ЖЭТФ, 1999, том 115, вып. 2, стр. 649–674

ПСЕВДОЩЕЛЬ И СИММЕТРИЯ СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО ПОРЯДКА КУПРАТОВ

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

Институт химической физики Российской академии наук
117977, Москва, Россия

Поступила в редакцию 16 июня 1998 г.

Фазовая диаграмма, природа псевдощели в нормальном состоянии, типы поверхности Ферми и поведение сверхпроводящей щели в различных купратах обсуждаются в терминах коррелированного состояния с образованием валентных связей. Вариационное коррелированное состояние — зонный аналог состояний резонирующих валентных связей Андерсона — строится с помощью унитарных локальных преобразований. Образование валентных связей приводит к притяжению дырок в d-канале и соответствующей сверхпроводимости, совместимой с антиферромагнитным спиновым порядком. Расчеты выявили достаточно широкую (по допированию) область антиферромагнитного порядка отдельных CuO_2-плоскостей. Форма поверхности Ферми и фазовой кривой оказываются очень чувствительными к величине и знаку прыжкового взаимодействия t' между соседними по диагонали узлами. Для недодопированных образцов диэлектризация различных участков границы Ферми в зависимости от знака t' приводит к появлению псевдощели в фотоэмиссионных спектрах при разных направлениях квазиимпульса. В частности, для керамик на основе висмута и иттрия ($t' > 0$) переход от нормального состояния сверхдопированных образцов к псевдощелевому режиму недодопированных образцов с одновременным достижением максимума T_c отвечает началу диэлектризации границ зоны вблизи $\mathbf{k} = (0, \pi)$ с переходом от «большой» к «малой» поверхности Ферми. Пересмотрена гипотеза об s-сверхпроводимости керамик на основе La и Nd: предсказана ситуация, когда при той же d-симметрии сверхпроводящего порядка энергия Ферми возбуждений не обращается в нуль ни в одной точке фазового пространства в силу диэлектризации границы Ферми в направлениях $k_x = \pm k_y$. Модель с орторомбическими искажениями и двумя максимумами на зависимости T_c от степени допирования обсуждается в связи с наблюдениями в иттриевой керамике.

1. ВВЕДЕНИЕ

В последние годы получен ряд важных результатов, касающихся электронной структуры ВТСП (см. обзоры [1–6]). Среди них доказательство d-симметрии сверхпроводящего порядка ряда купратов [7, 8], обнаружение таких явлений как «малая» поверхность Ферми [9], псевдощель в нормальном состоянии [10, 11] недодопированных образцов, характерные резонансы в неупругом нейтронном рассеянии. Единое описание этих явлений и их связь с фазовой диаграммой и магнитными свойствами — задача теории.

Теоретические исследования сильнокоррелированных систем (методы локализованных подходов, расчеты конечных кластеров, зонные расчеты) выявили наиболее важные типы корреляций слабо допированных систем [1, 2]: антиферромагнитное спиновое чередование и короткорадиусные корреляции типа образования валентных связей. Первое достаточно хорошо описывается как в локализованном подходе, так и

*E-mail: movchin@center.chph.ras.ru

зонными методами среднего поля в решениях с удвоенной магнитной элементарной ячейкой. Важная роль антиферромагнитных корреляций признается и в последних работах [12, 13]. Идея корреляционной природы сверхпроводящего спаривания, которая выдвигалась и обосновывалась во многих работах [14, 15], остается привлекательной. Согласно [16, 17] именно образование валентных связей является источником притяжения дырок в d-канале и причиной сверхпроводимости d-симметрии. Одним из тестов теории должна быть ее способность объяснить анизотропную псевдощель в нормальном состоянии недодопированных образцов. В предварительных интерпретациях [10, 11] анизотропия псевдощели отождествлялась с анизотропией сверхпроводящей щели d-симметрии. Поэтому появление ее считалось предвестником сверхпроводимости в недодопированном режиме. В наших работах [16, 17] высказана другая точка зрения на природу псевдощели, связывающая ее со структурой нижней хаббардовской зоны.

В настоящей работе продолжены исследования псевдощели, предложена наглядная и количественная интерпретация фазовой диаграммы и некоторых спектральных свойств купратов в терминах вариационного коррелированного состояния, учитывающего как антиферромагнитные корреляции, так и корреляции типа валентных связей. Предложена классификация купратов по типу поверхности Ферми и типу анизотропии псевдощели в нормальном состоянии в недодопированном режиме. Обсуждаются эксперименты, которые могли бы служить тестом для предложенной картины. В частности, аргументируется гипотеза о d-симметрии сверхпроводимости для всех купратов, включая соединения $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ (LSCO) и $Nd_{2-x}Ce_xCuO_{4-y}$ (NCCO), которые принято считать стандартными сверхпроводниками s-типа.

Резонирующие валентные связи (RVB), впервые введенные Андерсоном [18], означали, что конфигурации системы состоят из синглетных компонент двух частиц, образующих связь. Недавно [19, 16] вариационные коррелированные функции — зонные аналоги RVB-состояний — были построены для произвольно допированной модели Хаббарда. Использованный при этом метод унитарных локальных преобразований (в отличие от представлений типа анзаца Гутцвиллера [20]) позволяет построить не только коррелированную функцию, но и выражение для эффективного гамильтониана. Для последнего (в отличие от гамильтониана $t-J$-модели) не существует дополнительных ограничений, и поэтому он может быть рассмотрен методом среднего поля. Это позволило найти константы сверхпроводящего спаривания из вариационного расчета без использования эмпирических параметров, и этот расчет не связан с нарушением дополнительных локальных ограничений.

Более конкретно, цель данной работы — на базе обобщенной модели Хаббарда исследовать роль малого прыжкового взаимодействия t' соседних узлов, расположенных по диагонали элементарного квадрата, в происхождении псевдощели, изучить влияние взаимодействия t' на фазовую диаграмму, на тип поверхности Ферми и на поведение сверхпроводящей щели. Параллельно обсуждается отнесение конкретных купратов к тому или иному типу зон и поверхности Ферми, и предлагаются возможные тесты для проверки. Предварительно в разд. 2 кратко повторены метод расчета и главные итоги предыдущей работы [16].

2. КОРРЕЛИРОВАННОЕ СОСТОЯНИЕ ВАЛЕНТНЫХ СВЯЗЕЙ В ЗОННОМ ПОДХОДЕ

Рассмотрим обобщенную модель Хаббарда, дающую однозонное отображение CuO_2-плоскости ВТСП [21–23]:

$$H = H(U,t) + \Delta H(V,t'), \quad H(U,t) = -t \sum_{\langle nm\rangle,\sigma} (c^{\dagger}_{n\sigma}c_{m\sigma} + \text{H.c.}) + \sum_{n} U n_{n\uparrow} n_{n\downarrow}, \tag{1}$$

$$\Delta H(V,t') = V \sum_{\langle nm\rangle} n_n n_m + t' \sum_{\langle\langle nm\rangle\rangle} \sum_{\sigma} (c^{\dagger}_{n\sigma}c_{m\sigma} + \text{H.c.}). \tag{2}$$

Как мы увидим, низкоэнергетические свойства системы (1) очень чувствительны к малому прыжковому взаимодействию t' соседних диагональных узлов $\langle\langle nm\rangle\rangle$. По этой причине в (1) к двухпараметрическому гамильтониану $H(U,t)$ базовой модели Хаббарда добавлено взаимодействие t' и подобное кулоновскому взаимодействие V соседних центров.

Вариационная функция Ψ коррелированного состояния валентных связей строится с помощью унитарного преобразования некоррелированного состояния Φ:

$$\Psi = \hat{W}(\alpha)\Phi, \quad \hat{W}(\alpha) = \exp(\alpha Z), \quad Z = \sum_{\langle nm\rangle} Z_{nm}. \tag{3}$$

Здесь Φ — некоррелированная функция самого общего вида, а именно: функция БКШ-типа и с удвоенной магнитной ячейкой для тестирования возможного антиферромагнитного и сверхпроводящего спаривания. Оператор унитарного преобразования $W(\alpha)$, ответственный за образование валентных связей, зависит от вариационного параметра α. Локальный антиэрмитов оператор Z_{nm}, относящийся к связи $\langle nm\rangle$ соседних узлов, равен:

$$Z_{nm} = -\frac{1}{2}\sum_{\sigma} j_{nm\sigma}\Delta_{nm,-\sigma}, \qquad j_{nm\sigma} = (c^{\dagger}_{n\sigma}c_{m\sigma} - \text{H.c.}),$$
$$\Delta_{nm,-\sigma} = n_{n-\sigma} - n_{m-\sigma}. \tag{4}$$

Смысл преобразования можно видеть на примере двухцентровой системы $\{a,b\}$ с молекулярными орбитами $g_\sigma(u_\sigma) = (a_\sigma \pm b_\sigma)/\sqrt{2}$. В этом случае оператор $W = \exp(\alpha Z_{ab}) \equiv \exp[\alpha(g^{\dagger}_{\uparrow}g^{\dagger}_{\downarrow}u_{\downarrow}u_{\uparrow} - \text{H.c.})]$ преобразует некоррелированное двухчастичное состояние димера $\Phi(a,b) = |g^{\dagger}_{\uparrow}g^{\dagger}_{\downarrow}\rangle$ в точное синглетное состояние димера при оптимальном параметре преобразования α.

Таким образом, унитарный оператор преобразования W позволяет регулировать степень локализации дырок и оптимизировать зарядовое состояние связи. Унитарность W позволяет найти эффективный (преобразованный) гамильтониан

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

действующий в пространстве функций Φ, и выразить среднюю энергию

$$\overline{H} = \langle \Psi H \Psi\rangle = \langle \Phi \tilde{H} \Phi\rangle \tag{6}$$

через одноэлектронные средние. Значит возможно применение самосогласованной процедуры минимизации энергии по Φ и затем по вариационному параметру α.

Ранее два типа структур валентных связей исследовались детально. Один из них — альтернантная структура неперекрывающихся димеров определенной ориентации [19]. Для ее описания значения $\alpha = \alpha(nm)$ полагались отличными от нуля только для внутридимерных связей, после чего эффективный гамильтониан (5) находился точно. В данной работе, как и в [16], будет обсуждаться другой тип состояний — однородные состояния валентных связей с параметром α, общим для всех связей системы. В этом случае эффективный гамильтониан был найден и исследовался в двух низших порядках по α:

$$\tilde{H}(\alpha) \approx H + \alpha[H, Z] + \frac{\alpha^2}{2}[[H, Z], Z]. \tag{7}$$

Таким образом, разложение (7) применимо при $U/t \leq 9$, что отвечает малым значениям оптимального параметра преобразования $\alpha \leq 0.23$. Явное выражение для эффективного гамильтониана $\tilde{H}(U, t)$ через ферми-операторы позволило найти самосогласованные решения с антиферромагнитным и сверхпроводящим порядком. Процедура решения подробно описана в [16]. Реально все расчеты в [16] и в данной работе проводились с эффективным гамильтонианом

$$\tilde{H} = \tilde{H}(\alpha, U, t) + \Delta H(V, t'), \tag{8}$$

в котором основная часть $H(U, t)$ подвергалась унитарному преобразованию согласно (7), в то время как для малых взаимодействий $\Delta H(V, t')$ (2) сохранялся лишь нулевой порядок по α.

Кратко основные результаты [16] сводились к следующему.

1. Основной выигрыш энергии дает антиферромагнитное упорядочивание спинов с удвоенной магнитной элементарной ячейкой и совместимое с ним образование валентных связей (ненулевые значения оптимального α). При образовании валентных связей область допирования $|1 - n| < \delta_c$, в которой антиферромагнитный порядок существует, сужается до $\delta_c \sim 0.3$ при $U/t \sim 8$ в сравнении с предсказаниями $\delta_c \sim 0.45$ простого метода среднего поля. Но область такого протяженного двумерного антиферромагнетизма значительно превышает область $\delta_c^{exp} \sim 0.05$ наблюдаемого объемного антиферромагнетизма. Можно предполагать, что реально имеет место конечный, хотя и достаточно бо́льшой радиус R_{AF} антиферромагнитных корреляций. Решение эффективной проблемы методом среднего поля не может дать этот радиус. Но для расчета энергии и эффектов близкодействия от образования валентных связей нам достаточно знать, что R_{AF} много больше длины связи, если мы не интересуемся диффузионными или спин-волновыми процессами разрушения антиферромагнетизма на больших расстояниях. В [16] и ниже приводятся аргументы в пользу такого «двумерного» антиферромагнетизма CuO_2-плоскостей в широкой области допирования.

2. Притяжение дырок в d-канале индуцируется в основном членами типа

$$\sim \alpha U[c_{n\sigma}^{\dagger} c_{m\sigma} n_{n,-\sigma} n_{m,-\sigma} + \text{H.c.}],$$

возникающими при образовании валентных связей. В отличие от эмпирических констант взаимодействия коррелированных прыжков Хирша [15], в нашей работе эта константа через параметр α определяется вариационно. Заметим, что взаимодействия типа коррелированных прыжков возникают и в гамильтониане $t - J$-модели, но к нему, в отличие от эффективного гамильтониана $\tilde{H}(\alpha)$, не могут быть применены методы среднего поля в силу строгого запрета двойных заселений узлов.

3. Сверхпроводимость d-симметрии существует в той области допирования, где имеет место «двумерный» антиферромагнетизм, т. е. при $\delta < \delta_c$. Это связано с увеличением плотности состояний на границе Ферми при расщеплении исходной зоны на две.

В заключение параграфа напомним смысл зон квазичастиц для коррелированного состояния (3), построенного на решении эффективного гамильтониана $\tilde{H}$ в приближении среднего поля. Однодетерминантное состояние Ф, минимизирующее среднюю энергию (6), характеризуется набором одноэлектронных энергий $E_{k\lambda}$ и одноэлектронных функций $\chi^{\dagger}_{k\lambda}$ — собственных функций линеаризованного гамильтониана $(\tilde{H})_L$ (подробности см. в Приложении и в [16])

$$(\tilde{H})_L \chi^{\dagger}_{k\lambda} = E^{\dagger}_{k\lambda}\chi^{\dagger}_{k\lambda}. \tag{9}$$

Для самого общего типа состояния $\Psi = \hat{W}(\alpha)\Phi$ с антиферромагнитным и сверхпроводящим порядком $E_{k\lambda}$ и $\chi^{\dagger}_{k\lambda}$ выражаются из уравнений

$$\chi^{\dagger}_{k\lambda} = \{c^{\dagger}_{k\uparrow},\ c^{\dagger}_{\tilde{k}\uparrow},\ c_{-k\downarrow},\ c_{-\tilde{k}\downarrow}\}_i S_{i\lambda}, \qquad i,j,\lambda = 1,\ldots,4, \qquad \tilde{k} = (\pi,\pi) + k, \tag{10}$$

$$h_{ij}(k)S_{j\lambda} = S_{i\lambda}E_{k\lambda}, \qquad i,j,\lambda = 1,\ldots,4, \tag{11}$$

$$E_{k\lambda} = \pm\sqrt{(E^{AF}_{\nu} - \mu)^2 + W^2_{\nu}}, \qquad \nu = 1,2. \tag{12}$$

Матрица h_{ij} и выражения для $E^{AF}_{\nu}, W^{AF}_{\nu}$ даются формулами (33) и (38), (39) Приложения (см. также [16]). В отсутствие сверхпроводимости, когда в функции Ф нет спаривания электронов с разными проекциями спинов, ферми-возбуждения определяются верхней и нижней хаббардовскими зонами $E^{AF}_{1(2)}$. Детали их поведения вблизи края антиферромагнитной диэлектрической щели и определяют зависящие от низкоэнергетических возбуждений свойства системы, такие как проводимость, теплоемкость и т.д., как в нормальном, так и в сверхпроводящем состояниях.

Заметим, наконец, что действие на систему в основном коррелированном состоянии $\Psi = W\Phi$ любого зависящего от времени внешнего возмущения вида

$$\hat{V}(t) = \sum_k [v_k(t)c_{k\sigma} + \text{H.c.}]$$

приводит как к одночастичным, так и многочастичным процессам возбуждения. В самом деле,

$$\hat{V}(t)\Psi = W\sum_k [v_k(t)\tilde{c}_{k\sigma} + \text{H.c.}]|\Phi\rangle. \tag{13}$$

Здесь «одетый» оператор $\tilde{c}_{k\sigma} = W^{\dagger}c_{k\sigma}W$ содержит как однофермионные, так и многофермионные операторы:

$$\tilde{c}_{k\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_n \left\{ c_{n\sigma} - \frac{\alpha}{2}\sum_{m\in\langle nm\rangle}(c_{n\sigma}j_{nm,-\sigma} + c_{m\sigma}\Delta_{nm,-\sigma}) + \frac{\alpha^2}{2}[\ldots]\right\}. \tag{14}$$

Операторы j, Δ в (14) определены формулой (4).

3. ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА И СТРУКТУРА ЗОН И ПОВЕРХНОСТИ ФЕРМИ

Обсудим подробней фазовую диаграмму модели (1), (2). Метод и процедуры расчета подробно описаны в [16].

Один из результатов (неожиданный) состоял в том, что для базовой модели Хаббарда $H(U,t)$ фазовая кривая $T_c(\delta)$, т. е. зависимость температуры сверхпроводящего перехода от допирования $\delta = |1-n|$, имела широкое плато: температура T_c оставалась почти постоянной вплоть до $\delta \sim 0.02$ при $U/t \sim 8$. Расчет для модели $H(U,t)$ не воспроизводит наблюдаемого во многих керамиках резкого убывания $T_c(\delta)$ в обе стороны от оптимального уровня допирования δ_{opt}, отвечающего максимуму T_c. В поисках причин расхождения в расчет включались взаимодействия (2). Было показано, что учет взаимодействия $V > 0$ меняет форму зависимости $T_c(\delta)$ в нужном направлении, но подавляет сверхпроводимость, резко снижая величину T_c. В настоящей работе во всех расчетах использовано значение $V/t = 0.1$. При таком V и $t' > 0$ максимальная температура сверхпроводящего перехода составляет $T_c^{max} \sim 0.014t$, что при оценке $t \sim 0.5$ эВ [22] дает $T_c^{max} \sim 80$ K. При $V/t = 0$ и $t' > 0$ имеем $T_c^{max} = 0.023t \sim 135$ K.

Наиболее интересным является влияние прыжкового взаимодействия t' для соседних диагональных узлов $\langle\langle nm\rangle\rangle$ решетки с $|n-m| = \sqrt{2}$ на зависимости $T_c(\delta)$. Интерес к взаимодействию t' вызван тремя причинами.

1. Взаимодействие t' сильно влияет на форму поверхности Ферми и ее образ в разрешенных по углу фотоэмиссионных спектрах (ARPES). Такой бо́льшой эффект связан с плоскими участками зоны вблизи поверхности Ферми при малом допировании и при антиферромагнитном расщеплении исходной зоны.

2. При однозонном отображении модели Эмери величина и даже знак константы t' (в отличие от других параметров U, t, V модели Хаббарда) очень чувствительны к исходным параметрам $\epsilon_d, \epsilon_p, t_{pd}, t_{pp}$ CuO_2-плоскости в силу конкуренции двух каналов диагональных прыжков — прямого, через t_{pp}, и через процесс 2-го порядка $\sim t_{pd}^2/(\epsilon_d - \epsilon_p)$ [21, 24]. Таким образом, параметр t' зависит от материала, и сравнительное изучение его влияния в различных купратах принципиально [24–26].

3. Как будет показано ниже, в условиях антиферромагнитно расщепленных зон вариации энергии $\delta E = E(\pi,0) - E(\pi/2,\pi/2) \sim -4t'$ вдоль линии нестинга ответственны за эффекты псевдощели, обнаруживаемые в разных экспериментах. Величина $4t'$ определяет энергетический масштаб этих явлений. (Здесь и далее $E(k) = E_1^{AF}(k)$ — энергия нижней хаббардовской зоны при дырочном допировании.)

Рисунок 1 представляет зависимость логарифма температуры сверхпроводящего перехода T_c от допирования для систем с $U = 8t$, $V = 0.1t$, $t'/t = 0, \pm 0.05, \pm 0.1$. Видна очень высокая чувствительность фазовой кривой к величине и знаку t'. При $t' > 0$ форма $T_c(\delta)$ подобна наблюдаемой для висмутовой керамики [2] в отличие от широкого плато при $t' = 0$, $V = 0$ [16]. Максимальная температура перехода T_c^{max} почти не зависит от t' при $t' > 0$, но оптимальный уровень допирования δ_{opt} сдвигается с ростом $t' > 0$ в сторону больших значений, оставаясь при этом внутри области «двумерного» (или скрытого) антиферромагнетизма [16]. Напротив, при $t' < 0$ кривые $T_c(\delta)$ имеют более широкий максимум и величина T_c^{max} заметно убывает с ростом $|t'|$. Различное поведение $T_c(\delta)$ при $t' < 0$ и $t' > 0$ связано с различным поведением зонной энергии $E(k)$ хаббардовских зон (нижней при дырочном допировании или верхней — при электронном). Напомним, что $E(k)$ — одно из собственных значений линеаризованного гамильтониана $(\tilde{H})_L$, т. е. одночастичная энергия, получаемая при самосогласованном

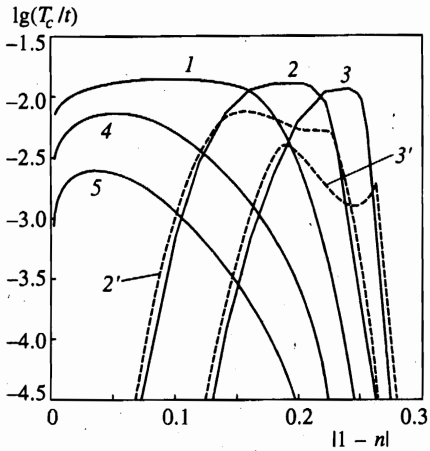

Рис. 1

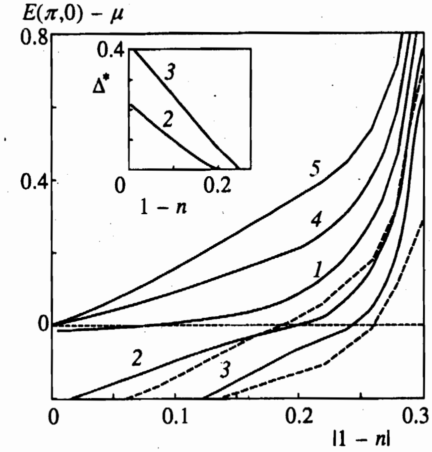

Рис. 2

Рис. 1. Зависимости логарифма температуры T_c сверхпроводящего перехода от степени допирования $\delta = |1 - n|$ для моделей с $U = 8t$, $V = 0.1t$ и разными t'. Кривые *1, 2, 3, 4, 5* относятся к значениям $t'/t = 0$, 0.05, 0.1, −0.05, −0.1, соответственно. Штриховые кривые отвечают модели (24) с орторомбическим возмущением $\tau = 0.05t$ и $t'/t = 0.05$ (кривая *2′*) или $t'/t = 0.1$ (кривая *3′*) при тех же параметрах U, V

Рис. 2. Зависимости от степени допирования энергии $E(0,\pi) - \mu$ нижней хаббардовской зоны в точке M, отсчитанной от химического потенциала, для тех же систем, что и на рис. 1. Кривые *1, 2, 3, 4, 5* относятся соответственно к значениям $t'/t = 0$, 0.05, 0.1, −0.05, −0.1 (сплошные кривые). Штриховые кривые относятся к максимальным энергиям $E^{max}_{y(x)} - \mu$ на сечениях нижней зоны по оси k_y либо по оси k_x для моделей с орторомбическим возмущением. На вставке зависимость псевдощели Δ^* от степени допирования в нормальном состоянии для $t'/t =$ 0.05, 0.1 в тех областях, где псевдощель существует

решении методом среднего поля эффективного гамильтониана (5). На рис. 2 приведены зависимости энергии нижней хаббардовской зоны $E(\pi, 0) - \mu$ относительно химического потенциала системы в точке $M = (\pi, 0)$. Для систем с $t' > 0$ это — точка наиболее плоского участка зоны, отвечающего особенности Ван Хова в плотности состояний $n(E)$. Сопоставление рис. 1 и 2 показывает, что степень допирования δ, при которой граница Ферми проходит через M, т. е. когда $E(\pi, 0) - \mu = 0$, совпадает с оптимальным допированием δ_{opt}, отвечающем максимуму T_c (кривые *2, 3* на рис. 1, 2).

Для систем с $t' < 0$ (кривые *4, 5* на рис. 1, 2) такого пересечения нет: величина $E(\pi, 0) - \mu > 0$ при всех $\delta = |1 - n|$. Плотность состояний на границе Ферми меньше, чем для систем с $t' > 0$, и уменьшается при допировании. Это приводит к убыванию в сравнении со случаем $t' > 0$ максимальной температуры T_c^{max}, к уширению фазовой кривой $T_c(\delta)$ и смещению области сверхпроводимости в сторону меньших δ.

Наглядное представление двух разных типов ($t' > 0$ или $t' < 0$) зон и соответствующих поверхностей Ферми дает рис. 3.

В силу того что во всей интересующей нас области допирования, $\delta < \delta_c$, сохраняется «двумерный» антиферромагнетизм, повторим подробнее некоторые общеизвестные представления об эволюции зон Хаббарда при включения сильного одноцентрового вза-

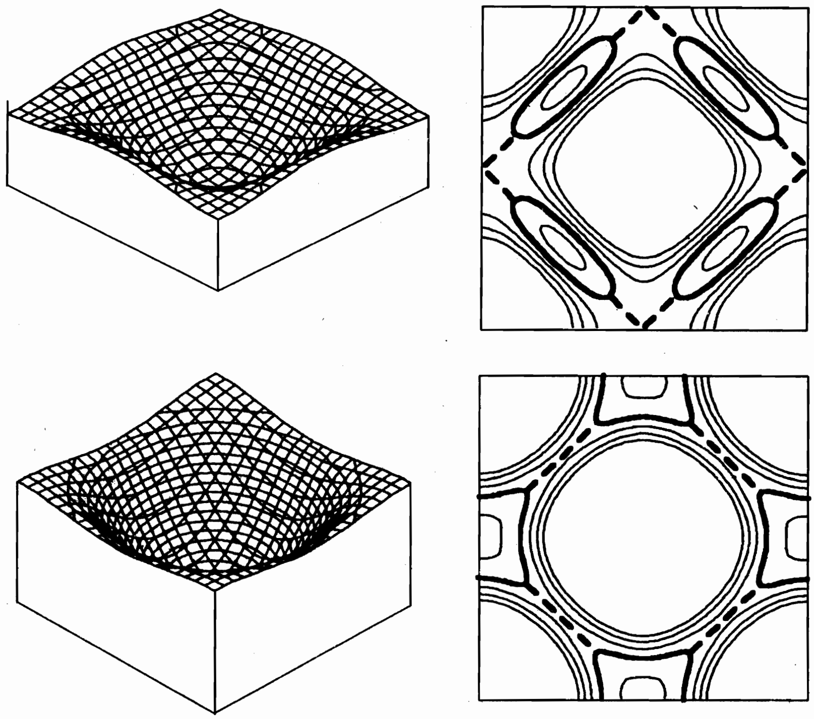

Рис. 3. Зависимость энергии нижней зоны Хаббарда $E(k_x, k_y)$ от компонент квазиимпульса k_x, k_y внутри магнитной зоны Бриллюэна, $|k_x \pm k_y| \leq \pi$, для недодопированной системы ($\delta = 0.15$) с $t'/t = 0.1$ (вверху) и $t'/t = -0.1$ (внизу); остальные параметры — стандартные: $U/t = 8$, $V = 0.1t$ (слева). Границы Ферми (жирные линии) и ближайшие к ним уровни зонной энергии с интервалом $0.02t$ для тех же систем в полной зоне Бриллюэна $|k_{x(y)}| \leq \pi$. Диэлектрические участки обобщенной границы Ферми изображены жирным штрихом (см. текст) (справа)

имодействия U. Это принципиально важно для интерпретации экспериментов ARPES и явления псевдощели.

При $U = 0$, $t > 0$ имеется одна невозмущенная зона

$$E_0(k) = -2t(\cos k_x + \cos k_y) + 4t' \cos k_x \cos k_y \tag{15}$$

с минимумом в точке $\Gamma(0,0)$ и максимумом в точке $Y(\pi,\pi)$ зоны Бриллюэна $-\pi < k_{x(y)} < \pi$ исходной решетки. При $\delta < \delta_c$ для низшего по энергии самосогласованного решения эффективного гамильтониана (5) отличными от нуля оказываются чередующиеся спиновые плотности разных знаков на двух подрешетках:

$$d_l = \frac{1}{2} \sum_\sigma \frac{\sigma}{|\sigma|} \langle c^\dagger_{n\sigma} c_{n+l,\sigma} \rangle_\Phi (-1)^{n_x+n_y}, \qquad |l| = 0, \sqrt{2}, 2, \ldots \tag{16}$$

и зона расщепляется на две $E^{AF}_{1(2)}(k)$, разделенные антиферромагнитной щелью $\Delta_{AF} \sim Ud_0$. На рис. 3 представлены формы нижних зон $E(k_x, k_y)$ в магнитной обратной

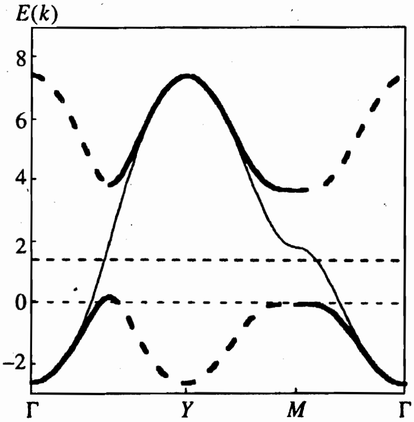

Рис. 4. Профили зонных энергий $E(k)-\mu$ при изменении квазиимпульса вдоль контура $\Gamma(0,0) \to Y(\pi,\pi) \to M(\pi,0) \to \Gamma$ для системы $U/t = 8$, $V = 0.1t$, $t' = 0.05t$, $\delta = 0.2$ в нормальном состоянии. Для нижней и верхней хаббардовских зон сплошной и штриховой участки кривых отвечают основному (нетеневому) и теневому участкам зоны. Тонкая кривая — зона, вычисленная в отсутствие антиферромагнитной щели. Горизонтальные штриховые линии отвечают уровням химического потенциала для расщепленной и нерасщепленной зон

ячейке Бриллюэна $|k_x \pm k_r| \leq \pi$. Соответствующие поверхности Ферми для двух типов недодопированных систем с $t' > 0$ и $t' < 0$ приведены в полной зоне Бриллюэна. В отсутствие сверхпроводящего порядка структура нижней зоны Хаббарда $E = E_1^{AF}$ определяется выражением (38) Приложения, которое грубо можно переписать в виде

$$E(k_x,k_y) = [\epsilon_0+2t'\cos k_x \cos k_y+\ldots]-\sqrt{[Ud_0+\ldots]^2+\{2t(\cos k_x+\cos k_y)+\ldots\}^2}. \qquad (17)$$

Многоточия в скобках $[\ldots]$ или $\{\ldots\}$ означают опущенные здесь дополнительные вклады от четных либо нечетных (l_x, l_y)-гармоник по (k_x, k_y).

Структура зоны (17) очень сильно отличается от стандартного представления зонной энергии через сумму гармоник (так называемое приближение сильной связи [27]):

$$E(\mathbf{k}) = \sum_{(l_x,l_y)} t_l \cos k_x l_x \cos k_y l_y, \qquad l = (0,1),(1,0),(1,1),\ldots \qquad (18)$$

Именно такая аппроксимация обычно используется при подгонке формы зоны под данные, полученные в экспериментах ARPES. Главное различие (17) и (18) — в том, что нижняя зона Хаббарда (17) периодична в магнитной зоне Бриллюэна, в то время как форма (18) — в полной зоне Бриллюэна. Это значит, что значения $E(k)$ в (17) одинаковы в точках $\Gamma = (0,0)$ и $Y = (\pi,\pi)$, что несправедливо для стандартной подгоночной формы (18). Имеются несколько причин, почему столь разные формы при соответствующей подгонке параметров оказываются пригодными для описания одних и тех же данных ARPES.

1. Прямая фотоэмиссия измеряет только участок зоны, находящийся ниже химического потенциала, $E(k) < \mu$, так как выбить электрон можно только с заселенного уровня. В случае единой нерасщепленной зоны и дырочного допирования это означает, что фотоэмиссия возможна только из области квазиимпульсов k, окружающей точку $\Gamma = (0,0)$, и невозможна из области вокруг $Y = (\pi,\pi)$. Таким образом, масштабированию и подгонке подлежит только часть зоны вокруг Γ.

2. В случае антиферромагнитно расщепленных зон как нижняя, так и верхняя зоны Хаббарда периодичны в магнитной ячейке Бриллюэна. Но интенсивности фотоэмиссии не обладают такой периодичностью [28]. Грубо говоря, нижняя зона делится на

основную часть в области основной магнитной ячейки (сплошная кривая на рис. 4) и теневую часть вне ее (штрихи на рис. 4). В действительности матричный элемент перехода плавно убывает при переходе от основного к теневому участку зон.

Нетрудно видеть, что форма нерасщепленной зоны на участках, где она ниже химического потенциала, и форма нижней зоны Хаббарда на нетеневых участках подобны (см. профили зонных энергий на рис. 4). Только поэтому возможна подгонка как той, так и другой формы под данные ARPES, но каждая из подгонок дает различное отношение t'/t эффективных прыжковых взаимодействий.

Поскольку в прямой фотоэмиссии, в частности в ARPES, невозможно наблюдение незаселенных участков зон с $E_k > \mu$, то невозможно напрямую наблюдать и саму диэлектрическую щель для дырочно-допированных соединений. Однако для электронно-допированных соединений на основе Nd с частичным заселением верхней хаббардовской зоны эта щель должна проявляться, что, по-видимому, и наблюдается в спектрах ARPES для этих соединений при $E - \mu < -300$ мэВ [3].

Вернемся к изучению влияния параметра t' диагональных прыжков на форму зоны и поверхности Ферми. Величины $t'/t = \pm 0.05, \pm 0.1$, использованные в наших расчетах, меньше эмпирических значений $t'/t \sim 0.2 \div 0.4$, обсуждаемых в [24]. Наиболее последовательное определение [25] отношения параметров t'/t в $t - t' - J$-модели или в $t - t' - U$-модели Хаббарда основано на подгонке энергий низших возбуждений кластера Cu_5 с числом дырок 4, 5, 6 под возбуждения трехзонной модели, параметры которой находились из результатов расчета методом функционала плотности (LDA). Такое определение дало $t'/t = 0.17$ (0.13) для дырочного (электронного) допирования [25]. Если учесть, что согласно [21] величина t' очень чувствительна к параметрам задачи и меняет знак при вариациях t_{pp}, то используемые нами величины $\pm 0.05, \pm 0.1$ не кажутся аномальными, тем более что уже такие малые вариации t' драматически влияют на фазовую диаграмму и низкоэнергетические свойства моделей. Использование приближения сильной связи (18) с подгонкой поверхности Ферми под зоны, полученные в LDA-расчетах [26], или зоны, восстановленные из данных ARPES [27], дают завышенные значения t'/t, так как приближение (18) отвергает антиферромагнитное расщепление зоны даже при учете необходимых перенормировок невозмущенных LDA-зон.

Рассмотрим первый из двух типов поверхности Ферми, отвечающий $t' > 0$ при дырочном допировании. При малом $\delta < \delta_{opt}$ поверхность Ферми (жирные линии на рис. 3) имеет вид дырочных карманов вокруг точек $(\pi/2, \pi/2)$. Такая форма поверхности Ферми неоднократно обсуждалась в литературе [1, 29, 30]. Одновременно (жирными штрихами) на фазовой плоскости отмечены участки границы магнитной зоны Бриллюэна, для которых $E(k) < \mu$. При изменении k вдоль любой линии $\mathbf{k}(l)$, пересекающей эту границу, работа выхода $|E(k) - \mu|$ остается конечной и самая меньшая работа выхода вдоль такого пути и составит величину псевдощели, которая фиксируется в измерениях ARPES при сканировании по $\mathbf{k}$ вдоль этого пути. Заметим, что если зона была бы нерасщепленной, типа (18), то не существовало бы пути из Γ в Y без пересечения истиной границы Ферми. На таком пути всегда нашлась бы точка, где $E_k - \mu = 0$, и наблюдение псевдощели было бы невозможно.

Понятным становится и поведение фазовой кривой $T_c(\delta)$. При $\delta = \delta_{opt}$ плотность состояний на уровне Ферми максимальна (см. рис. 5*а*). При $\delta > \delta_{opt}$ она резко убывает и $T_c \to 0$. При $\delta < \delta_{opt}$ плотность состояний тоже падает, хотя и не столь резко. Заметим также, что приведенная на рис. 5*а* плотность спектра $n(E)$ нижней зоны Хаббарда воспроизводит плотность состояний с пиком от особенности Ван Хова ниже химиче-

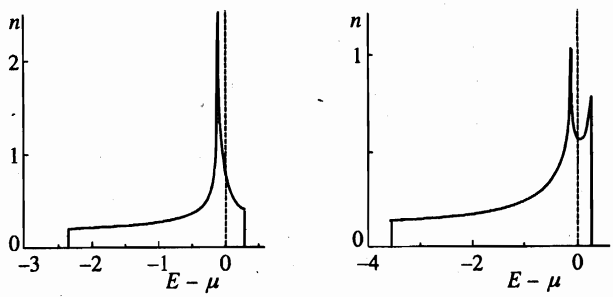

Рис. 5. Плотности состояний $n(E)$ для тех же систем, что и на рис. 3, и со значениями $t'/t = 0.1$ (слева) и $t'/t = -0.1$ (справа). В случае $t' > 0$ особенность Ван Хова отвечает энергии, связанной с псевдощелью $E - \mu = -\Delta^*(\delta)$. Для $t' < 0$ две особенности Ван Хова отвечают энергиям $E(\pi, 0) - \mu > 0$ и $E(\pi/2, \pi/2) - \mu < 0$

ского потенциала, которая была введена в [31] для объяснения транспортных свойств купратов в нормальном состоянии.

Рассмотрим теперь другой тип поверхности Ферми, отвечающий $t' < 0$ при дырочном допировании (или $t' > 0$ при электронном допировании). Нас по-прежнему интересует область «двумерного» антиферромагнетизма $\delta < \delta_c$, поскольку только внутри этой области получены решения со сверхпроводимостью. Две особенности Ван Хова в плотности спектра нижней хаббардовской зоны (см. рис. 5*б*) отвечают теперь энергиям $\epsilon_1 = E(\pi, 0)$ и $\epsilon_2 = E(\pi/2, \pi/2) < \epsilon_1$. При малом допировании ($\epsilon_2 < \mu$) открываются «малые» поверхности Ферми, окружающие точки $M = (\pm\pi, 0)$, $(0, \pm\pi)$ и представленные на рис. 3. Там же штрихом отмечены участки границы магнитной зоны Бриллюэна. При изменении квазиимпульса **k** вдоль пути от $\Gamma(0,0)$ к $Y(\pi, \pi)$, пересекающего такой участок границы, работа выхода электрона $\Delta\omega(k)$, фиксируемая в данных ARPES как сдвиг края электронной функции распределения (короче, края фотоэмиссии), нигде не обращается в нуль. Минимальный сдвиг $\min|\Delta\omega(k)|$ вдоль такого пути отвечает точке пересечения этого пути с границей зоны $k_x + k_y = \pi$. Таким образом, при малом допировании и $t' < 0$ в спектрах ARPES должна наблюдаться псевдощель в направлении $\mathbf{k} \sim (1, 1)$. Одновременно край поглощения должен размываться аналогично размытому падению интенсивности фотоэмиссии на границе магнитной зоны Бриллюэна в случае недодопированного диэлектрика. При большом допировании, когда $\epsilon_2 = E(\pi/2, \pi/2) > \mu$, граница Ферми превращается в единую «большую» поверхность Ферми, огибающую точку Γ или Y. Причем для антиферромагнитных решений имеется основная и теневая границы Ферми внутри и вне магнитной зоны Бриллюэна для дырочно-допированной системы. (При электронном допировании основная и теневая границы Ферми меняются местами.)

Как и для базовой двухпараметрической модели Хаббарда $H(U, t)$, для расширенной модели (1), (2) с $t' < 0$ уровень Ферми никогда не пересекает зонную энергию $\epsilon_1 = E(\pi, 0)$ в точке M, отвечающую особенности Ван Хова на краю диэлектрической щели (см. рис. 5). Плотность состояний на границе Ферми недодопированных образцов ниже, чем в случае $t' > 0$ (см. рис. 5). Это приводит к уменьшению максимальной температуры перехода T_c^{max}, к более широкой фазовой кривой $T_c(\delta)$ и смещению всей кривой в область меньшего допирования.

Главная характерная особенность данного типа модели с $t' < 0$ — это отсутствие в сверхпроводящем состоянии Ферми возбуждений с нулевой энергией несмотря на наличие узлов в сверхпроводящем параметре порядка d-симметрии. Это означает, что в поведении теплоемкости, найтовском сдвиге ЯМР, т. е. во всех экспериментах, фиксирующих модуль сверхпроводящей щели, следует ожидать проявлений, характерных для сверхпроводимости s-симметрии: экспоненциальных зависимостей с конечной величиной минимальной щели. Такое поведение всегда считалось доказательством s-симметрии сверхпроводящего порядка. Но расчет приведенных выше моделей с $t' < 0$ показывает, что такое поведение возможно и в сверхпроводниках d-типа.

4. ПРОЯВЛЕНИЯ ПСЕВДОЩЕЛИ И СВЕРХПРОВОДЯЩЕЙ ЩЕЛИ В ФОТОЭМИССИИ

Поскольку одним из источников детальной информации об электронной структуре ВТСП является ARPES, попытаемся для наших моделей провести вычисление спектров фотоэмиссии. В простейшей схеме предположим, что взаимодействие с излучением $E(t) = E_0 e^{i\omega t}$, приводящее к выбиванию высокоэнергетического электрона с импульсом $\mathbf{q}$ и его проекцией q_{ab} на ab-плоскость купрата, определяется оператором

$$V(t) \sim \mathbf{E}_0 \mathbf{f}(\mathbf{q},\mathbf{k})[e^{i\omega t} a^{\dagger}_{q\sigma} c_{k\sigma} + \text{H.c.}]\delta(q_{ab} - k \pm 2\pi n). \tag{19}$$

Здесь мы не детализируем структуру узельных операторов $c_{n\sigma}$ и поляризационный формфактор $\mathbf{f}(\mathbf{q},\mathbf{k})$, считая его гладкой функцией q, k. Тогда в разрешенной по углу прямой фотоэмиссии (ARPES) измеряемый сигнал пропорционален спектральной функции

$$A(k\omega) = \frac{1}{Z}\sum_{i,f} |\, \langle \Psi_f^{N_e-1} | c_{k,\sigma} | \Psi_i^{N_e} \rangle \,|^2 \, e^{-\beta E_i} \delta(\omega - \mu + E_f^{N_e-1} - E_i^{N_e}). \tag{20}$$

Здесь Z — статистическая сумма и $\beta = 1/kT$. В базисе однодетерминантных функций Φ матричный элемент в (20) можно представить в виде

$$M(k) = \langle \Phi_f^{N_e-1} | \tilde{c}_{k,\sigma} | \Phi_i^{N_e} \rangle, \qquad \tilde{c}_{k\sigma} = W^{\dagger}(\alpha) c_{k\sigma} W(\alpha). \tag{21}$$

В отличие от простого оператора $c_{k\sigma}$ «одетый» квазичастичный оператор $\tilde{c}_{k\sigma}$, вычисленный в двух порядках по α, приводит как к одночастичным, так и к многочастичным возбуждениям на фоне некоррелированного состояния среднего поля Φ. Ограничимся лишь одночастичными возбуждениями. Тогда удерживаемый в $\tilde{c}_{k\sigma}$ вклад можно представить в виде разложения по собственным функциям $\chi_{k\lambda}$ линеаризованного гамильтониана $(\tilde{H})_L$ в виде

$$\tilde{c}_{k\sigma} = \varphi(k) c_{k\sigma} + \frac{\sigma}{|\sigma|}\eta(k) c_{\tilde{k}\bar{\sigma}} = \sum_{\lambda} \left\{ \left(\frac{1}{2} + \sigma\right) R_{\lambda}\chi_{k\lambda} + \left(\frac{1}{2} - \sigma\right) Q_{\lambda}\chi^{\dagger}_{k\lambda} \right\}. \tag{22}$$

Здесь $\tilde{k} = k - (\pi, \pi)$, а функции φ, η, R, Q, вычисленные в двух порядках по α, определяются выражениями (41), (42), (44) Приложения. Окончательно расчеты проводились по формуле

$$A(k\omega) = \sum_{\lambda} |R_{\lambda}|^2 f(E_{\lambda}) g(E_{\lambda} - \omega) \equiv \sum_{\lambda} |Q_{\lambda}|^2 [1 - f(E_{\lambda})] g(E_{\lambda} + \omega), \tag{23}$$

в которой $f(E)$ — фермиевская функция, а $\delta(x)$-функция заменена на искусственно уширенную гауссову функцию $g(x) = \exp[-(x/\sigma)^2]$ с $\sigma = 0.02t$ для наглядности представления результатов и имитации конечного разрешения.

На рис. 6 приведены рассчитанные по формуле (23) интенсивности фотоэмиссии $A(k,\omega)$ как функции ω для ряда значений k, равномерно распределенных на отрезках $[C\text{-}D]$ или $[A\text{-}M\text{-}B]$, 1-го квадранта фазовой плоскости (слева внизу рис. 6). Они подтверждают вывод о том, что в недодопированной системе с $\delta = 0.15$ сдвиг края фотоэмиссии $\Delta\omega(M)$ в точке M, сохраняющийся как в нормальном, так и сверхпроводящем состояниях, почти полностью обязан образованию диэлектрической псевдощели. В то же время для оптимального допирования $\delta = 0.2$ сдвиг $\Delta\omega(M)$ исчезает в нормальном состоянии. Это значит, что при $T < T_c$ этот сдвиг в чистом виде характеризует сверхпроводящую щель.

На рис. 7 приведена зависимость сдвига $\Delta\omega(k)$ вдоль обобщенной границы Ферми (M, M'), состоящей из диэлектрических участков границы магнитной зоны Бриллюэна и нетеневого участка границы Ферми, рассчитанного для сверхпроводящего и нормального состояний недодопированной системы с $\delta = 0.15$, $t' = 0.05t$, $U = 8t$, $T_c = 0.0091t$. Там же приведены аналогичные зависимости $\Delta\omega(k)$ при изменении k вдоль истиной границы Ферми (S, S') оптимально допированной системы, $\delta = 0.2$, с теми же параметрами. Для данного типа зон $(t' > 0)$ на поверхности Ферми всегда имеется точка $k_x = k_y$, где сверхпроводящая щель обращается в нуль в соответствии с общепринятым представлением о сверхпроводимости d-симметрии.

Другая ситуация имеет место в недодопированных системах с $t' < 0$. Сдвиг края фотоэмиссии $\Delta\omega(k)$ вдоль обобщенной границы Ферми в этом случае (см. рис. 8 для $\delta = 0.1$, $t' = -0.05t$, $U/t = 8$) нигде не обращается в нуль при $T < T_c$, хотя сверхпроводящий параметр порядка меняет знак. Это означает, что поведение всех физических величин, чувствительных к минимальной энергии ферми-возбуждений (теплоемкости, сдвига Найта в ЯМР и др.), будет подобно их поведению в стандартных сверхпроводниках со щелью s-симметрии. Однако фазово-чувствительные эксперименты должны по-прежнему фиксировать смену знака сверхпроводящего параметра порядка.

Итог данного раздела можно сформулировать другими словами, если проследить обратную эволюцию системы при уменьшении допирования от большого уровня $\delta > \delta_c \sim 0.3$ к нулевому значению $\delta = 0$, т. е. к недопированному состоянию антиферромагнитного диэлектрика. А именно, при $\delta > \delta_c$ имеется металлическое парамагнитное состояние с единой нерасщепленной зоной. При $\delta < \delta_c$ возникает «протяженный двумерный» антиферромагнитный порядок с расщеплением зоны на две и увеличением плотности состояний. Но поверхность Ферми в таком все еще сверхдопированном режиме остается «большой» вплоть до значения $\delta = \delta_{opt}$ при $t' > 0$ либо при $t' < 0$ до значения $\delta = \delta_2$, при котором $E(\pi/2, \pi/2) - \mu = 0$. И только при $\delta < \delta_{opt}$ (или $\delta < \delta_2$ при $t' < 0$) отдельные участки «большой» границы Ферми диэлектризуются, что проявляется в возникновении псевдощели в нормальном состоянии при определенных направлениях квазиимпульса. При этом «большая» поверхность Ферми превращается в «малые» поверхности дырочных карманов в районе $(\pm\pi/2, \pm\pi/2)$ при $t' > 0$ либо в районе $(0, \pi)$, $(\pi, 0)$ при $t' < 0$.

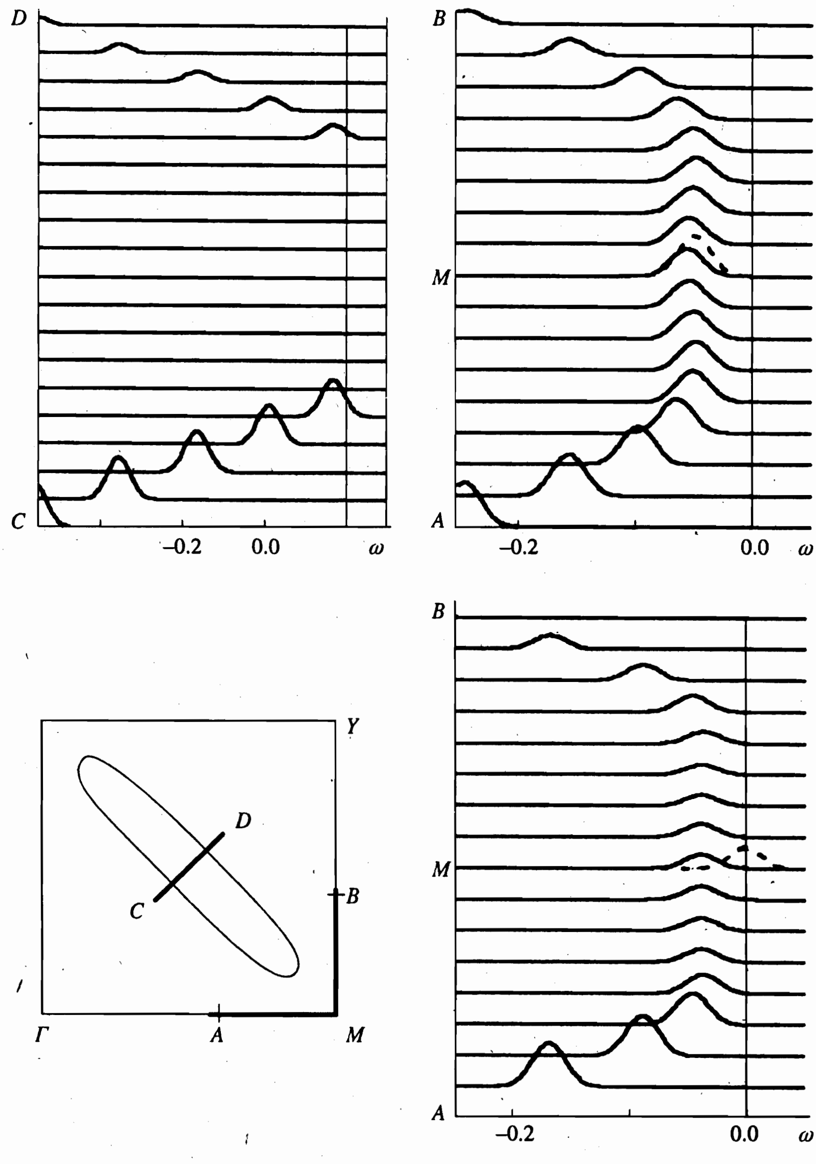

Рис. 6. Вверху: спектральные функции $A(k\omega)$ в зависимости от ω, вычисленные по формуле (23) для недодопированной системы $\delta = 0.15$, $U = 8t$, $V = 0.1t$, $t'/t = 0.05$ в сверхпроводящем состоянии для набора квазиимпульсов, равномерно распределенных на отрезках $[C\text{–}D]$ и $[A\text{–}M\text{–}B]$ (они показаны слева внизу в первом квадранте полной зоны Бриллюэна). Внизу справа — то же для такой же оптимально допированной системы $\delta = 0.2$ и $k \in [A\text{–}M\text{–}B]$. Для значения $k = (\pi, 0)$, отвечающего точке M, штрихом даны также зависимости $A(k\omega) \times 1.5$ (с коэффициентом 1.5 для различимости) для тех же систем в нормальном состоянии $T = 0.02t > T_c$

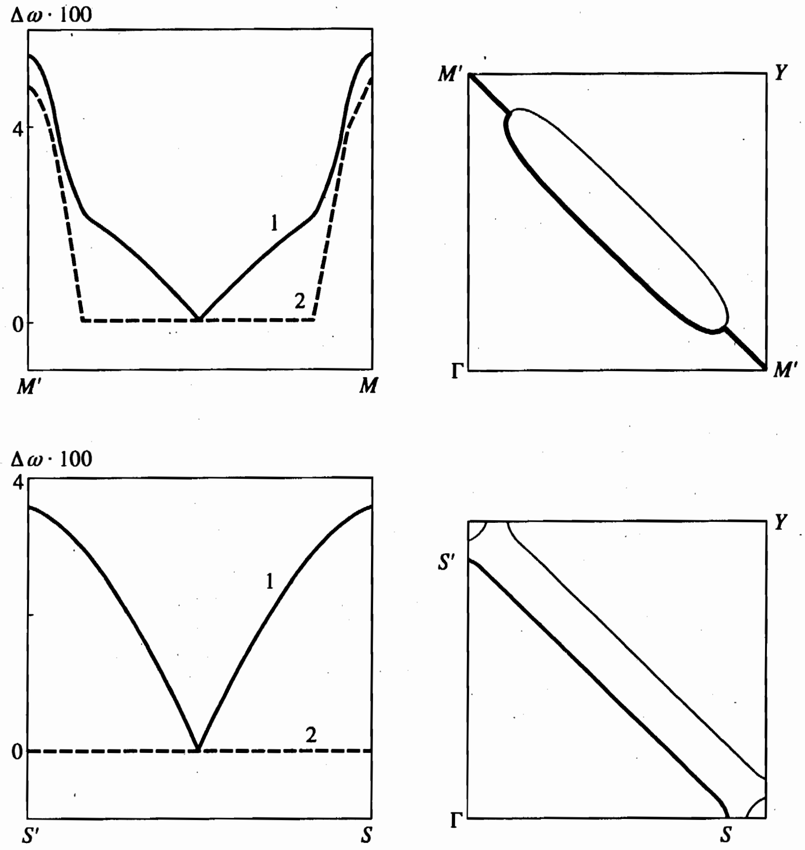

Рис. 7. Вверху слева: минимальная энергия $\Delta\omega(k)$ (в единицах t) ферми-возбуждений при квазиимпульсе k, меняющемся вдоль обобщенной границы Ферми $[M', M]$, изображенной справа и состоящей из диэлектрических отрезков и нетеневой части границы Ферми вокруг дырочного кармана с центром в точке $(\pi/2, \pi/2)$. Параметры системы: $U = 8$, $V = 0.1$, $t' = 0.05$ в единицах t. Кривые *1* и *2* отвечают соответственно сверхпроводящему ($T = 0.0017t < T_c$) и нормальному ($T = 0.02t > T_c$) состояниям. Внизу: то же самое для оптимально допированной системы, $\delta = 0.2$, при изменении квазиимпульса вдоль границы Ферми $[S', S]$ (см. справа)

5. О ВОЗМОЖНОЙ КЛАССИФИКАЦИИ КУПРАТОВ ПО ТИПУ ЗОН

Имеет смысл обсудить, какие из купратов могут описываться тем или иным типом зон ($t' > 0$ или $t' < 0$).

Обычно [32] по различным свойствам купраты делятся на 2 группы. Типичными представителями группы I считаются $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ (BSCCO) и $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ (YBCO). К группе II относят $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ (LSCO) и единственное электронно-допированное соединение $Nd_{2-x}Ce_xCuO_{4-y}$ (NCCO). Признаки, по которым проводят такое разделение, включают в себя следующие.

1. Разная величина T_c^{max}, составляющая 90-120 K для купратов I группы в отличие от величин $\sim$ 36 и 25 K для LSCO и NCCO соответственно [32, 33].

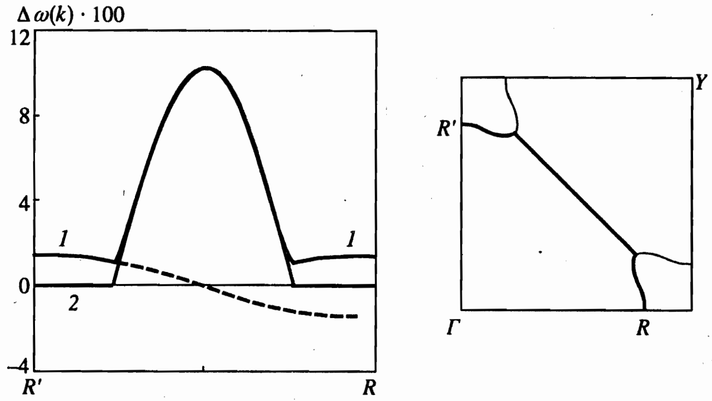

Рис. 8. То же, что на рис. 7, для недодопированной модели типа II с $t' = -0.05t$ при $\delta = 0.1$ и при k, меняющемся вдоль обобщенной границы Ферми, состоящей из участков границы Ферми вокруг дырочных карманов с центрами в точках $(\pi, 0)$ и $(0, \pi)$ и участка диэлектрической границы магнитной зоны Бриллюэна. Кривые *1* и *2* отвечают соответственно сверхпроводящему ($T = 0.0017t$) и нормальному ($T = 0.02t$) состояниям. Указанная штрихом сверхпроводящая щель $W_1^{AF}(k)$ (формула (39) Приложения) меняет знак

2. Нулевая (для группы I) или конечная ненулевая (для группы II) величина минимальной энергии ферми-возбуждений в сверхпроводящем состоянии. Эта величина фиксируется в измерениях теплоемкости, найтовском сдвиге ЯМР и других экспериментах и трактуется обычно как показатель d-симметрии сверхпроводящего порядка в соединениях группы I и s-симметрии в соединениях LSCO и NCCO группы II.

3. Прямое наблюдение в фазово-чувствительных экспериментах d-симметрии сверхпроводящего порядка в соединениях BSCCO и YBCO группы I [7, 8]. Аналогичные измерения для соединений группы II отсутствуют. Недавно [34, 35], в YBCO измерена малая примесь s-типа к основному сверхпроводящему параметру порядка d-типа, обязанная орторомбическим искажениям.

4. В спектрах ARPES в недодопированных соединениях BSCCO в нормальном состоянии обнаружена анизотропная псевдощель (сдвиг края распределения электронов по энергии) в районе точек $M = (\pi, 0), (0, \pi)$. Аналогичные измерения для соединений группы II отсутствуют.

5. Обнаружение «малой» поверхности Ферми в форме дырочного кармана в районе $k \sim (\pi/2, \pi/2)$ для недодопированного BSCCO-представителя группы I купратов [10, 11].

6. Коэффициент Холла для соединений LSCO и NCCO группы II меняет знак при некотором допировании [36–38].

7. Два представителя разных групп, YBCO и LSCO, проявляют разный характер пиков неупругого когерентного рассеяния нейтронов при возбуждении с энергией $\hbar\omega \to 0$ и квазиимпульсом Q. В YBCO наблюдается один пик при $Q = (\pi, \pi)$. В LSCO наблюдаются 4 пика при $Q = (\pi \pm \Delta, \pi)$, $(\pi, \pi \pm \Delta)$ [39, 40]. Расчеты [41, 42] однозначно связывают эти особенности с разными параметрами и разными формами поверхностей Ферми соответствующих некоррелированных моделей Эмери, хотя в качестве промежуточного этапа эти расчеты содержат перенормировки спиновой восприимчивости, скорее, эмпирического характера.

8. Для двух групп купратов основное различие в форме поверхностей Ферми, полученных в квантово-химических расчетах некоррелированных зон [43] методом функционала плотности (LDA), состоит в разной роли взаимодействия неближайших соседей. Для группы I купратов [43] поверхность Ферми проявляет нестинг с $Q \sim (\pi, \pi)$ и близка к скругленному квадрату со сторонами $|k_x \pm k_y| = \pi$ вокруг Y. В группе II расчетная поверхность Ферми некоррелированных зон представляет собой скорее повернутый скругленный квадрат со сторонами, параллельными осям k_x, k_y. На языке однозонной невозмущенной модели сильной связи такая картина отвечает $t'/t < 0$. Заметим, речь здесь идет о поверхностях Ферми, невозмущенных взаимодействием моделей сильной связи. Их нельзя непосредственно без дополнительных перенормировок использовать для описания низкоэнергетических явлений.

Два слова о непосредственном сравнении некоррелированных зон, полученных в LDA-расчетах, и зон, измеряемых в ARPES в доступных для измерения областях фазового пространства (см. выше дискуссию в связи с рис.4). В среднем расчеты в пределах разрешения хорошо передают поверхность Ферми, но завышают дисперсии зон в сравнении с измеряемыми. Для согласования используются перенормировки часто эмпирического характера [43]. Противоречия могут быть следствием того, что в расчеты не заложено чередования спиновой плотности и связанного с ним расщепления валентной зоны. Как уже говорилось, в прямой фотоэмиссии сама антиферромагнитная щель может стать наблюдаемой только в электронно-допированной системе. В [44, 45] для NCCO такая щель действительно наблюдается при $\hbar\omega = E_k - \mu < -300$ мэВ в противоречии с предсказаниями LDA-расчетов. Кроме того, конечное разрешение спектров (по k и по энергии), сглаживающее многие детали, также может быть причиной искажений «усредненной» интерпретации спектров ARPES. Влияние на границу Ферми разных способов определения ее по размытым спектрам в условиях плоских зон исследовано и наглядно продемонстрировано в [24]. Представляется необходимым проведение дополнительной обработки спектров ARPES на основе формул типа (17) и (23) для зонной энергии и интенсивностей, которые учитывают антиферромагнитное расщепление зоны на две и диэлектризацию части границы зоны. Пока же единственным доказательством «малой» поверхности Ферми — дырочных карманов — и существования псевдощели остается керамика BSCCO [9–11].

Все сказанное позволяет отнести группы купратов I и II к двум типам коррелированных моделей Хаббарда соответственно с $t'/t > 0$ и $t'/t < 0$. Действительно, самосогласованные расчеты, учитывающие антиферромагнитные корреляции и корреляции типа валентных связей, показывают следующее.

1. Максимальные температуры перехода в моделях с $t'/t = 0.05$, 0.1 составляют $T_c^{max} = 0.0129t$, $0.0114t$, в то время как в моделях с $t'/t = -0.05$, -0.1 — всего $T_c^{max} = 0.0072t$, $0.00247t$. Цифры относятся к моделям с $V/t = 0.1$. При $V = 0$ величины T_c возрастают в ~ 1.7 раза. Отношение T_c^{max} для двух типов моделей вполне соответствует отношению T_c^{max} для двух групп купратов.

2. Для моделей с $t'/t < 0$, в отличие от случая $t'/t > 0$, в сверхпроводящем состоянии почти во всей области существования сверхпроводимости ($\delta < \delta_2$) минимальная энергия ферми-возбуждений не обращается в нуль (см. рис. 8), несмотря на d-симметрию сверхпроводящего порядка. Это дает возможность отказаться от гипотезы об s-сверхпроводимости в LSCO и NCCO и высказать гипотезу о сверхпроводимости d-симметрии для всех типов купратов, в том числе и для LSCO, и NCCO. Благодаря диэлектризации границ в направлении $k_x = k_y$ эта гипотеза не будет противоречить

измерениям, в которых проявляется конечная величина минимальной энергии возбуждения. Добавим только, что для электронно-допированной системы второму типу поверхности Ферми с «электронными карманами» вокруг точек $(\pm\pi, 0)$, $(0, \pm\pi)$ отвечает соотношение $t' > 0$; обратное неравенство имеет место для такой же поверхности Ферми в дырочно-допированной системе, так как определяющей будет верхняя хаббардовская зона, подобная перевернутой нижней зоне при $t' < 0$ (рис. 3).

3. Для проверки гипотезы о d-сверхпроводимости всех купратов очень важна постановка фазово-чувствительных экспериментов для соединений LSCO и NCCO. С точки зрения теории d-симметрия предпочтительна для CuO_2-плоскости в любом из купратов, так как одноцентровое отталкивание не подавляет сверхпроводящий порядок d-симметрии, в отличие от s-симметрии.

4. Модель с $t'/t > 0$ дает разумное объяснение анизотропной псевдощели — сдвигу края фотоэмиссии для $\mathbf{k}$ вблизи направлений $(0, \pi)$, $(\pi, 0)$, наблюдаемому в недодопированных образцах BSCCO. Псевдощель является результатом диэлектризации границ вблизи точек $M = (0, \pi)$ в условиях антиферромагнитного расщепления зоны. В литературе [10, 11] высказывались предположения о d-симметрии псевдощели, подразумевающей знакопеременность некоторой величины, отвечающей псевдощели. В этих рассуждениях псевдощель считалась предвестником d-типа сверхпроводящей щели. В данном нами объяснении необходимость в таких гипотезах отпадает. Для проверки правильности предлагаемого объяснения для купратов второй группы следовало бы поставить эксперимент по поиску псевдощели в LSCO и NCCO вдоль направлений $k_x = \pm k_y$.

5. Факт обнаружения «малой» поверхности Ферми (дырочных карманов вокруг точки $(\pi/2, \pi/2)$ в соединении BSCCO) [9] подтверждает отнесение к этому соединению модели с $t'/t > 0$. Можно надеяться, что повышение разрешения в ARPES поможет различить размытые диэлектрические и более резкие металлические участки обобщенной границы Ферми.

6. Изменение знака константы Холла в LSCO и NCCO, возможно, связано с переходом от «малых» к большой поверхности Ферми.

7. Одна из важных задач теории — проверить, можно ли с помощью антиферромагнитно-расщепленных зон без применения неконтролируемых перенормировок описать особенности спиновой восприимчивости $\chi(Q, \omega)$, наблюдаемые в нейтронном рассеянии. (Разного рода перенормировки приходится совершать при использовании нерасщепленной, невозмущенной зоны.) Положительный ответ на поставленный вопрос подтвердил бы гипотезу о том, что главным механизмом формирования нижней и верхней хаббардовских зон является антиферромагнитное чередование спинов.

6. МОДЕЛЬ ОРТОРОМБИЧЕСКИХ ВОЗМУЩЕНИЙ В YBCO

Отдельного исследования заслуживает изучение влияния орторомбических искажений на структуру зон, поверхность Ферми и форму фазовой кривой $T_c(\delta)$. Такие искажения имеют место в YBCO из-за слоев, состоящих из цепочек CuO. Для простейшего описания эффектов орторомбичности введем в модель различное прыжковое взаимодействие t_x, t_y для связей x- и y-ориентации: $t_{x(y)} = t \mp \tau$, т. е. рассмотрим модель

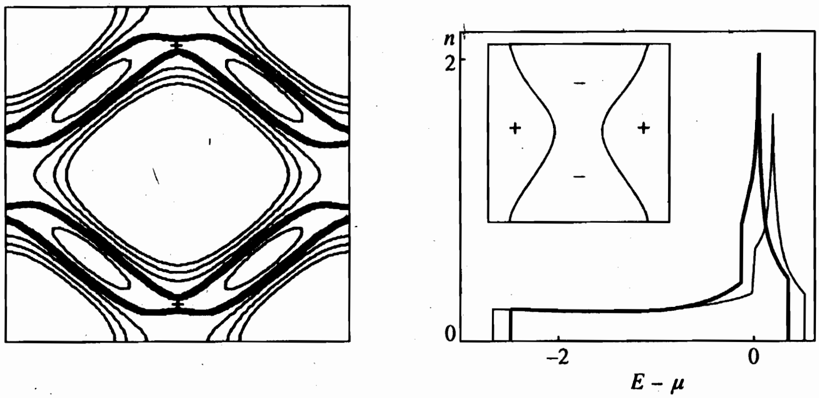

Рис. 9. Слева: граница Ферми (жирная линия) и ближайшие уровни зонной энергии (с интервалом $0.02t$) на плоскости $-\pi < k_{x(y)} < \pi$ для модели (25) с $U = 8$, $V = 0.1$, $t' = 0.1$ и $\tau = 0.05$ (в единицах t) при допировании $\delta = 0.15$. Справа: соответствующая плотность состояний (жирная кривая). Тонкая кривая относится к допированию $\delta = 0.2$, отвечающему второму максимуму фазовой кривой. На вставке — линии узлов сверхпроводящей щели (29) со вкладами s-симметрии при допировании, отвечающем первому максимуму $T_c(\delta)$

$$H = H(U,t,V,t') + \Delta H(\tau), \qquad \Delta H(\tau) = \tau \sum_{n,\sigma} [(c^{\dagger}_{n\sigma} c_{n+e_x,\sigma} - c^{\dagger}_{n\sigma} c_{n+e_y,\sigma}) + \text{H.c.}]. \quad (24)$$

Теперь построение коррелированного состояния (3) с корреляциями типа валентных связей требует, вообще говоря, унитарного преобразования с разными параметрами α_x, α_y для связей x- и y-ориентации. Мы, однако, провели грубые расчеты для вариационной функции с одним параметром $\alpha_x = \alpha_y = \alpha$. Использовался следующий приближенный эффективный гамильтониан:

$$\tilde{H} = \tilde{H}(\alpha, U, t) + \Delta H(V, t') + \Delta\tilde{H}(\tau), \quad (25)$$

в котором главный первый вклад вычислялся в двух порядках по α, малые взаимодействия $\Delta H(V,t')$ — в нулевом порядке, а в третьем члене сохранялись нулевой и первый порядки по α. Учитывая применение модели к YBCO с соотношением $t_b > t_a > 0$ для осей a, b и определение знаков t и τ в (1) и (24), получаем знак $\tau > 0$.

Фазовые кривые $T_c(\delta)$ для модели (24), (25) с $\tau = 0.05$ и параметрами $U = 8$, $V = 0.1$, $t' = 0.1$ и 0.05 (в единицах t) приведены на рис. 1 (штрихи). Они имеют 2 максимума, связанных с более сложной структурой зоны. Для модели с $t' = 0.1$ и уровнем допирования $\delta = 0.15$ на рис. 9 представлены ферми-поверхность и плотность состояний нижней хаббардовской зоны. Теперь два энергетических параметра $4t'$ и 2τ характеризуют детали нижней хаббардовской зоны $E(k)$ вблизи поверхности Ферми. С параметром τ связана разница максимальных энергий E_x^{max} и E_y^{max} профилей зонной энергии при изменении k вдоль пути $\Gamma(0,0) \to \Gamma(2\pi,0)$ по оси k_x, либо вдоль пути $\Gamma(0,0) \to \Gamma(0,2\pi)$ по оси k_y. На оси k_x профиль $E(k)$ имеет один максимум E_x^{max} при $k = (\pi,0)$. На оси k_y профиль $E(k)$ имеет два одинаковых максимума E_y^{max} при $k = (0, \pi \pm \Delta_y)$ (см. крест на рис. 9). В силу периодичности зонной энергии с периодом магнитной ячейки Бриллюэна $E(0,\pi) = E(\pi,0) = E_x^{max} < E_y^{max}$. Для модели (24) с

$\tau = \text{const} = 0.05t$, $t' = 0.1t$ зависимости $E^{max}_{x(y)}(\delta)$ приведены на рис. 2. Соответствующая плотность состояний дана на рис. 9, на котором главная особенность Ван Хова отвечает энергии E^{max}_y наиболее плоского участка зоны. С этой особенностью связан первый максимум на фазовой кривой $T_c(\delta)$ (см. штриховую кривую *3'* на рис. 1). Он отвечает допированию δ_1, при котором химический потенциал пересекает энергию наиболее плоского участка зоны: $E^{max}_y - \mu = 0$. Уровень допирования δ_2, при котором $E^{max}_x - \mu = 0$, приблизительно отвечает второму максимуму на фазовой кривой $T_c(\delta)$.

На наблюдаемой фазовой диаграмме для соединения $YBa_2Cu_3O_{6+y}$ действительно имеются две области с $T^{max}_c \sim 45$ К и с $T^{max}_c \sim 95$ К при концентрациях y избыточного кислорода $y \sim 0.65$, $y \sim 0.96$. Величина y связана (но не тождественна) с уровнем допирования δ плоскости CuO_2. В отличие от расчета для модели (24) с $\tau = 0.05t$, на экспериментальной фазовой кривой области большего допирования отвечает более высокая температура перехода T_c, чем области низкого допирования. Причина несоответствия может быть в грубости нашего расчета. Несомненно, более низкой энергии отвечает коррелированная функция с разными значениями α_x и α_y для связей x- и y-ориентаций. Более строгие расчеты, как и исследование сверхпроводимости в альтернантных димерных структурах валентных связей [19], возможно, прояснили бы ситуацию.

Заметим, что во всей области допирования, $\delta_1 < \delta < \delta_2$, мы имеем разную связность занятого электронами фазового пространства по k_x- и k_y-осям. Линия $\Gamma(0,0) \to \Gamma(2\pi,0)$, в отличие от линии $\Gamma(0,0) \to \Gamma(0,2\pi)$, ни разу не пересекает границу Ферми. Такова структура нижней хаббардовской зоны. Открытым остается вопрос: может ли это обстоятельство быть причиной наблюдаемой большой анизотропии удельного сопротивления $\alpha_a/\alpha_b = 2.2$ даже при малой анизотропии прыжкового взаимодействия $t_a/t_b = 0.9$ ($\tau = 0.05t$). Описание асимметрии сопротивления в приближении сильной связи для нерасщепленной валентной зоны требует значения $t_a/t_b = 0.6$, т. е. $\tau = 0.25t$ [26]. Возможно, это различие связано с разной чувствительностью поверхности Ферми к малым взаимодействиям t', τ при учете и без учета расщепления зоны соответственно в (17) или (18).

Наконец, оценим примесь s-симметрии в сверхпроводящем параметре порядка, возникающую от орторомбических искажений в нашей модели. Для упрощения оставим лишь 3 аномальных средних $w_i = \{w^d_1, w_0, w^s_1\}_i$, $i = 1,2,3$. Здесь из аномальных средних w_l d-симметрии оставлен лишь один главный параметр порядка $w^d_1 \equiv w_1$ и добавлено 2 параметра s-симметрии, т. е. учтены следующие аномальные средние:

$$w^{d(s)}_1 = \frac{1}{8N}\sum_n \langle [c_{n\downarrow}c_{n+e_x\uparrow} + c_{n\downarrow}c_{n-e_x\uparrow}] \mp [c_{n\downarrow}c_{n+e_y\uparrow} + c_{n\downarrow}c_{n-e_y\uparrow}] + \text{H.c.}\rangle, \tag{26}$$

$$w^s_0 = \frac{1}{2N}\sum_n \langle c_{n\downarrow}c_{n\uparrow} + \text{H.c.}\rangle. \tag{27}$$

Вычисление температуры перехода T_c проводилось из условия обращения в нуль детерминанта системы однородных линейных уравнений для аномальных средних w_i:

$$w_i - \sum_j D_{ij}w_j = 0. \tag{28}$$

Для выделенного набора аномальных средних матрица D_{ij} дается формулами (45)–(48) Приложения. Собственное решение $\{w_i\}$ системы (28) с нулевым собственным значением позволяет выразить анизотропную сверхпроводящую щель (спаривающее взаимодействие (39), (49) для нижней хаббардовской зоны) в виде

$$W_1^{AF}(k) = A_1(c_x - c_y) + A_2\beta(k) + A_3(c_x + c_y), \quad c_{x(y)} = \cos k_{x(y)}. \tag{29}$$

Коэффициенты A_i и функция $\beta(k) = \cos\gamma_k$ даются формулами (50) и (40) Приложения. Нетрудно проверить, что функция $\beta(k)$ обладает такой же симметрией $\beta(\bar{k}) = -\beta(k)$, как и третье слагаемое в (29). Сверхпроводящая щель (29) знакопеременна, как и в сверхпроводнике чистого d-типа. При допировании $\delta \sim \delta_1$ в области первого максимума фазовой кривой форма узловых линий сверхпроводящей щели (29) представлена на вставке на рис. 9. С ростом δ отклонение узловых линий функции (29) от узловых линий $k_x = \pm k_y$ для чистой d-симметрии увеличивается в модели с постоянным параметром τ. Для описания наблюдаемых проявлений орторомбичности в YBCO [34, 35], возможно, более важна асимметрия поверхности Ферми, нежели малая примесь s-симметрии к основному d-типу в спаривающем взаимодействии (29). Для прояснения ситуации необходимы более детальные исследования, в том числе и роли взаимодействия двух близких CuO_2-плоскостей в YBCO.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Подчеркнем главные результаты работы.

Показано, что коррелированные состояния однозонной модели Хаббарда с корреляциями типа образования валентных связей могут служить основой для описания сверхпроводимости и других низкоэнергетических свойств купратов в области допирования, в которой CuO_2-плоскости характеризуются большим радиусом антиферромагнитных корреляций. Именно образование валентных связей служит источником короткорадиусного притяжения дырок в d-канале, причем константы такого притяжения получены из вариационного расчета.

Выявлено, что фазовая кривая $T_c(\delta)$ для сверхпроводящего перехода и другие свойства очень чувствительны к взаимодействию следующих за ближайшими соседних ячеек. Знак этого взаимодействия t'/t определяет структуру зон и тип поверхности Ферми при малом допировании. Первый тип моделей ($t' > 0$) в недодопированных системах характеризуется открытием «малых» поверхностей Ферми — дырочных карманов вокруг точки $(\pm\pi/2, \pm\pi/2)$. Последнее объясняет появление анизотропной псевдощели в спектрах ARPES и зависимость ее от допирования. Установлена однозначная связь оптимального допирования с пересечением химическим потенциалом особенности Ван Хова, связанной с плоским участком нижней хаббардовской зоны в точке $M = (\pi, 0)$. Приведены аргументы в пользу применимости данного типа моделей к соединениям BSCCO и YBCO.

Показано, что второй тип моделей с $t' < 0$ (или $t' > 0$) для дырочно-(электронно)-допированных систем характеризуется более низкими температурами сверхпроводящего перехода и более широкой фазовой кривой $T_c(\delta)$, смещенной в область меньшего допирования. Эти особенности непосредственно связаны с другой структурой зоны и поверхности Ферми в этих моделях. В недодопированных системах такого типа происходит открытие дырочных (или электронных) карманов вокруг $M = (0, \pm\pi),(\pm\pi, 0)$ при сохранении диэлектрических участков границы магнитной зоны Бриллюэна в районе узлов сверхпроводящего параметра порядка. Как следствие, минимальная энергия ферми-возбуждений в таких системах остается конечной, отличной от нуля величиной. Применимость данного типа моделей к описанию соединений LSCO и NCCO аргументирована. Тем самым выдвинута отличная от общепринятых представлений гипотеза о единой для всех купратов d-симметрии сверхпроводимости. Для NCCO эта гипотеза подкрепляется и совпадением знака расчетной величины $t'/t > 0$ [25–27] и знака $t'/t > 0$, необходимого для реализации II типа поверхностей Ферми при электронном допировании. Более уязвима эта гипотеза для LSCO, где расчетный и предполагаемый знаки t'/t противоположны. Неясна и роль суперструктуры решетки в соединениях LSCO [46]. Фазово-чувствительные эксперименты для соединений LSCO и NCCO и поиск псевдощели с другим типом асимметрии, чем в BSCCO, могли бы помочь в установлении истины.

Показано, что модели с включением орторомбических искажений характеризуются двумя максимумами на фазовой кривой $T_c(\delta)$, связанными с особенностями нижней хаббардовской зоны. Приближенный расчет дает, однако, обратное отношение двух максимальных температур T_c^{max} в сравнении с тем, что наблюдается в YBCO. Оценен также вклад s-симметрии в сверхпроводящий параметр порядка в дополнение к основному вкладу d-симметрии.

Выполнение работы оказалось возможным благодаря Российскому фонду фундаментальных исследований (проект 7-03-33727А и 96-15-97492) и Международному научно-техническому центру (проект 872). Авторы благодарны В. Я. Кривнову за полезные обсуждения.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Для однодетерминантной функции Φ БКШ-типа с удвоенной магнитной ячейкой средняя энергия $\overline{H}(y_i) = \langle \Psi H \Psi \rangle = \langle \Phi \tilde{H} \Phi \rangle$ зависит от набора средних $y_i = \{r_l, d_l, w_l\}_i$ по Φ от одноэлектронных операторов:

$$\hat{r}_l = \frac{1}{2n_l} \sum_{l,\sigma} c^\dagger_{n,\sigma} c_{n+l,\sigma}, \quad \hat{d}_l = \frac{1}{2n_l} \sum_{l,\sigma} (-1)^n \frac{\sigma}{|\sigma|} c^\dagger_{n,\sigma} c_{n+l,\sigma}, \tag{30}$$

$$\hat{w}_l = \frac{1}{4n_l} \sum_{l,\sigma} \mathrm{sign}(l_x^2 - l_y^2) [c^\dagger_{n,\sigma} c^\dagger_{n+l,-\sigma} + \mathrm{H.c.}]. \tag{31}$$

Здесь $l = 0, 1, \sqrt{2}, 2, \sqrt{5}, 3$, а n_l — число всех векторов $\mathbf{l}$ длины $l = |\mathbf{l}|$, по которым ведется суммирование. Средние d_l отличны от нуля только при четном $(l_x + l_y)$, а аномальные средние w_l d-симметрии только при $l_x \neq l_y$. Однодетерминантная функция, минимизирующая $\overline{H}$, является собственной функцией линеаризованного гамильтониана, который в базисе ферми-операторов $b_{ki} = \{c^\dagger_{k\uparrow},\ c^\dagger_{\tilde{k}\uparrow},\ c_{-k\downarrow},\ c_{-\tilde{k}\downarrow}\}_i$ запишется в виде

$$(\tilde{H})_L = \sum_k^F \sum_{i,j=1}^4 h_{ij}(k) b^\dagger_{ki} b_{kj} + \mathrm{const}. \tag{32}$$

Матрица h_{ij} дается формулой

$$h_{ij} = \begin{pmatrix} \epsilon_k - \mu & \Delta_k & W_k & 0 \\ \Delta_k & \epsilon_{\tilde{k}} - \mu & 0 & W_{\tilde{k}} \\ W_k & 0 & -(\epsilon_k - \mu) & -\Delta_k \\ 0 & W_{\tilde{k}} & -\Delta_k & -(\epsilon_{\tilde{k}} - \mu) \end{pmatrix}, \qquad (33)$$

$$\epsilon_k = \frac{1}{2}\sum_l \frac{\partial \overline{H}}{\partial r_l} g_l(k), \quad \Delta_k = \frac{1}{2}\sum_l \frac{\partial \overline{H}}{\partial d_l} g_l(k), \quad W_k = \frac{1}{2}\sum_l \frac{\partial \overline{H}}{\partial w_l} q_l(k). \qquad (34)$$

Функции $g_l(k)$, $q_l(k)$ определяются уравнениями

$$\begin{aligned} g_l(k) = & \ \frac{1}{2}[\cos k_x l_x \cos k_y l_y + \cos k_y l_x \cos k_x l_y], \\ q_l(k) = & \ \frac{1}{2}\mathrm{sign}(l_x^2 - l_y^2)[\cos k_x l_x \cos k_y l_y - \cos k_y l_x \cos k_x l_y]. \end{aligned} \qquad (35)$$

Здесь $\tilde{k} = k + (\pi, \pi)$. 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 одноэлектронных средних, от которых зависит $\overline{H}$. Одноэлектронные собственные функции $\chi_{k\lambda}$ и спектр $E_\lambda(k)$ линеаризованного гамильтониана находятся диагонализацией матрицы (33):

$$\chi_{k\lambda}^\dagger = \sum_j b_{kj}^\dagger S_{j,\lambda}, \qquad h_{ij} S_{j,\lambda} = S_{j,\lambda} E_\lambda \qquad (36)$$

для каждого $k \in F$, принадлежащего магнитной зоне Бриллюэна. Численная и приближенная диагонализации дают прекрасное совпадение результатов ввиду малости $W_k \ll \ll \Delta_k$ сверхпроводящей щели в сравнении с антиферромагнитной. Приближенные собственные значения h_{ij} равны

$$E_\lambda = \mp\sqrt{(E_\nu^{AF} - \mu)^2 + (W_\nu^{AF})^2}, \qquad \lambda = 1, \ldots, 4, \quad \nu = 1, 2. \qquad (37)$$

Здесь энергии $E_{1(2)}^{AF}$ нижней и верхней хаббардовских зон равны

$$E_{1(2)}^{AF} = \frac{1}{2}(\epsilon_k + \epsilon_{\tilde{k}}) \mp \sqrt{\frac{1}{4}(\epsilon_k - \epsilon_{\tilde{k}})^2 + \Delta_k^2}, \qquad (38)$$

а взаимодействие W_ν^{AF}, вызывающее сверхпроводящее спаривание для каждой из зон в случае дырочного ($\nu = 1$) или электронного ($\nu = 2$) допирования, равно

$$W_\nu^{AF} = \frac{1}{2}[W_k - W_{\tilde{k}} \pm \cos\gamma_k (W_k + W_{\tilde{k}})], \qquad \nu = 1, 2, \qquad (39)$$

$$\mathrm{tg}\,\gamma_k = 2\Delta_k/(\epsilon_k - \epsilon_{\tilde{k}}). \qquad (40)$$

Знание собственных функций и спектра позволяет замкнуть процедуру самосогласования, т. е. вычислить искомые средние y_i. Подробности процедуры решения см. в [16].

Одночастичный вклад в преобразованные операторы уничтожения $\tilde{c}_{k\sigma}$ дается формулой (22), в которой функции φ, η определяются выражениями

$$\varphi(k) = 1 - \alpha^2(c_x + c_y)[(1 - 2r_0)r_1 + r_0(1 - r_0) + d_0^2 + 2r_1^2], \qquad (41)$$

$$\eta(k) = -2(c_x + c_y)d_0(1 + \alpha^2 r_1^2), \quad c_{x(y)} = \cos k_{x(y)}. \qquad (42)$$

Переразлагаем $c_{k\sigma}$ в (22) по одночастичным операторам $\chi_{k\sigma}$, которые определят собственную функцию Φ линеаризованного гамильтониана $\tilde{H}_L$,

$$c_{k\uparrow} = \sum_\lambda R_\lambda \chi_{k\lambda}, \quad c_{k\downarrow} = \sum_\lambda Q_\lambda \chi^\dagger_{k\lambda}. \tag{43}$$

Выражения для R_λ, Q_λ различны для квазиимпульсов, попадающих внутрь ($k \in F$) либо вне ($k \notin F$) магнитной зоны Бриллюэна:

$$R_\lambda(k) = Q_{\lambda'}(k) = \begin{cases} \varphi(k)S_{1\lambda} + \eta(k)S_{2\lambda}, & k \in F \\ -\eta(k)S_{1\lambda} + \varphi(k)S_{2\lambda}, & k \notin F \end{cases}. \tag{44}$$

Здесь $\lambda' = \lambda'(\lambda)$ отвечает собственному значению $E_{\lambda'} = -E_\lambda$. В силу соотношений симметрии (44) между Q_λ и R_λ и свойства фермиевских функций $f(E_\lambda) = 1 - f(-E_\lambda)$ получаем окончательное выражение (23) для спектральной функции $A(k\omega)$.

Для модели (24), (25), включающей возмущение $\sim \tau$ орторомбической симметрии, из аномальных средних (31) d-симметрии оставляем лишь главную величину $w_1^d \equiv w_1$ и добавим два аномальных средних w_0 и w_1^s s-симметрии, определенных формулами (26), (27). Таким образом, оставляем лишь три сверхпроводящих параметра порядка $w_i = \{w_1^d, w_0, w_1^s\}$. Тогда для дырочно-допированной системы температура сверхпроводящего перехода определится из уравнения (28), в котором матрица $D_{i,j} = \partial w_i/\partial w_j$ при $w_l = 0$ равна

$$D_{ij} = -N^{-1}\sum_k^F R_{il}(k) a_{lj} \frac{1 - 2f(E_1)}{2E_1}, \tag{45}$$

$$R_{11} = \frac{1}{4}(c_x - c_y)^2, \quad R_{22} = \cos\gamma_k{}^2, \quad R_{33} = \frac{1}{4}(c_x + c_y)^2, \tag{46}$$

$$R_{12} = \frac{1}{2}(c_x - c_y)\cos\gamma_k, \quad R_{13} = \frac{1}{4}(c_x^2 - c_y^2), \quad R_{23} = \frac{1}{2}(c_x + c_y)\cos\gamma_k. \tag{47}$$

Здесь $c_{x(y)} = \cos k_{x(y)}$, величина γ_k определяется из уравнения (40), f — фермиевская функция, $E_1(k) = E_1^{AF}(k) - \mu$ — энергия нижней хаббардовской зоны, отсчитанная от химического потенциала, а коэффициенты a_{ij} равны

$$a_{ij} = \left.\frac{\partial^2 \overline{H}}{\partial w_i \partial w_j}\right|_{w_i=0}. \tag{48}$$

Для дырочно-допированной системы с антиферромагнитным расщеплением зоны роль спаривающего сверхпроводящего взаимодействия (сверхпроводящей щели) для состояний нижней зоны играет величина (39). При оставленных аномальных средних (26), (27) она характеризуется суммой вкладов d- и s-симметрии

$$W_k = A_1(c_x - c_y) + 2A_2\cos\gamma_k + A_3(c_x + c_y), \tag{49}$$

с коэффициентами

$$A_i = \frac{1}{2}[a_{i1}w_1^d + a_{i2}w_0 + a_{i3}w_1^s]. \tag{50}$$

Здесь γ_k и a_{ij} определяются из (40), (48).

Литература

1. E. Dagotto, Rev. Mod. Phys. **66**, 763 (1994).
2. D. J. Scalapino, Phys. Rep. **250**, 329 (1995).
3. Z.-X. Shen and D. S. Dessau, Phys. Rep. **253**, 1 (1995).
4. J. W. Allen, R. Claessen, R. O. Anderson et al., in *The Physics of the Hubbard Model*, ed. by D. K. Campbel, JMP Carmelo and F. Guinea, Plenum Press, NY (1994).
5. E. Dagotto and T. M. Rice, Science **271**, 618 (1996).
6. Ю. А. Изюмов, УФН **167**, 465 (1997).
7. J. R. Kirtley, C. C. Tsuei, J. Z. Sun et al., Nature **373**, 225 (1995).
8. D. A. Brawner, C. Mancer, and H. R. Ott, Phys. Rev. **55**, 2788 (1997).
9. D. S. Marshall, D. S. Dessau, A. G. Loeser et al., Phys. Rev. Lett. **76**, 4841 (1996).
10. A. G. Loeser, Z.-X. Shen, D. S. Dessau et al., Science **273**, 325 (1997).
11. H. Ding, T. Yokoya, J. C. Campuzano et al., Nature **382**, 51 (1996).
12. N. Nagaosa, Science **275**, 1078 (1997).
13. S. C. Zhang, Science **275**, 1089 (1997).
14. Р. О. Зайцев, Письма ЖЭТФ **55**, 141 (1992); **56**, 355 (1992).
15. J. E. Hirsch, Phys. Rev. Lett. **54**, 1317 (1985).
16. А. А. Овчинников, М. Я. Овчинникова, Е. А. Плеханов, ЖЭТФ **114**, 985 (1998).
17. А. А. Овчинников, М. Я. Овчинникова, Е. А. Плеханов, Письма в ЖЭТФ **67**, 350 (1998).
18. P. W. Anderson, Science **235**, 1196 (1987).
19. А. А. Овчинников, М. Я. Овчинникова, ЖЭТФ **110**, 342 (1996); **112**, 1409 (1997).
20. M. C. Gutzwiller, Phys. Rev. A **137**, 1726 (1965).
21. J. H. Jefferson, H. Eskes, and L. F. Feiner, Phys. Rev. B **45**, 7959 (1992).
22. H. B. Schuttler and A. J. Fedro, Phys. Rev. B **45**, 7588 (1992).
23. A. A. Ovchinnikov and M. Ya. Ovchinnikova, J. Phys. Cond. Matter **6**, 10317 (1994).
24. D. Duffy and A. Moreo, Phys. Rev. B **52**, 15607 (1995).
25. M. S. Hybertsen, E. B. Stechel, M. Schluter, and D. R. Jennison, Phys. Rev. B **41**, 11068 (1990).
26. J. Yu and A. J. Freeman, J. Electr. Spectr. Rel. Phenom. **66**, 387 (1994).
27. R. J. Radke and M. R. Norman, Phys. Rev. B **50**, 9554 (1994).
28. A. R. Kamp and J. R. Schriefer, Phys. Rev. B **42**, 7967 (1990).
29. E. Dagotto, A. Nazarenko, and A. Boninsegni, Phys. Rev. Lett. **73**, 728 (1994).
30. S. Haas, Phys. Rev. B **51**, 11748 (1995).
31. J. H. Kim, K. Levin, and A. Auerbach, Phys. Rev. B **39**, 11633 (1989).
32. Д. Т. Макерт и др., в кн.*Физические свойства высокотемпературных сверхпроводников*, т. I, под ред. Д. М. Гинзберг, Мир, Москва (1991), стр. 265. (пер. книги *Physical Properties of High Temperature Superconductors*, ed. by D. M. Ginzberg, Singapore (1989))
33. J. B. Torrance, A. Y. Tokura, A. I.Nazzal et al., Phys. Rev. Lett. **61**, 1127 (1988).
34. A. G. Sun, A. Truscoff, A. S. Katz et al., Phys. Rev. B **54**, 6734 (1996).
35. K. A. Kuznetzov, A. G. Sun, B. Chen et al., Phys. Rev. Lett. **79**, 3050 (1997).
36. H. Takagi, T. Ito, S. Ishabashi et al., Phys. Rev. B **40**, 2254 (1989).
37. J. L. Peng, S. Y. Li, and R. L. Greene, Phys. Rev. B **43**, 13606 (1991).
38. P. Benard, L. Chen, and A. H. Tremblay, Phys. Rev. B **47**, 15217 (1993).
39. T. E. Mason, G. A. Aepli, S. M. Hayden et al., Phys. Rev. Lett. **71**, 919 (1993).
40. Р. Дж.Биржено, Дж. Ширан, в кн.: *Физические свойства высокотемпературных сверхпроводников*, т. I, под ред. Д. М. Гинзберг, Мир, Москва (1991), стр. 163.
41. Q. Si, Y. Zha, K. Levin, and J. P. Lu, Phys. Rev. B **47**, 9055 (1993).
42. P. B. Littlewood, J. Zaanen, and G. Aepli, Phys. Rev. B **48**, 487 (1993).
43. J. Yu and A. J. Freeman, J. Electr. Spectr. Rel. Phen. **66**, 281 (1994).
44. Y. Sakisaka, J. Electr. Spectr. Rel. Phen. **66**, 387 (1994).
45. D. H. King, Z.-X. Shen, D. S. Dessau et al., Phys. Rev. Lett. **70**, 3159 (1993).
46. A. Bianconi, N. L. Saini, M. Missori et al., Phys. Rev. Lett. **76**, 3412 (1997).

Примечание при корректуре (18 *декабря* 1998 г.) Необходимо отметить близость полученных результатов с результатами работы Н. М. Плакиды и др. [1], в которой те же проблемы исследуются на другом (вероятно, эквивалентном) языке t-J-модели и спин-поляронного спаривания. И в [1], и у нас область сверхпроводимости оказывается внутри области существования $2D$-антиферромагнитного порядка. Каждый из подходов описывает сверхпроводящий порядок без использования дополнительных эмпирических параметров. В обоих подходах выявлено, что изменение знака взаимодействия диагональных прыжков меняет тип поверхности Ферми и приводит к сдвигу оптимального допирования в фазовой кривой. Следует отметить также работу [2].

1. N. M. Plakida, V. S. Oudovenko, P. Horsh, and A. I. Liechtenstein, Phys. Rev. **55**, R11997 (1997).
2. R. S. Markiewicz, Phys. Rev. **56**, 9091 (1997).