, в отличие от неунитарных преобразований типа анзаца Гутцвиллера [21], позволяет построить не только коррелированную функцию, но и явное выражение для эффективного гамильтониана, а следовательно, изучить возможность сверхпроводящего порядка $d_{x^2-y^2}$ -симметрии. Именно такую симметрию можно считать доказанной для ряда купратов ($\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$, $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$) на основе многих экспериментов в разных методиках [10]. Поэтому, а также в силу того что одноцентровое отталкивание подавляет сверхпроводящий порядок s -симметрии, но не влияет на корреляции d -симметрии, мы будем рассматривать лишь последние.

Происхождение притяжения дырок часто связывается со взаимодействием типа коррелированных (или модулированных) прыжков, впервые отмеченным в [22]. В отличие от [22] или аналогичных взаимодействий в $t - J$ -модели [12] в данной работе вид и величина такого рода взаимодействий определяются из вариационного принципа решением соответствующей самосогласованной задачи.

2. ПОСТРОЕНИЕ ОДНОРОДНОГО СОСТОЯНИЯ ВАЛЕНТНЫХ СВЯЗЕЙ И САМОСОГЛАСОВАННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ

Волновая функция Ψ с корреляциями типа валентных связей строится из некоррелированного состояния Φ с помощью унитарного преобразования:

$$\Psi = \hat{W}(\alpha)\Phi, \quad \hat{W}(\alpha) = \exp(\alpha Z), \quad Z = \sum_{\langle nm \rangle} Z_{nm}. \quad (2)$$

Локальный антиэрмитов оператор Z_{nm} , относящийся к связи $\langle nm \rangle$ соседних узлов, равен

$$Z_{nm} = [g_{nm,\sigma}^\dagger g_{nm,-\sigma}^\dagger u_{nm,-\sigma} u_{nm,\sigma} - \text{H.c.}] \equiv -\frac{1}{2} \sum_{\sigma} j_{nm\sigma} \Delta_{nm,-\sigma}, \quad (3)$$

$$j_{nm\sigma} = c_{n\sigma}^\dagger c_{m\sigma} - c_{m\sigma}^\dagger c_{n\sigma}, \quad \Delta_{nm,-\sigma} = n_{n-\sigma} - n_{m-\sigma}, \quad (4)$$

$$g_{nm,\sigma}(u_{nm,\sigma}) = \frac{c_{n\sigma} \pm c_{m\sigma}}{\sqrt{2}}.$$

Здесь g и u отвечают четной и нечетной комбинациям орбит соседних центров. Оператор Z_{nm} действует только на синглетные компоненты с двумя частицами на соседних узлах в полной волновой функции Φ . В Φ встречаются разные конфигурации синглетных пар соседних узлов, подобно тому как это встречается в методе RVB [16]. Но в отличие от RVB в нашем случае синглетные пары сопровождаются изменением (оптимизацией) зарядового состояния узлов, образующих связь. Надежды на эффективность преобразования (2) связаны с тем, что в случае только двух узлов с двумя дырками на них волновая функция $\Psi(nm) = \exp(\alpha Z_{nm})\Phi$, построенная из некоррелированной $\Psi = |g_{\uparrow}^{\dagger} g_{\downarrow}^{\dagger}\rangle$ (для $t < 0$), является точной синглетной функцией системы при оптимальном $\alpha = -0.5 \arctg(U/4t)$.

В силу унитарности преобразования в (2) исходный гамильтониан Хаббарда в базисе коррелированных состояний Ψ строго эквивалентен преобразованному гамильтониану

$$\tilde{H}(\alpha) = W^\dagger(\alpha) H W(\alpha) \quad (5)$$

в базисе функций Φ . Вариационный параметр α в $W(\alpha)$ является, по- существу, параметром порядка структур валентных связей. При этом рассмотрение новой проблемы (5) методом среднего поля позволяет исследовать состояния с корреляциями такого типа при произвольном допировании.

В отличие от рассмотренных ранее периодических структур валентных связей с перекрывающимися димерами [19], в случае однородного состояния (2) локальные операторы Z_{nm} не коммутируют между собой. Поэтому мы не можем найти эффективный гамильтониан во всех порядках по α . Однако мы можем найти явное выражение $\tilde{H}(\alpha)$ через ферми-операторы с точностью до членов $\sim \alpha^2$ включительно:

$$\tilde{H}(\alpha) \approx H + \alpha[H, Z] + \frac{\alpha^2}{2} [[H, Z], Z] = H^{(0)} + \alpha H^{(1)} + \frac{\alpha^2}{2} H^{(2)} \quad (6)$$

и найти самосогласованное решение новой проблемы методом среднего поля. В отличие от одиночного димера в $2D$ -решетке каждый узел завязан на 4 связи. Поэтому, как будет видно дальше, оптимальный параметр преобразования α оказывается малым вплоть до больших U/t ($\alpha \leq 0.22$ при $U/t \leq 8$), что позволяет использовать разложение (6). Помимо малости α еще одно обстоятельство делает исследование гамильтониана (6) второго порядка по α осмысленным. А именно: величина оптимального α зависит, в основном, от U/t и относительно мало меняется при допировании. Это означает, что при фиксированном α на гамильтониан (6) можно взглянуть как на исходный, если угодно, эмпирический эффективный гамильтониан новой модели, изучение которой может приблизить к пониманию реальной ситуации. Полное выражение для $\tilde{H}(\alpha)$ достаточно громоздко.

Разберем подробнее вклад $H^{(1)}$ первого порядка по α в эффективный гамильтониан (6). Выражение его через ферми-операторы имеет вид

$$H^{(1)} = [H, Z] = H_U^{(1)} + T^{(1)}, \tag{7}$$

$$H_U^{(1)} = -\frac{U}{2} \sum_{\langle nm \rangle, \sigma} t_{nm\sigma} \Delta_{nm, -\sigma}^2, \tag{8}$$

$$T^{(1)} = t \sum_{\langle nm \rangle, \sigma} \left\{ [\Delta_{nm\sigma} \Delta_{nm, -\sigma} + j_{nm\sigma} j_{nm, -\sigma}] + \right. \\ \left. + \sum_{m_i \in \langle m m_i \rangle} A(n, m, m_i, \sigma) + \sum_{n_i \in \langle n n_i \rangle} A(m, n, n_i, \sigma) \right\}. \tag{9}$$

В двух последних трехузельных членах соответственно $m_i \neq n$ и $n_i \neq m$. Операторы $j_{nm\sigma}$, $\Delta_{nm\sigma}$ определены в (4), а операторы A и $t_{nm\sigma}$ определяются выражениями

$$A(n, m, m_i, \sigma) = -\frac{1}{2} [t_{nm_i\sigma} \Delta_{m m_i, -\sigma} + j_{nm\sigma} j_{n m_i, -\sigma}], \tag{10}$$

$$t_{nm\sigma} = (c_{n\sigma}^\dagger c_{m\sigma} + \text{H.c.}). \tag{11}$$

Второй порядок по α в гамильтониане (6) содержит двух-, трех- и четырехцентровые вклады. Его выражение полностью приведено в Приложении, формулы (32)–(40).

Исследуем самый общий класс некоррелированных состояний типа БКШ с аномальными средними d -симметрии и с удвоенной магнитной элементарной ячейкой для тестирования возможности антиферромагнитного спинового порядка и сверхпроводящего порядка $d_{x^2-y^2}$ -типа. Для функции Φ такого общего вида и эффективного гамильтониана (5) средняя энергия $\bar{H}(y_i) = \langle \Psi H \Psi \rangle = \langle \Phi \tilde{H} \Phi \rangle$ вычисляется точно. Она оказывается функцией от следующих одноэлектронных нормальных и аномальных средних по Φ :

$$\{y_i\} = \{r_0, r_1, r_{\sqrt{2}}, r_2, r_{\sqrt{5}}, r_3, d_0, d_{\sqrt{2}}, d_2, w_1, w_2, w_{\sqrt{5}}, w_3\}_i \tag{12}$$

где

$$r_l = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \langle c_{n\sigma}^\dagger c_{n+l, \sigma} \rangle, \tag{13}$$

$$d_l = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \frac{\sigma}{|\sigma|} (-1)^n \langle c_{n\sigma}^\dagger c_{n+l, \sigma} \rangle, \tag{14}$$

$$w_l = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \frac{\sigma}{|\sigma|} \text{sign}(l_x^2 - l_y^2) \langle c_{n\sigma}^\dagger c_{n+l, -\sigma}^\dagger \rangle = w_l^*. \tag{15}$$

Учтем все типы симметрии исследуемого состояния: трансляционную, по отношению к каждой из замен $x \rightarrow -x$ или $y \rightarrow -y$, эквивалентность четной и нечетной подрешеток при $\sigma \rightarrow -\sigma$. Тогда одноэлектронные узельные средние (13)–(15) действительны и величины $r_l, d_l, |w_l|$ зависят только от $|l|$; $w_l = 0$ при $l_x = \pm l_y$; $d_l = 0$ для нечетных $l_x + l_y$. От направления l зависит только знак w_l согласно (15). Среднее от любого $2n$ -фермионного оператора по Φ точно выражается через одноэлектронные средние r_l, d_l, w_l .

При вычислении средней энергии мы ограничивались членами не выше второго порядка по аномальным средним w_l в силу естественной малости T_c и сверхпроводящей щели в масштабах ширины зоны $\sim t$ и антиферромагнитной щели $\sim Ud_0$. В результате среднее от энергии по самому общему некоррелированному состоянию с учетом удвоенной магнитной ячейки и аномальных средних d -симметрии выражается через одноэлектронные средние (12). В расчете на один узел оно равно

$$\bar{H}(y_i) = \mathcal{H}(r_i, d_i) + \mathcal{H}^{SC}(w_i, r_i, d_i), \tag{16}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(r_i, d_i) = & \left\{ U(r_0^2 - d_0^2) - 8tr_1 \right\} + \alpha \left\{ -8r_1U[r_0(1 - r_0) + d_0^2 + r_1^2] + \right. \\ & \left. + 16t[d_0^2 + 2d_0d_{\sqrt{2}} + d_0d_2] \right\} + \frac{1}{2}\alpha^2 \left\{ \mathcal{H}_U^{(2)} + \mathcal{F}^{(2)} \right\}, \end{aligned} \tag{17}$$

$$\mathcal{H}^{SC} = \sum_{ij} k_{ij} w_i w_j = -8\alpha U r_1 w_1^2 + \alpha^2 \sum_{ij} k_{ij}^{(2)} w_i w_j. \tag{18}$$

Здесь явно выписаны только члены нулевого и первого порядка по α . Вклады $\mathcal{H}_U^{(2)}$, $\mathcal{F}^{(2)}$ второго порядка по α и полное выражение для \mathcal{H}^{SC} даются соответственно формулами (42), (44) и (45)–(47) Приложения. Все аргументы, от которых зависит \bar{H} , перечислены в (12). Нетрудно проверить, что \bar{H} инвариантно относительно каждой из замен ($r_l \rightarrow \delta_{l,0} - r_l$, $t \rightarrow -t$) или $d_l \rightarrow -d_l$ или $w_l \rightarrow -w_l$ в отдельности. Первая из них отвечает $e - h$ -симметрии хаббардовской модели.

Подробней следует сказать о происхождении членов (18) с аномальными средними. Рассмотрим вклад $\alpha H^{(1)}$ первого порядка по α в эффективный гамильтониан (формулы (7)–(9)). Расчет показывает, что в среднем $\alpha T^{(1)}$ от зонной энергии члены с аномальными средними отсутствуют. И это понятно: ни преобразование $W(\alpha)$, ни сверхпроводящий порядок не могут понизить энергию невзаимодействующих частиц. Но среднее $\alpha H_U^{(1)}$ зависит от аномальных параметров порядка. Действительно, в выражении (8) для оператора $H_U^{(1)}$ встречаются члены типа

$$c_{n\sigma}^\dagger c_{m\sigma} (n_{n,-\sigma} + n_{m,-\sigma}) - 2c_{n\sigma}^\dagger c_{m\sigma} n_{n,-\sigma} n_{m,-\sigma}. \tag{19}$$

Это — варианты взаимодействия коррелированных прыжков (correlated hopping interaction), модулируемых заселенностями узлов. Первое слагаемое в (19) имеет вид взаимодействия, предложенного Хиршем [22]. Вклад с аномальными средними от этого оператора равен нулю,

$$\langle c_{n\sigma}^\dagger c_{m\sigma} (n_{n,-\sigma} + n_{m,-\sigma}) \rangle = -2w_0 w_{|n-m|}^{(s)},$$

поскольку сверхпроводимость s -типа запрещена ($w_0 = \langle c_{n\uparrow}^\dagger c_{n\downarrow}^\dagger \rangle = 0$). Возникновение сверхпроводящего порядка s -симметрии ($w_0 \neq 0$) в искомом состоянии Φ повлекло бы за собой повышение энергии на величину $\Delta\bar{H} = Uw_0^2$ на узел. Вклад в энергию от аномальных параметров порядка d -симметрии обязан именно операторам типа второго слагаемого в (19). В (18) явно выписан этот определяющий вклад. В действительности в расчете использовалось полное выражение (45)–(47) для вклада в среднюю энергию от аномальных средних.

Наличие в \bar{H} линейного по α члена говорит о том, что минимум $\bar{H}(\alpha)$ отвечает ненулевому значению α . Уже из (16)–(18) следуют относительные знаки ряда величин при $t > 0$ в (1):

$$tr_1 > 0, \quad r_1 > 0, \quad \alpha r_1 > 0, \quad \alpha > 0, \quad k_{11} \simeq -8\alpha r_1 U < 0. \quad (20)$$

Итак, требование снижения энергии в результате образования валентных связей определяет знак параметра преобразования, что влечет за собой отрицательный знак главной константы k_{11} сверхпроводящего порядка d -симметрии в (18), а следовательно, возможность существования сверхпроводимости d -симметрии.

Однодетерминантная некоррелированная функция Φ , минимизирующая энергию $(\bar{H} - \mu \bar{N})$, является произведением одночастичных (квазичастичных для H) собственных функций $\chi_{k\lambda\sigma}^\dagger$ линеаризованного гамильтониана

$$\hat{H}_L = \sum_\nu \frac{\partial \bar{H}}{\partial y_\nu} (\hat{y}_\nu - y_\nu) + \bar{H}(y_i) = \sum_k^F \hat{h}_k + \text{const}. \quad (21)$$

Операторы \hat{y}_i , отвечающие средним y_i (см. (12)–(15)), равны

$$\begin{aligned} \hat{r}_l &= \frac{1}{2n_l} \sum_{l,\sigma} c_{n,\sigma}^\dagger c_{n+l,\sigma}, \\ \hat{d}_l &= \frac{1}{2n_l} \sum_{l,\sigma} (-1)^n \frac{\sigma}{|\sigma|} c_{n,\sigma}^\dagger c_{n+l,\sigma}, \\ \hat{w}_l &= \frac{1}{4n_l} \sum_{l,\sigma} \text{sign}(l_x^2 - l_y^2) \frac{\sigma}{|\sigma|} [c_{n,\sigma}^\dagger c_{n+l,-\sigma}^\dagger + \text{H.c.}]. \end{aligned} \quad (22)$$

Здесь n_l число всех векторов l длины $l = ||l||$, по которым ведется суммирование.

В результате в базисе импульсных операторов

$$b_{k,j}^\dagger = \{c_{k\uparrow}^\dagger, c_{k\downarrow}^\dagger, c_{-k\downarrow}, c_{-k\uparrow}\}_j, \quad j = 1, \dots, 4, \quad \tilde{k} = (\pi, \pi) + k, \quad (23)$$

линеаризованный гамильтониан (21) запишется в виде

$$H_L = \sum_k^F \hat{h}_k + \text{const}, \quad \hat{h}_k = \sum_{i,j=1}^4 L_{ij} b_{ki}^\dagger b_{kj}. \quad (24)$$

Здесь $\tilde{k} = k + (\pi, \pi)$ и индекс F у суммы означают суммирование по k внутри магнитной зоны Бриллюэна $|k_x \pm k_y| < \pi$. Матрица L_{ij} дается формулой

$$L_{ij} = \begin{pmatrix} \epsilon_k - \mu & \Delta_k & W_k & 0 \\ \Delta_k & \epsilon_{\tilde{k}} - \mu & 0 & W_{\tilde{k}} \\ W_k & 0 & -(\epsilon_k - \mu) & \Delta_k \\ 0 & W_{\tilde{k}} & \Delta_k & -(\epsilon_{\tilde{k}} - \mu) \end{pmatrix}; \quad (25)$$

$$\epsilon_k = \frac{1}{2} \sum_l \frac{\partial \bar{H}}{\partial r_l} g_l(k), \quad \Delta_k = \frac{1}{2} \sum_l \frac{\partial \bar{H}}{\partial d_l} g_l(k), \quad W_k = \frac{1}{2} \sum_l \frac{\partial \bar{H}}{\partial w_l} q_l(k). \quad (26)$$

В суммах по l в величинах ϵ_k , Δ_k , W_k индекс l перебирает все r_l , либо d_l , либо w_l из полного набора (12) одноэлектронных средних, от которых зависит \bar{H} . В формулах (25), (26) использованы следующие обозначения:

$$g_l(k) = \frac{1}{n_l} \sum_l \cos k_x l_x \cos k_y l_y, \quad q_l(k) = \frac{1}{n_l} \sum_l \text{sign}(l_x^2 - l_y^2) \cos k_x l_x \cos k_y l_y. \quad (27)$$

Здесь n_l число всех векторов l длины $l = ||l||$, по которым ведется суммирование в (27), а сами функции (27) обладают симметрией:

$$g_l(\vec{k}) = (-1)^{l_x + l_y} g_l(k), \quad q_l(\vec{k}) = (-1)^{l_x + l_y} q_l(k).$$

Одноэлектронные собственные функции $\chi_{k\lambda}$ и спектр $\mathcal{E}_\lambda(k)$ линеаризованного гамильтониана находятся диагонализацией матрицы (25),

$$\chi_{k\lambda}^\dagger = \sum_j b_{kj}^\dagger S_{j,\lambda}, \quad \sum_j L_{ij} S_{j,\lambda} = S_{i,\lambda} \mathcal{E}_\lambda, \quad (28)$$

для каждого k , принадлежащего магнитной зоне Бриллюэна. Знание собственных функций и спектра позволяет замкнуть процедуру самосогласования, т.е. вычислить искомые средние $y_i = \langle \hat{y}_i \rangle_\Phi$ по формулам

$$\begin{aligned} r_l &= \frac{1}{2N} \sum_k^F [g_l(k)(U_{11} + 1 - U_{33}) + g_l(\vec{k})(U_{22} + 1 - U_{44})], \\ d_l &= \frac{1}{2N} \sum_k^F g_l(k)[U_{12} + U_{21} + U_{34} + U_{43}], \\ w_l &= \frac{1}{2N} \sum_k^F [q_l(k)(U_{13} + U_{31}) + q_l(\vec{k})(U_{24} + U_{42})], \end{aligned} \quad (29)$$

где

$$U_{ij} = \sum_\lambda S_{i\lambda}^* S_{j\lambda} f_F(\mathcal{E}_\lambda/kT)$$

и $f_F(x)$ — фермиевские функции; g и q определены выражениями (27).

Описанная процедура самосогласования минимизирует энергию по Φ . Последующая минимизация по α дает искомое вариационное коррелированное состояние (2) и оптимальный эффективный гамильтониан (6) в базисе некоррелированных состояний. Проводилось два взаимно согласующихся типа самосогласованных расчетов: полный расчет со всеми нормальными и аномальными средними, дающий сверхпроводящую щель $2\Delta_0(U, \delta, T)$ для состояний валентных связей с антиферромагнитным и сверхпроводящим порядком (AF + VB + SC), и расчет температуры сверхпроводящего перехода $T_c(U, \delta)$ из линейных по w_l уравнений на фоне таких же состояний (AF + VB) без аномальных средних. В последнем случае критическая температура сверхпроводящего перехода вычисляется из стандартных уравнений теории возмущения по нарождающимся аномальным параметрам порядка:

$$\text{Det} |D_{ij} - \delta_{ij}| = 0, \quad D_{ij} = \partial w_i / \partial w_j |_{w_l=0}. \quad (30)$$

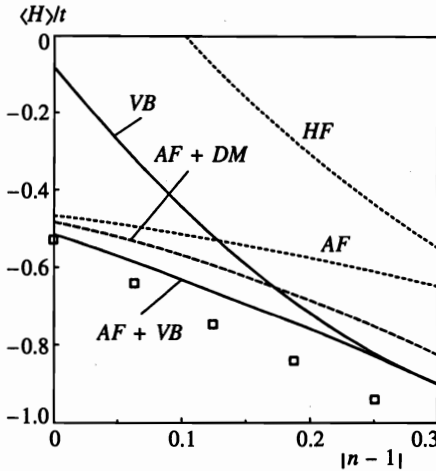


Рис. 1. Средние энергии, приходящиеся на один узел решетки, для антиферромагнитного и парамагнитного состояний с корреляциями типа валентных связей (сплошные кривые AF + VB и VB), либо для аналогичных некоррелированных состояний приближения Хартри-Фока (кривые AF и HF соответственно). Штриховая кривая AF + DM отвечает периодической димерной структуре валентных связей. Точки — результат [22] точной диагонализации гамильтониана для кластера 4×4

Матрица D_{ij} вычисляется с помощью формул (48), (49) Приложения.

Независимой проверкой (или основой для альтернативной итерационной процедуры) служило соотношение $\alpha = -\bar{H}^{(1)}(y_i)/\bar{H}^{(2)}(y_i)$ между оптимальным параметром α и средними от вкладов в эффективный гамильтониан (6) при самосогласованных значениях y_i . Проверялось и совпадение всех физических величин для одинаковых по величине дырочного и электронного допирований. При наличии антиферромагнитного порядка ($d_0 \neq 0$) результаты с использованием численной диагонализации (28) и приближенного решения для S_{ij} (формула (52) Приложения) совпадают. Это означает, что в сверхпроводящем спаривании участвуют в основном состояния только нижней (или только верхней) хаббардовской зоны при дырочном (электронном) допировании.

3. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Исследованная нами область $U/t \leq 9$ ограничена требованиями малости оптимального параметра α . Описание CuO_2 -плоскости однозонной моделью Хаббарда предполагает $U/t \sim 8$ [14, 15]. В указанной области учет корреляций типа валентных связей действительно понижает энергию системы, причем однородное состояние валентных связей оказывается ниже аналогичного состояния с периодической димерной структурой и при малом допировании каждое из них сосуществует с антиферромагнетизмом.

Масштаб энергетического эффекта виден из рис. 1 для системы с $U/t = 8$. Точки на рисунке — результат точной диагонализации для кластеров 4×4 [23]. В сравнении с энергией парамагнитного состояния простого метода Хартри-Фока основное понижение энергии при $n \rightarrow 1$ возникает от чередования спинов. Область антиферромагнитного порядка на диаграмме взаимодействие — допирование приведена на рис. 2a. Критический уровень допирования $\delta_c = |n_c - 1|$, при котором исчезает антиферромагнитный порядок, составляет $\delta_c \sim 0.26 \div 0.3$ для $U/t = 6 \div 8$. Эти значения ниже, чем соответствующий результат $\delta_c \sim 0.4 \div 0.45$ в обобщенном методе Хартри-Фока без учета корреляций типа валентных связей, однако они превышают критическую степень допирования $\delta_c \sim 0.05$, разрушающего антиферромагнетизм в реальных кристаллах ВТСП.

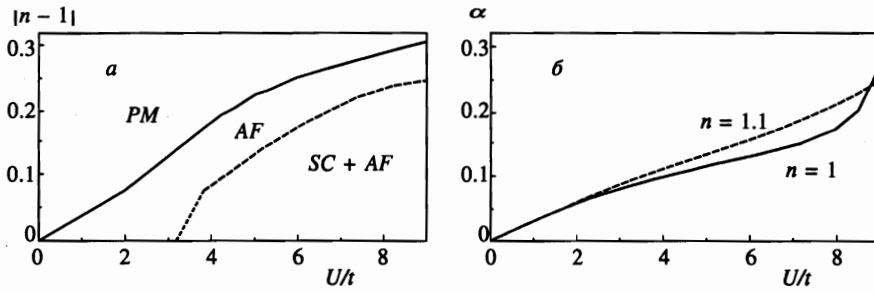


Рис. 2. а) Фазовая диаграмма для решений с корреляциями VC на плоскости. Сплошная кривая — критическая степень допирования, при которой исчезает антиферромагнетизм. Штриховой линией обозначена граница существования анизотропной сверхпроводящей щели, рассчитанная при температуре $kT = 0.002t$. Начальная часть кривой (короткие штрихи) приведена схематично ввиду сверхмалых величин щели и плохой сходимости вблизи T_c . б) Зависимость оптимального параметра преобразования α от U/t для недопированной системы ($n = 1$) и при степени допирования $|n - 1| = 0.1$ (соответственно сплошная и штриховая кривые)

На диаграмме рис. 2а значение $\delta_c \sim 0.05$ отвечало бы слишком малой величине $U/t \leq 2$.

Могут быть предложены различные объяснения этого несоответствия.

В простейшей гипотезе большая область антиферромагнетизма считается следствием неучета в исходной модели Хаббарда взаимодействий, нарушающих совершенный нестинг. Между тем наличие прыжкового взаимодействия t' ближайших соседей в купратах следует из разных исследований: из подробностей однозонного отображения [14] трехзонной модели Эмери; из эмпирических моделей сильной связи [24], которые воспроизводят полученную из данных ARPES форму поверхности Ферми и зоны; из моделирования уровней конечных кластеров с помощью $t - t' - J$ -модели и данных LDA расчетов [25]. Эмпирически найденный параметр диагональных прыжков $t'/t \sim 0.2$ [24, 25] превышает теоретические оценки [14] и различен для разных керамик [26]. Следует иметь в виду, что эмпирические оценки основаны на подгонке данных ARPES под единую зону, не расщепленную на нижнюю и верхнюю хаббардовские подзоны. В условиях антиферромагнитного расщепления и плоских зон чувствительность ферми-поверхности и других характеристик к t' возрастает. Поэтому реальные значения t'/t могут оказаться ниже. Наши расчеты, однако, показали, что введение взаимодействия t' почти не сдвигает границу (по допированию) между антиферромагнитным и парамагнитным состояниями.

Можно думать, что метод среднего поля (в данном случае примененный к эффективному гамильтониану $\hat{H}(\alpha)$) не способен описать антиферромагнитные корреляции спинов с большой, но конечной длиной корреляции. Между тем в технике слейв-бозонов до перехода к парамагнитному состоянию просматриваются две фазы спинового устройства — с коротким либо с дальним антиферромагнитным спиновым порядком [27, 28]. Причем суммарная граница истинного парамагнитного состояния очень близка к той же границе на рис. 1. Существуют и независимые аргументы, говорящие в пользу гипотезы о большой области антиферромагнитного спинового порядка отдельных CuO_2 -плоскостей в отличие от наблюдаемой малой области объемного антиферромагнетизма (см., например, [10, 29]). Наиболее яркие из них — обнаруженное с помощью ARPES [6] превращение поверхности Ферми в малую поверхность Ферми в недопированной области $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ и наблюдение тневых границ Фер-

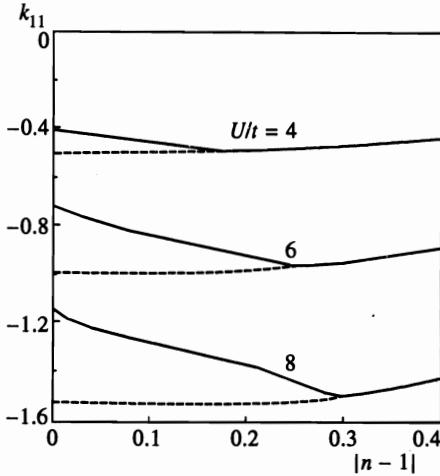


Рис. 3

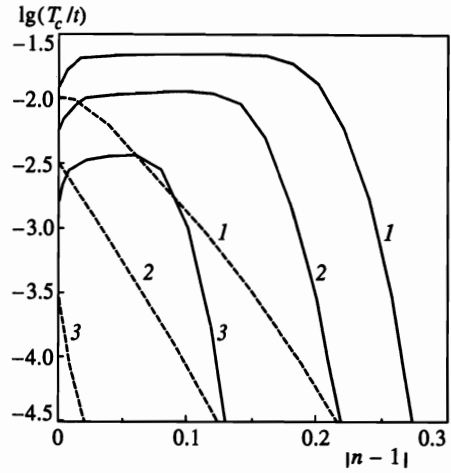


Рис. 4

Рис. 3. Величина главной константы k_{11} сверхпроводящего порядка d -симметрии в среднем от эффективного гамильтониана (10), (11) в зависимости от степени допирования для антиферромагнитных либо парамагнитных состояний валентных связей для $U/t = 4, 6, 8$. Штриховые линии отвечают парамагнитным решениям в области, где нижшим по энергии является антиферромагнитное состояние

Рис. 4. Зависимость логарифма критической температуры T_c от степени допирования. Сплошные либо штриховые кривые отвечают антиферромагнитным либо парамагнитным состояниям валентных связей. Кривые 1, 2, 3 соответствуют значениям $U/t = 8, 6, 4$

ми, центрированных вокруг точки $\Gamma(0,0)$, в сканирующем варианте ARPES [30]. Другие аргументы в пользу широкой области антиферромагнитного порядка CuO_2 -плоскостей приводятся в [31] и служат основой самой последней теории сверхпроводимости [32].

В рамках метода среднего поля мы не можем рассчитать ни радиус R_{AF} области, в которой ось квантования антиферромагнитно чередующихся спинов сохраняет свое направление, ни динамику флуктуаций этой оси. Но энергетика процесса (см. рис. 1) заставляет предполагать, что этот размер много больше постоянной решетки ($R_{AF} \gg a$). Поэтому, с точки зрения короткорadiusных корреляций типа валентных связей и притяжения дырок, индуцируемого образованием валентных связей соседних узлов, мы можем принять гипотезу о реальности «двумерного антиферромагнетизма» CuO_2 -плоскостей в широкой области допирования, в отличие от малой области существования объемного антиферромагнетизма в купратах.

Из рис. 2б видны характерные величины оптимального параметра преобразования α . Он зависит в основном от U/t и слабо меняется с изменением n . Из зависимости $\alpha(U)$ следует, что разложением (6) можно пользоваться вплоть до $U/t \leq 8$.

Перейдем к главной цели работы — изучению возможности сверхпроводящего порядка d -симметрии. Ввиду быстрого убывания аномальных средних w_l с ростом l показательными являются уже знак и величина коэффициента k_{11} в главном вкладе $[k_{11}w_1^2]$ в сверхпроводящую часть (18) средней энергии (16). На рис. 3 представлены зависимости коэффициента k_{11} от допирования для ряда значений U/t для антиферромаг-

нитных или парамагнитных состояний валентных связей. Данные для парамагнитных состояний, сильно невыгодных по энергии, приведены лишь с одной целью: убедиться, что причиной притяжения дырок ($k_{11} < 0$) являются не далекие антиферромагнитные корреляции, а корреляции типа валентных связей. В частности, $k_{11} = 0$ при $\alpha = 0$. Для парамагнитных состояний коэффициент k_{11} также отрицателен и даже больше по абсолютной величине. Тем не менее из-за разницы в плотностях состояний на границе Ферми только в антиферромагнитном состоянии имеется достаточно широкая область допирования, в которой система характеризуется большой сверхпроводящей щелью и высокой температурой перехода T_c .

Критическая температура $T_c(U, \delta)$ сверхпроводящего перехода вычисляется из уравнения (30) как момент появления аномальных средних w_l на фоне нормального состояния AF + VB. Значения T_c совпадают с температурой исчезновения сверхпроводящей щели $2\Delta(T)$ и аномальных средних в полном расчете. На рис. 4 приведены зависимости логарифма $\lg T_c(n)$ от степени допирования для $U/t = 8$ и 6. Вся область существования сверхпроводимости находится внутри области антиферромагнитного порядка, т. е. ниже границы $\delta_c(U/t)$ между состояниями AF + VB и PM + VB на рис. 2а.

В то же время аналогичные зависимости $\lg T_c(n)$ для парамагнитных состояний резко убывают при $T_c \rightarrow 0$ уже при очень малом допировании. Это связано с тем, что плотность одноэлектронных состояний соответствующей эффективной линейаризованной задачи велика лишь в очень узкой области вблизи особенности Ван-Хова при $k = (0, \pm\pi)$, $(\pm\pi, 0)$. Напротив, для антиферромагнитных состояний связанное со спиновым чередованием расщепление исходной зоны на две приводит к значительному расширению области с большой плотностью состояний вблизи $(0, \pi)$ и, как следствие, к расширению области высокой температуры сверхпроводящего перехода (см. плато на кривых рис. 4).

Остается вопрос, который не может быть решен в рамках метода среднего поля: существует ли другой, помимо антиферромагнитного удвоения ячейки, механизм расщепления исходной зоны на верхнюю и нижнюю хаббардовские зоны, который также расширял бы области плоских участков спектра вблизи границы Ферми. По существу, тот же вопрос вставал при обсуждении противоречий между границами исчезновения «двумерного» антиферромагнитного порядка в наших расчетах и объемного антиферромагнетизма реальных купратов.

Вернемся к свойствам полученного состояния со сверхпроводящим порядком $d_{x^2-y^2}$ -симметрии, обязанным корреляциям типа валентных связей. На рис. 5 представлены зависимости сверхпроводящей щели $2\Delta(T)$ от температуры для ряда параметров модели. Отношение $\xi = 2\Delta(0)/kT_c$ меняется в пределах $4.5 \div 3.9$ для $U/t = 8$ вместо значения 3.5 в теории БКШ. Найденные значения отношения ξ меньше значений $\xi = 2\Delta(0)/kT_c \sim 10 \div 12$, полученных в приближениях типа самосогласованных методов спектральных функций [33–35] или функций Грина [36]. Наблюдаемое в разных экспериментах отношение ξ сильно анизотропно и зависит от z -компоненты квазиимпульса, при этом величина, относящаяся к ab -плоскости купратов, варьируются в пределах $\xi \sim 5 \div 7$ [29, 37].

Таким образом, согласно расчетам среднего поля для $\tilde{H}(\alpha)$ область сверхпроводимости d -симметрии лежит внутри области «двумерного» (или скрытого) антиферромагнитного спинового порядка, найденной в том же приближении. Как уже отмечалось, эта область в нашем подходе в проекции на реальные объекты может отвечать области далеких спиновых корреляций, но не обязательно настоящего дальнего порядка. На

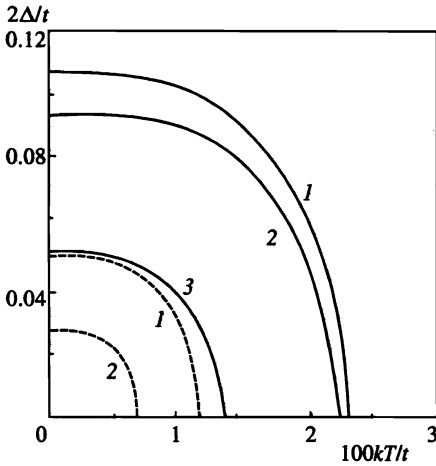


Рис. 5. Величина сверхпроводящей щели $2\Delta(T)$ как функция температуры для $U/t = 8$ (сплошные кривые) либо $U/t = 6$ (штриховые кривые). Кривые 1, 2, 3 соответствуют степеням допирования $|n - 1| = 0.1, 0.15, 0.2$

рис. 2а штриховая линия отвечает границе области сверхпроводимости по допированию при температуре $kT = 0.002t$. Заметим, что при $U/t = 8$ максимальная критическая температура равна $kT_c = 0.023t$. Соответствующая ей величина щели равна $2\Delta(0) = 0.107t$, что при оценке $t \sim 0.5$ эВ [14] составляет $2\Delta(0) = 53$ мэВ при $kT_c = 133$ К.

Неожиданный результат расчета — сохранение большой величины анизотропной щели d -симметрии в широкой области допирования вплоть до очень малых значений $\delta = |n - 1| \sim 0.03 \div 0.04$ при $U/t = 6 \div 8$. Для исходной модели Хаббарда переход к диэлектрическому состоянию $T_c = 0$ при $n \rightarrow 1$ происходит лишь при сверхмалом допировании, когда химический потенциал приподнимается над краем нижней хаббардовской зоны и величина $\delta = |n - 1|$ определяется хвостом функции распределения. В области $\delta > 0.05$ величины T_c и $2\Delta(0)$ остаются постоянными или даже увеличиваются при уменьшении δ . Это противоречит фазовой диаграмме реальных купратов [10], где температура $T_c(\delta)$ резко убывает при уровне допирования меньшем оптимального значения δ_{opt} , отвечающего максимуму T_c .

Можно по-разному интерпретировать указанное противоречие.

Можно пытаться использовать аргументы работ [38, 39]. В них предполагается существование состояний с отличными от нуля аномальными средними и анизотропной щелью, которые из-за квантовых флуктуаций не обладают фазовой когерентностью дальнего порядка и не проявляют сверхпроводящих свойств. Такая гипотеза выдвигалась при попытке согласовать отсутствие сверхпроводимости и наличие анизотропной псевдощели нормального состояния «недопированных» образцов. Более конструктивным, однако, представляется поиск реальных взаимодействий, подавляющих сверхпроводящий порядок при малом допировании.

Предположим, что причина такого поведения системы связана с идеальностью самой модели (1), с учетом в исходной модели Хаббарда взаимодействий, нарушающих совершенный нестинг. Например, мы не учитывали прыжкового взаимодействия t' ближайших (диагональных) соседей. Мы не учитывали также подобное кулоновское взаимодействие частиц на разных центрах. Особый интерес к взаимодействию t' связан с несколькими причинами. Во-первых, оно не нарушает совершенный нестинг недопированных систем, но очень сильно влияет на форму поверхности Ферми

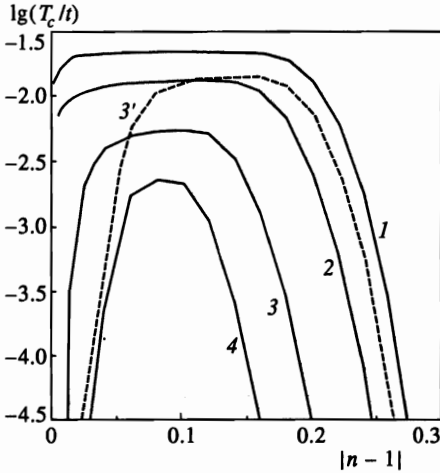


Рис. 6

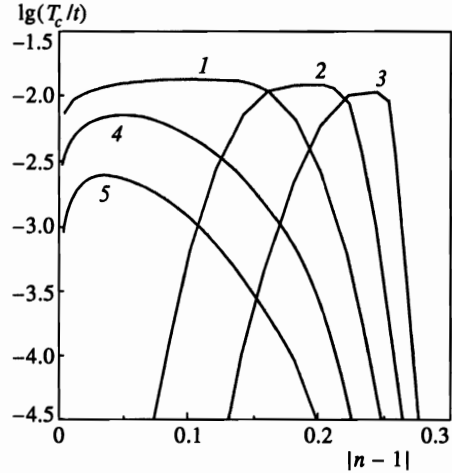


Рис. 7

Рис. 6. Зависимость логарифма критической температуры T_c от степени допирования для расширенной модели Хаббарда (31) с $U/t = 8$, $t' = 0$ и различной величиной параметра V взаимодействия частиц соседних центров. Сплошные кривые 1, 2, 3, 4 соответствуют значениям $V/t = 0, 0.1, 0.2, 0.25$. Штриховая кривая — расчет для $U/t = 10$, $V/t = 0.2$, $t' = 0$

Рис. 7. Влияние параметра t' на фазовую кривую $T_c(\delta)$ для расширенной модели (31) при $U/t = 8$, $V/t = 0.1$. Кривые 1, 2, 3 соответствуют значениям $t'/t = 0, 0.05, 0.1$, кривые 4, 5 — отрицательным значениям $t'/t = -0.05, -0.1$

из-за очень плоских зон. Во-вторых, величина и даже знак t' зависят от материала из-за конкуренции двух каналов таких диагональных прыжков в CuO_2 -плоскости — через прямое взаимодействие t_{pp} кислородных орбит и через процесс второго порядка по $p-d$ -гибридизации. Поэтому сравнительный анализ влияния t' в разных купратах может быть принципиальным [26].

В связи со сказанным мы провели самосогласованные расчеты фазовой диаграммы и некоторых характеристик системы с эффективным гамильтонианом расширенного вида:

$$H_{eff}(\alpha) = \tilde{H}(\alpha, U, t) + V \sum_{\langle nm \rangle} n_n n_m + t' \sum_{\langle\langle nm \rangle\rangle} \sum_{\sigma} (c_{n\sigma}^{\dagger} c_{m\sigma} + \text{H.c.}), \quad (31)$$

т. е. к прежнему эффективному гамильтониану (6) добавлено подобное кулоновскому взаимодействию ближайших соседних ячеек V и прыжковое взаимодействие t' между соседними диагональными узлами $\langle\langle nm \rangle\rangle$ с $|n - m| = \sqrt{2}$. Простоты ради для качественной оценки эффекта включены лишь нулевые по α порядки каждого из этих взаимодействий.

На рис. 6 представлены зависимости T_c от уровня допирования для $V = 0 \div 0.25t$. Кулоновское взаимодействие соседних центров действительно разрушает сверхпроводящий порядок при малом допировании и одновременно понижает максимальную температуру перехода T_c . В частности, для $V = 0.2t$, $U/t = 8$ и $|n - 1| = 0.1$ величина T_c

снижается до значения $T_c = 0.0057t$. При оценке $t \sim 0.5$ эВ [14] это отвечает $T_c \sim 30K$, что ниже средних наблюдаемых значений $T_c^{max} \sim 100K$. Последнее значение отвечало бы скорее $U/t \sim 10$ при $V/t = 0.2$ (см. штриховую кривую на рис. 6), хотя при таком U параметр преобразования $\alpha \sim 0.27$ уже не мал. Эффект понижения T_c с ростом V понятен. К главной константе сверхпроводящего порядка — к коэффициенту k_{11} при w_1^2 в средней энергии — добавляется постоянное положительное приращение $\Delta k_{11} = 4V$. Исчезновение сверхпроводящего порядка при малом допировании можно связать с уменьшением корреляционного притяжения $k_{11} \approx -8\alpha U\tau_1 + 4V$ с уменьшением τ_1 в ходе антиферромагнитной локализации дырок при $n \rightarrow 1$.

Рисунок 7 демонстрирует очень сильное влияние взаимодействия t' диагональных прыжков на форму зависимости $T_c(\delta)$. Это влияние различно при разных знаках t' .

При $t' > 0$ зависимость $T_c(\delta)$ подобна наблюдаемой — с резким убыванием T_c с двух сторон от оптимального уровня допирования δ_{opt} . С ростом t' величина δ_{opt} смещается в сторону больших значений при неизменной максимальной температуре перехода $T_c(\delta_{opt})$. Такое поведение становится понятным, если учесть, что при $t' \neq 0$ энергия $E_1(k)$ нижней хаббардовской зоны вдоль границы $|k_x \pm k_y| = \pi$ магнитной зоны Бриллюэна не постоянна:

$$E_1(k) - E_1(\pi, 0) = 4t'(\cos k_x \cos k_y + 1).$$

Заметим, что хотя граница магнитной зоны Бриллюэна в диэлектрическом недопированном случае — это лишь линия минимальной диэлектрической щели, тем не менее в фотоэмиссионных спектрах ARPES она проявляется как размытая граница Ферми в силу разной интенсивности фотоэмиссии в основной и расширенной зонах Бриллюэна, несмотря на одинаковые зонные энергии при антиферромагнитном удвоении элементарной ячейки.

Знаменательно, что при $t' > 0$ и дырочном допировании именно при оптимальном уровне допирования (при максимальной T_c) самый плоский участок нижней хаббардовской зоны выходит на поверхность Ферми:

$$E_1(\pi, 0) - \mu = 0 \quad \text{при} \quad \delta = \delta_{opt}, \quad n < 1.$$

На рис. 8 представлены зависимости зонной энергии $[E_1(k) - \mu]$ относительно химического потенциала в двух точках $k = (\pi, 0)$ и $k = (\pi/2, \pi/2)$ границы магнитной зоны Бриллюэна. При $t' = 0$ эти энергии почти совпадают, так что при допировании открывается сразу «большая» поверхность Ферми, центрированная в точке $\Gamma(0,0)$, и соответствующая теневая поверхность Ферми вокруг точки $Y(\pi, \pi)$. При $t' \neq 0$ эволюция границы Ферми при допировании оказывается качественно другой. При $t' > 0$ имеем

$$E_1(\pi/2, \pi/2) - E_1(\pi, 0) \sim 4t' > 0.$$

Значит, при малом допировании, $\delta < \delta_{opt}$, открывается «малая» поверхность Ферми в виде карманов вокруг точки $(\pi/2, \pi/2)$, в то время как участки $k \sim (\pi, 0)$ с наибольшей плотностью состояний остаются ниже границы Ферми. Только при оптимальном допировании, $\delta = \delta_{opt}$, происходит пересечение границей Ферми точки $(\pi, 0)$, после чего поверхность Ферми превращается в «большую». Если учесть, что участки границы магнитной зоны Бриллюэна, т.е. диэлектрические участки, воспринимаются в экспериментах ARPES как размытые границы Ферми, то и при малом допировании эксперимент ARPES может быть интерпретирован в терминах обобщенной «большой»

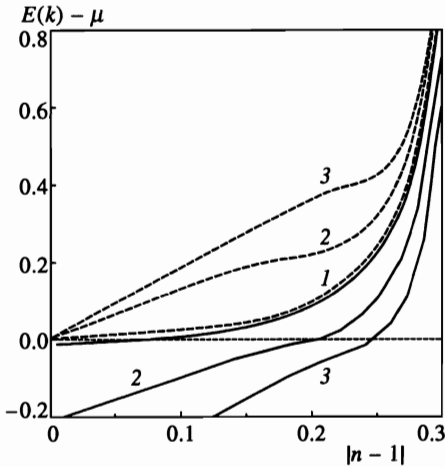


Рис. 8. Зонная энергия $E(k) - \mu$, отсчитанная от химического потенциала, в двух точках границы магнитной зоны Бриллюэна — при $k = (\pi, 0)$ (сплошные кривые) и при $k = (\pi/2, \pi/2)$ (штриховые кривые) для модели $U/t = 8$, $V/t = 0.1$ и различных t' . Кривые 1, 2, 3 соответствуют значениям $t'/t = 0, 0.05, 0.1$ и фазовым кривым 1, 2, 3 на рис. 7

поверхности Ферми, составленной из диэлектрических участков границы и нетеневых (по интенсивности) металлических участков «малой» поверхности Ферми.

В такой картине обнаруженная в последние годы [7, 8] псевдощель в нормальном состоянии недодопированных (underdoped) образцов $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ есть ничто иное, как энергия $|E_1(\pi, 0) - \mu|$, необходимая для выбивания электронов из участков $k \sim (\pi, 0)$ с наибольшей плотностью состояний. В недодопированной области эти участки фазового пространства потоплены ниже уровня Ферми и, следовательно, заселены. В случае $\delta > \delta_{opt}$ (overdoped region) эти участки спектра выше уровня Ферми и не заселены. Более подробные расчеты и сопоставления фотоэмиссионных спектров — предмет отдельного исследования.

Системы с другим знаком взаимодействия, $t' < 0$, обнаруживают совершенно другое поведение фазовой кривой $T_c(\delta)$ (см. рис. 7) и границы Ферми. С ростом $|t'|$ область сверхпроводимости d -симметрии остается достаточно широкой и смещается в область меньшего допирования. Одновременно с ростом $|t'|$ происходит уменьшение максимальной температуры перехода. Сдвиг области сверхпроводимости в сторону меньшего допирования и убывание T_c при $t' < 0$ требуют объяснения. Простейшая гипотеза состоит в предположении возможного сокращения области «двумерного» антиферромагнетизма и, как следствие, сдвига области сверхпроводимости. Однако эта гипотеза не проходит: область антиферромагнитного порядка практически не меняется при изменении t' в пределах $(-0.1 \div 0.1)$. Это видно из рис. 9, где приведены результаты для чередующейся спиновой плотности d_0 самосогласованных решений AF + VB. Поэтому опять обратимся к деталям хаббардовских зон и поверхности Ферми.

При $t' < 0$ энергия $E_1(k)$ в наиболее плоских участках $k \sim (\pi, 0)$ нижней хаббардовской зоны не пересекает, а лишь приближается к уровню Ферми μ (см. рис. 10). Увеличение наклона кривых $\partial E_1(k, \delta) / \partial \delta|_{k=(\pi, 0)}$ с увеличением $|t'|$ при $t' < 0$ отвечает уменьшению эффективной плотности состояний и величины T_c . Из того же рис. 10 следует, что при $t' < 0$ и некотором допировании $\delta^* = \delta^*(t')$ имеет место пересечение уровня Ферми и зонной энергии в точке $k = (\pi/2, \pi/2)$. Но области вблизи $k \sim (\pi/2, \pi/2)$ не участвуют в создании сверхпроводящего порядка $d_{x^2-y^2}$ -симметрии, так как на линиях $k_x = \pm k_y$ щель равна нулю. Поэтому значение δ^* , при котором $E_1(k) - \mu = 0$ в точке

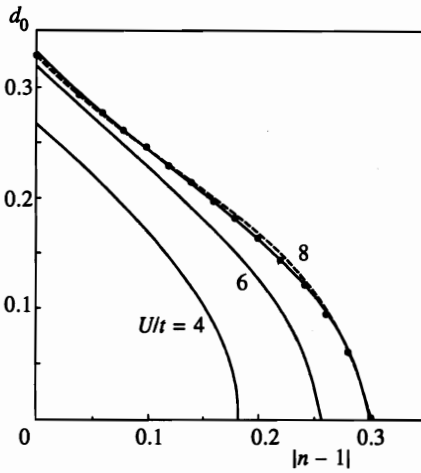


Рис. 9

Рис. 9. Зависимость величины чередующейся спиновой плотности d_0 от допирования для $U/t = 4, 6, 8, V = 0$ и $t' = 0$ (сплошные кривые). Штриховая кривая и точки соответствуют $U/t = 8, V/t = 0.1$ и $t'/t = 0.1$ и -0.1

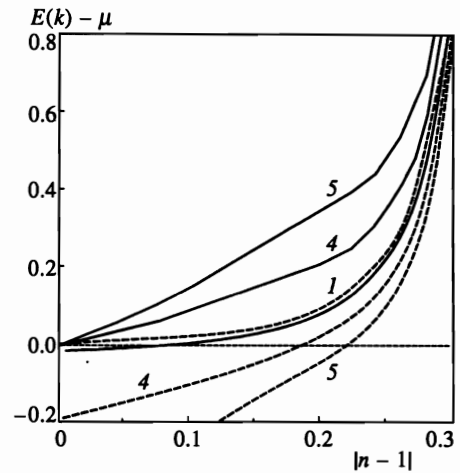


Рис. 10

Рис. 10. То же, что на рис. 8, но для $t' \leq 0$: кривые 1, 4, 5 соответствуют значениям $t'/t = 0, -0.05, -0.1$ и фазовым кривым 1, 4, 5 на рис. 7

$k = (\pi/2, \pi/2)$, никак не соотносится с максимумом T_c при $t' < 0$. При отрицательном t' качественно другой характер имеет и поверхность Ферми. При малом допировании, $\delta < \delta^*$, обобщенная граница Ферми состоит из диэлектрических участков границы магнитной зоны Бриллюэна в областях $k \sim (\pi/2, \pi/2)$ и металлических участков «малой» поверхности Ферми вокруг точек $(\pi, 0)$. Обсуждаемые результаты относятся к состоянию с определенной структурой валентных связей, а именно, с образованием валентных связей соседних узлов, которое индуцирует сверхпроводимость $d_{x^2-y^2}$ -симметрии. При $t' > 0$ такая картина дает разумное объяснение фазовой кривой $T_c(\delta)$ и явления анизотропной псевдощели. Однако в случае $t' < 0$ предсказания расчета и наблюдаемой фазовой диаграммы расходятся, хотя этот случай, похоже, реализуется в системе $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. На последнее указывает интерпретация особенностей неупругого нейтронного рассеяния при $\omega \rightarrow 0$ [40, 41]. Расхождение фазовых кривых для $t' < 0$ ставит вопрос: возможно ли образование других структур валентных связей и (или) возможна ли другая симметрия сверхпроводящего спаривания.

4. ВЫВОДЫ

В заключение отметим следующее.

1. Унитарное преобразование, отвечающее учету корреляций типа валентных связей, позволяет получить модельный гамильтониан, в котором прыжки модулируются заселенностями центров, аналогично модели Хирша [22]. Именно такая модуляция

прыжков обеспечивает притяжение дырок в d -канале, но в отличие от [22] параметры взаимодействия определяются вариационно. В отличие от $t - J$ -модели с запретом двукратного заселения узлов полученный эффективный гамильтониан можно обрабатывать в приближении среднего поля.

2. Выигрыш энергии при малом допировании обеспечивают удвоение решетки через спиновые чередования, а также образование валентных связей соседних узлов. Открытыми остаются вопросы о происхождении небольшого отличия энергии от результатов, полученных для конечных систем, и об эффективности других возможных типов корреляций, не включенных в наше рассмотрение.

3. Механизм притяжения дырок вследствие модуляции прыжков заселенностями центров при образовании валентных связей не сводится к обмену антиферромагнитными флуктуациями, широко обсуждаемыми [42, 43] в качестве причины притяжения. Эффективные константы притяжения определены из вариационного расчета и оказываются близки как для антиферромагнитного, так и для парамагнитного состояний валентных связей. Вместе с тем оказывается, что только при антиферромагнитном расщеплении исходной зоны плотность уровней на границе Ферми достаточно высока, чтобы приводить к заметной величине сверхпроводящей щели и температуры перехода $2\Delta(0) \approx 4.5$, $kT_c \leq 0.023t$ при $U/t \leq 8$.

4. Для классической модели Хаббарда $H(U, t)$ сверхпроводящий порядок $d_{x^2-y^2}$ -симметрии проявляется в широкой области допирования, которая простирается вплоть до $n \rightarrow 1$ и лежит внутри области «двумерного» (или скрытого) антиферромагнетизма. Это противоречит фазовой диаграмме реальных купратов.

5. Расчеты, проведенные для обобщенной модели Хаббарда, показали очень высокую чувствительность фазовой кривой $T_c(\delta)$ и поверхности Ферми к величине и знаку прыжкового взаимодействия t' ближайших соседей. При $t' > 0$ установлено совпадение оптимального уровня допирования δ_{opt} с тем допированием, при котором энергия наиболее плоских участков нижней хаббардовской зоны при $k \sim (\pi, 0)$ пересекает уровень Ферми. При этом анизотропная псевдощель нормального состояния недопированных образцов должна ассоциироваться с энергией $|E(\pi, 0) - \mu|$ погружения нижней зоны в области $k \sim (\pi, 0)$ относительно уровня Ферми.

Выполнение работы оказалось возможным благодаря поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты 7-03-33727А и 96-15-97492). Авторы благодарны также В. Я. Кривнову за полезные обсуждения и Р. О. Зайцеву за конструктивные и полезные замечания.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Оператор $H^{(2)}$ при $\alpha^2/2$ в эффективном гамильтониане (6) равен

$$H^{(2)} = H_U^{(2)} + T^{(2)}, \quad (32)$$

$$H_U^{(2)} = -U \sum_{\langle nm \rangle} \left\{ R(n, m) + \sum_{m_i} Q(n, m, m_i) + \sum_{n_i} Q(m, n, n_i) \right\}. \quad (33)$$

В последних трехузельных членах суммирование ведется по $m_i \in \langle mm_i \rangle$, $m_i \neq n$ и $n_i \in \langle nn_i \rangle$, $n_i \neq m$, а операторы R и Q равны

$$R(n, m) = \Delta_{nm\uparrow}\Delta_{nm\downarrow} + j_{nm\uparrow}j_{nm\downarrow}, \quad (34)$$

$$Q(n, m, m_i) = -\frac{1}{4} \sum_{\sigma} \{t_{nm_i\sigma}\Delta_{nm, -\sigma}^2\Delta_{mm_i, -\sigma} + (c_{n\sigma}^{\dagger}c_{m\sigma}c_{m_i, -\sigma}^{\dagger} + \text{H.c.}) - t_{nm\sigma}t_{mm_i, -\sigma}(n_{n, -\sigma} + n_{m_i\sigma} - 2n_{n, -\sigma}n_{m_i\sigma})\}, \quad (35)$$

$$T^{(2)} = -t \sum_{\sigma, (nn')} \{[2c_{n\sigma}^{\dagger(1)}c_{n'\sigma}^{(1)} + c_{n\sigma}^{\dagger(2)}c_{n'\sigma} + c_{n\sigma}^{\dagger}c_{n'\sigma}^{(2)}] + \text{H.c.}\}, \quad (36)$$

$$c_{n\sigma}^{(1)} = -\frac{1}{2} \sum_{m \in (nm)} (c_{n\sigma}j_{nm, -\sigma} + c_{m\sigma}\Delta_{nm, -\sigma}), \quad (37)$$

$$c_{n\sigma}^{(2)} = \sum_{m \in (nm)} \{L(n, m) + \sum_{m_i} M(n, m, m_i) + \sum_{n_i} N(n, m, n_i)\}. \quad (38)$$

В трехузельных вкладах суммирование ведется соответственно по $m_i \in \langle mm_i \rangle$, $m_i \neq n$ и $n_i \in \langle nn_i \rangle$, $n_i \neq m$, а операторы в (38) равны

$$L(n, m) = -\frac{1}{2}[c_{m\sigma}(1 - 2n_{n\sigma})t_{nm-\sigma} + c_{n\sigma}\Delta_{nm-\sigma}^2],$$

$$M(n, m, m_i) = \frac{1}{4}[c_{n\sigma}j_{mm_i\sigma}t_{nm-\sigma} + c_{m_i\sigma}\Delta_{nm-\sigma}\Delta_{nm_i-\sigma} + c_{n\sigma}\Delta_{mm_i\sigma}j_{nm_i-\sigma} + c_{m\sigma}\Delta_{nm-\sigma}j_{mm_i-\sigma} + c_{m\sigma}n_{m_i\sigma}t_{mm_i-\sigma}], \quad (39)$$

$$N(n, m, n_i) = \frac{1}{4}[c_{n_i\sigma}j_{nm-\sigma}\Delta_{nn_i-\sigma} + c_{n_i\sigma}n_{n\sigma}t_{nm-\sigma} + c_{n\sigma}j_{nm-\sigma}j_{nn_i-\sigma} + c_{n\sigma}n_{n_i\sigma}j_{mn_i-\sigma} + c_{m\sigma}\Delta_{nn_i\sigma}t_{nn_i-\sigma}]. \quad (40)$$

Операторы $j_{nm\sigma}$, $\Delta_{nm\sigma}$, $t_{nm\sigma}$ определены формулами (4), (11).

Вычисление средних от (33) и (36) в расчете на 1 узел решетки дает

$$\langle H^{(2)} \rangle = [\mathcal{H}_U^{(2)} + \mathcal{S}^{(2)}]_{|w=0} + \sum_{ij} k_{ij}^{(2)} w_i w_j, \quad (41)$$

$$\mathcal{H}_U^{(2)} = 4U \left\{ 2d_0^2 + 3r_1^2[(1 - 2r_0)^2 - 4d_0^2] + (\bar{r}_\nu - 2\bar{\phi}_{\nu 0})[r_0(1 - r_0) + d_0^2 + 6r_1^2] + [\bar{d}_\nu d_0 + 8r_1^2 \bar{\phi}_\nu + \bar{r}_\nu \bar{\phi}_\nu - 2\bar{\phi}_\nu \bar{\phi}_{\nu 0}] \right\}, \quad (42)$$

$$\begin{aligned} \phi_0 &= r_0^2 - d_0^2 - r_1^2, & \phi_l &= r_l^2 - d_l^2, & \phi_{0l} &= r_0 r_l - d_0 d_l, \\ f_0 &= r_0^2 + d_0^2, & f_l &= r_l^2 + d_l^2, & \phi_{l,l'} &= r_l r_{l'} - d_l d_{l'}. \end{aligned} \quad (43)$$

Любая из величин $\overline{A_\nu} = \{\bar{r}_\nu, \bar{d}_\nu, \bar{\phi}_\nu, \bar{\phi}_{0\nu}, \bar{f}_\nu, \bar{r}_\nu \bar{\phi}_\nu, \bar{\phi}_\nu \bar{\phi}_{\nu 0}\}$ означает

$$\overline{A_\nu} = 2A_\nu \sqrt{2} + A_2$$

С учетом этих обозначений получаем

$$\begin{aligned} \mathcal{F}^{(2)} = & -4t \left\{ r_1[-51r_0(1-r_0) - 93(d_0^2 + 2r_1^2) - 18(\bar{r}_\nu - 2\bar{\phi}_{0\nu}) + \right. \\ & + 5\bar{f}_\nu + 6f_{\sqrt{2}} + 2(4\phi_{\sqrt{2}} + 4\phi_{2,\sqrt{2}} + \phi_2) + 6(\bar{r}_\nu)^2 + 2(\bar{d}_\nu)^2 - 8d_0\bar{d}_\nu] + \\ & \left. + (r_3 + 6r_{\sqrt{5}})[-r_0(1-r_0) - 7d_0^2 - 10r_1^2] + 6r_{\sqrt{5}}\bar{f}_\nu + 3r_3f_2 \right\}. \end{aligned} \quad (44)$$

Вклад в среднюю энергию (16) от аномальных параметров порядка, вычисленный в квадратичном по w_l приближении, в расчете на один узел решетки равен

$$\overline{\mathcal{H}}^{SC} = [-8\alpha U r_1] w_1^2 + \alpha^2 [S_U + S_T], \quad (45)$$

$$\begin{aligned} S_U = U \left\{ 4w_1^2[2r_0(1-r_0) + \bar{r}_\nu(1-2r_0) + 2d_0\bar{d}_\nu + 4d_{\sqrt{2}}^2 - 2d_2^2] + \right. \\ \left. + 8w_1w_2[r_1(1-2r_0)] + 2w_2^2[r_2(1-2r_0) + 8r_1^2 - 2d_0d_2] \right\}, \end{aligned} \quad (46)$$

$$\begin{aligned} S_T = -2t \left\{ w_1^2[-34r_1 - 18r_{\sqrt{5}} - 3r_3] + w_2^2[r_1 + 8r_{\sqrt{5}} + 3r_3] + \right. \\ \left. + w_{\sqrt{5}}^2[-6r_{\sqrt{5}}] + w_3^2[-r_3] + w_1w_5[4r_1] + w_1w_3[2r_1] \right\}. \end{aligned} \quad (47)$$

Матрица $D_{i,j} = \partial w_i / \partial w_j$ при $w_l = 0$ в уравнении (30) находится с использованием решений AF + VB и равна

$$D_{ij} = B_{i\nu} k_{\nu j},$$

где $k_{\nu j}$ — коэффициенты квадратичной формы $\mathcal{H}^{SC} = k_{\nu j} w_\nu w_j$ от аномальных средних в (18), а элементы матрицы B_{ij} выражаются через энергии $E_{1(2)}(k)$ верхней и нижней хаббардовских зон с антиферромагнитной щелью $2\Delta_k$ между ними

$$B_{\nu j} = -N^{-1} \sum_k^F R(l_\nu, l_j, k), \quad l_j = \{1, 2, \sqrt{5}, 3\}_j, \quad (48)$$

$$R(l, l', k) = q_l q_{l'} \left(\frac{1-2f_1}{2E_1} + \frac{1-2f_2}{2E_2} \right), \quad l, l' \neq 2,$$

$$R(2, 2, k) = q_2^2 \left[\cos^2 \gamma_k \left(\frac{1-2f_1}{2E_1} + \frac{1-2f_2}{2E_2} \right) + \sin^2 \gamma_k 2 \frac{1-f_1-f_2}{E_1+E_2} \right], \quad (49)$$

$$R(2, l, k) = R(l, 2, k) = q_l q_2 \cos \gamma_k \left(\frac{1-2f_1}{2E_1} - \frac{1-2f_2}{2E_2} \right), \quad l \neq 2.$$

Здесь $f_{1(2)}$ — фермиевские функции для энергий зон (отсчитанных от химического потенциала)

$$E_{1(2)}(k) = (\epsilon_k + \epsilon_{\bar{k}})/2 \mp \sqrt{(\epsilon_k - \epsilon_{\bar{k}})^2/4 + \Delta_k^2} - \mu, \tag{50}$$

величины γ_k , ϵ_k , и Δ_k определяются соответственно уравнением $\text{tg } \gamma_k = (\epsilon_k - \epsilon_{\bar{k}})/\Delta_k$ и выражениями (26). В отсутствие антиферромагнетизма и при одном аномальном параметре порядка уравнение для T_c принимает стандартный БКШ-вид, кроме дополнительного весового множителя $q_1^2(k)$ под суммами по k , соответствующего d -симметрии сверхпроводящего порядка. В этом случае два вклада от E_1 и E_2 с суммированием по k в половинной зоне Бриллюэна эквивалентны результату суммирования по всей зоне Бриллюэна для единой нерасщепленной зоны. В электронно- или дырочно-допированной системе в случае антиферромагнитного расщепления зоны лишь одна из подзон E_1 или E_2 реально определяет детерминант (30) и T_c .

Ввиду малости сверхпроводящей щели в сравнении с шириной зоны и антиферромагнитным расщеплением при решении полной задачи $AF + VB + SC$ можно без потери точности использовать приближенные выражения для собственных энергий \mathcal{E}_λ и собственных функций (28) линеаризованного гамильтониана (24). Они определяются приближенным решением уравнения (28):

$$\mathcal{E}_\lambda = \{\mathcal{E}_1, \mathcal{E}_2, -\mathcal{E}_1, -\mathcal{E}_2\}_\lambda, \tag{51}$$

$$\mathcal{E}_i = -\sqrt{(E_i - \mu)^2 + W_i^2}, \quad i = 1, 2,$$

$$S_{i\lambda}(k) = \begin{pmatrix} c_\varphi & s_\varphi & 0 & 0 \\ -s_\varphi & c_\varphi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c_\varphi & -s_\varphi \\ 0 & 0 & s_\varphi & c_\varphi \end{pmatrix}_{ij} \begin{pmatrix} c_1 & 0 & -s_1 & 0 \\ 0 & c_2 & 0 & -s_2 \\ s_1 & 0 & c_1 & 0 \\ 0 & s_2 & 0 & c_2 \end{pmatrix}_{j\lambda}. \tag{52}$$

Здесь

$$s_\varphi = \sin \varphi, \quad c_\varphi = \cos \varphi, \quad c_i = \cos \theta_i, \quad s_i = \sin \theta_i$$

$$\text{tg } 2\varphi = \frac{2\Delta_k}{\epsilon_k - \epsilon_{\bar{k}}}, \quad \text{tg } 2\theta_i = \frac{2W_i}{E_i - \mu}, \quad i = 1, 2,$$

$$W_{1(2)} = \frac{1}{2}[W_k + W_{\bar{k}} + \cos 2\varphi(W_k - W_{\bar{k}})].$$

Величины ϵ_k , Δ_k , W_k , $E_{1(2)}$ определены уравнениями (26), (50).

Литература

1. Z.-X. Shen and D. S. Dessau, Phys. Rep. **253**, 1 (1995).
2. J. W. Allen, R. Claessen, R. O. Anderson et al., in *The Physics of the Hubbard model*, ed. by D. K. Campbell, J.M.P. Carmelo and F. Guinea, Plenum Press, New York (1994).
3. T. E. Mason, G. Aeppli, S. M. Hayden et al., Phys. Rev. Lett. **71**, 919 (1993).
4. J. R. Kirtley, C. C. Tsuei, J. Z. Sun et al., Nature **373**, 225 (1995).

5. D. A. Brawner, C. Mancor, and H. R. Ott, *Phys. Rev.* **55**, 2788 (1997).
6. D. S. Marshall, D. S. Dessau, A. G. Loeser et al., *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4841 (1996).
7. A. G. Loeser, Z.-X. Shen, D. S. Dessau et al., *Science* **273**, 325 (1996).
8. H. Ding, T. Yokoya, J. C. Campuzano et al., *Nature* **382**, 51 (1996).
9. E. Dagotto, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 763 (1994).
10. D. J. Scalapino, *Phys. Rep.* **250**, 329 (1995).
11. E. Dagotto and T. M. Rice, *Science* **271**, 618 (1996).
12. Ю. А. Изюмов, УФН **167**, 465 (1997).
13. P. O. Зайцев, Письма ЖЭТФ **55**, 141 (1992); **56**, 355 (1992).
14. J. H. Jefferson, H. Eskes, and L. F. Feiner, *Phys. Rev. B* **45**, 7959 (1992).
15. H. B. Schuttler and A. J. Fedro, *Phys. Rev. B* **45**, 7588 (1992).
16. P. W. Anderson, *Science* **235**, 1196 (1987).
17. E. J. Mele, *Phys. Rev. B* **38**, 8940 (1988).
18. I. I. Ukrainskii, *Int. J. Quant. Chem.* **52**, 413 (1994).
19. А. А. Овчинников, М. Я. Овчинникова, ЖЭТФ **110**, 342 (1996).
20. А. А. Овчинников, М. Я. Овчинникова, ЖЭТФ **112**, 1409 (1997).
21. M. C. Gutzwiller, *Phys. Rev. A* **137**, 1726 (1965).
22. J. E. Hirsch, *Phys. Rev. Lett.* **54**, 1317 (1985).
23. E. Dagotto, A. Moreo, F. Ortolani et al., *Phys. Rev. B* **67**, 10741 (1992).
24. R. J. Radke and M. R. Norman, *Phys. Rev. B* **50**, 9554 (1994).
25. M. S. Hybertsen, E. B. Stechel, M. Schluter, and D. R. Jennison, *Phys. Rev. B* **41**, 11068 (1990).
26. D. Duffy and A. Moreo, *Phys. Rev. B* **52**, 15607 (1995).
27. U. Trapper, D. Ihle, and H. Fenke, *Phys. Rev. B* **52**, R11553 (1995).
28. G. Baumgartel, J. Schmalian, and K. H. Benemann, *Europhys. Lett.* **24**, 601 (1993).
29. Г. М. Элиашберг, в кн. *Физические свойства высокотемпературных сверхпроводников*, под ред. Д. М. Гинзберг, Мир, Москва (1990).
30. P. Aebi, J. Osterwalder, P. Schaller et al., *J. Phys. Chem. Solids* **56**, 1845 (1995).
31. N. Nagaosa, *Science* **275**, 1078 (1997).
32. S. C. Zhang, *Science* **275**, 1089 (1997).
33. N. E. Brickers and S. R. White, *Phys. Rev. B* **43**, 8044 (1991).
34. C.-H. Pao and N. E. Brickers, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 1870 (1997).
35. P. Monthoux and D. J. Scalapino, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 1874 (1997).
36. St. Lenck, J. P. Carbotte, and R. C. Dynes, *Phys. Rev. B* **50**, 10149 (1994).
37. M. C. Schabel, C. M. Park, A. Matsuura et al., *Phys. Rev.* **55**, 2796 (1997).
38. V. J. Emery and S. A. Kivelson, *Nature* **373**, 434 (1995).
39. S. Doniach and M. Inui, *Phys. Rev. B* **41**, 6668 (1990).
40. P. Benard, L. Chen, and A.-M. S. Tremblay, *Phys. Rev. B* **47**, 589 (1993).
41. Q. Si, Y. Zha, K. Levin, and J. P. Lu, *Phys. Rev. B* **47**, 9055 (1993).
42. D. Pines, *J. Phys. Chem. Solids* **56**, 1651 (1995).
43. P. Montoux and D. Pines, *Phys. Rev. B* **50**, 16015 (1994).