

ВАРИАЦИОННЫЕ ПРОБЫ ТОКОВЫХ ПАРАМЕТРОВ ПОРЯДКА В МОДЕЛИ ХАББАРДА

А. А. Овчинников, М. Я. Овчинникова*

*Институт химической физики им. Н. Н. Семенова Российской академии наук
117977, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 6 декабря 2000 г.

Проведены вариационные тесты токовых параметров порядка как предполагаемых источников псевдощелевого нормального состояния купратов. Расчеты выполнены на базе состояния с корреляциями типа валентных связей, образование которых в принципе способно индуцировать как сверхпроводящий порядок d -симметрии, так и токовые фазы. Для $t-t'-U$ -моделей Хаббарда с большим U ($\sim 8t$) и хаббардовским расщеплением зоны показано, что 1) фазы чередующихся зарядовых и продольных спиновых токов нереализуемы; 2) поперечные спиновые токи не совместимы со сверхпроводящим порядком, а на фоне нормального состояния они могли бы существовать лишь в очень узкой области допирования вблизи оптимального. Эта область не отвечает области существования псевдощели в купратах, что опровергает упомянутую гипотезу происхождения псевдощели. Обсуждаются требования к параметрам моделей, для которых учет корреляций типа валентных связей дает разумную фазовую кривую. Предсказано существование токовых фаз в $t-t'-U-V$ -моделях Хаббарда с большим взаимодействием, $V > 0.25t$, частиц соседних узлов при полностью подавленной d -сверхпроводимости.

PACS: 71.10.Fd, 71.27.+a, 71.10.Hf

Недавние измерения [1, 2] туннельных спектров купратов при разных магнитных полях и температурах позволили отличить псевдощель от сверхпроводящей щели, т. е. доказать их разную природу. Это опровергает интерпретацию псевдощели как предвестника сверхпроводящей щели [3]. Предлагалось несколько других гипотез [4–11], в которых псевдощель Δ_{ps} и сверхпроводящая щель Δ_{sc} имеют разную природу. Во всех теориях [4–11] суммарная щель, проявляющаяся в фотоэмиссионных экспериментах (ARPES), имеет вид

$$\Delta \sim \sqrt{\Delta_{ps}^2 + \Delta_{sc}^2}. \quad (1)$$

Главная проблема состоит в описании обратной зависимости $\Delta_{ps}(\delta)$ от допирования δ , а именно, рост Δ_{ps} от нулевых значений при почти оптимальном допировании δ_{opt} до больших величин при $\delta \rightarrow 0$ в так называемой недодопированной области $\delta < \delta_{opt}$.

В ряде работ [4–6] появление псевдощели связывалось с развитием в недодопированной области новых скрытых параметров порядка. Так, в [4] в качестве такого параметра порядка предложены волны

зарядовой плотности с вектором $Q = (\pi, \pi)$. Однако открытым остается вопрос о происхождении притяжения в s -канале, способного компенсировать существующее локальное отталкивание $U > 0$. Именно благодаря последнему возникает антиферромагнетизм недопированных систем, т. е. волн спиновой плотности, не совместимых с волнами зарядовой плотности. В [5, 6] обсуждалась возможная связь псевдощели с развитием таких параметров порядка, как токовые состояния орбитального антиферромагнетика (d -density wave, DDW), или состояния с аналогичными спиновыми токами. Необъясненным остается вопрос о зависимости $\Delta_{ps}(\delta)$.

В работах [7–11], основанных на $t-t'-J$ - или $t-t'-U$ -моделях, появление псевдощели связывается с изменением топологии поверхности Ферми при оптимальном допировании от «малой» к большой поверхности Ферми. Для этих моделей расщепление на верхнюю и нижнюю хаббардовские подзоны сохраняется в достаточно большой области допирования. В [8] оно получено из вариационных расчетов на базе коррелированного состояния с корреляциями типа валентных связей. Некоторые наблюдаемые особенности в зависимости анизотропии щели $\Delta(\varphi)$ и отношения Δ^{max}/kT_c от допирования

*E-mail: movchin@center.chph.ras.ru;
aovchin@mpipxs-dresden.mpg.de

(см. обзор [12]) удается объяснить на основе такой картины [13], поскольку увеличение Δ_{ps} с уменьшением δ имеет естественное объяснение — вытекает из структуры нижней зоны при $t'/t > 0$. Однако модели с участием нижней хаббардовской зоны дают слишком большую асимметрию туннельных спектров [13]. Последние способны «прощупывать» плотность состояний системы как ниже, так и выше химического потенциала.

Наконец, вычисления в технике слэив-бозонов [14] говорят в пользу того, что псевдощель связана с возникновением фазы ближнего порядка волн спиновой плотности, т.е. с начальной стадией формирования волн спиновой плотности и диэлектрической хаббардовской щели. В таком случае необходимая обратная зависимость $\Delta_{ps}(\delta)$ от допирования находит естественное объяснение, однако необъясненным остается анизотропия псевдощели, подобная анизотропии сверхпроводящей щели d -симметрии.

Цель настоящей работы — проверка гипотезы о скрытых токовых параметрах порядка как причине происхождения псевдощели. Проверка проводится на основе вариационных расчетов с коррелированным состоянием с образованием валентных связей (зонным аналогом RVB-состояний Андерсона). Раньше было показано, что выводимый при этом подходе эффективный гамильтониан и, в частности, взаимодействие коррелированных прыжков, возникающее при образовании валентных связей, обеспечивает притяжение дырок в d -канале и соответствующую d -сверхпроводимость, совместимую с антиферромагнитным порядком. Оно же в принципе допускает возможность состояний с токовыми параметрами порядка — различных токовых фаз. Как будет видно далее, это следует из отрицательности констант при соответствующих квадратичных членах в средней энергии. Поэтому имеется возможность с помощью данного эффективного гамильтониана исследовать фазовую диаграмму таких токовых состояний и вопросы о совместимости их со сверхпроводящим порядком.

Вычисления проводились методом, предложенным в [8], для $t - t' - U - V$ -модели Хаббарда:

$$\begin{aligned} H &= H(U, t) + \Delta H(V, t'), \\ \Delta H(V, t') &= V \sum_{\langle nm \rangle} n_n n_m + \\ &+ t' \sum_{\langle\langle nm \rangle\rangle} \sum_{\sigma} (c_{n\sigma}^{\dagger} c_{m\sigma} + \text{H.c.}). \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь $H(U, t)$ — гамильтониан классической модели Хаббарда со стандартными параметрами U, t . Дополнительный член ΔH включает прыжковое взаимодействие t' следующих ближайших соседей и взаимодействие V ближайших узлов. Вариационное коррелированное состояние Ψ с корреляциями типа валентных связей строится [8] с помощью унитарного преобразования некоррелированного состояния Φ :

$$\begin{aligned} \Psi &= \hat{W}(\alpha)\Phi, \quad \hat{W}(\alpha) = \exp\left[\alpha \sum_{\langle nm \rangle} Z_{nm}\right], \\ Z_{nm} &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma} (c_{n\sigma}^{\dagger} c_{m\sigma} - \text{H.c.})(n_{n,-\sigma} - n_{m,-\sigma}). \end{aligned} \quad (3)$$

Выбор унитарного оператора $W(\alpha)$ с вариационным параметром α обоснован в [8]. Там же дан вывод эффективного гамильтониана \bar{H} , действующего в базе некоррелированных состояний $\{\Phi\}$:

$$\begin{aligned} H_{eff}(\alpha) &= W^{\dagger}(\alpha)HW(\alpha) \approx \\ &\approx H + \alpha[H, Z] + \frac{\alpha^2}{2}[[H, Z], Z]. \end{aligned} \quad (4)$$

В качестве некоррелированных функций Φ используются функции с удвоенной магнитной ячейкой для тестирования возможных упорядочений в системе: антиферромагнитного спинового порядка, сверхпроводящего порядка d -симметрии и ранее не исследованных токовых параметров порядка (они же волны зарядовой или спиновой плотности d -симметрии). Для коррелированного состояния (3) средняя энергия

$$\langle H \rangle_{\Psi} = \langle H_{eff} \rangle_{\Phi} = \bar{H}(y_{\nu})$$

находится как явная функция от набора одно-электронных средних $y_{\nu} = \langle y_{\nu} \rangle_{\Phi}$ по некоррелированному состоянию Φ (ниже для краткости индекс Φ в средних $\langle \dots \rangle_{\Phi}$ опущен). В результате функция $\bar{H}(y_{\nu})$ для эффективного гамильтониана (2) оказывается зависящей от величин $y_{\nu} = \{r_l - \delta_{l0}, d_l, w_l, J_l\}_{\nu}$:

$$\begin{aligned} r_l &= \frac{1}{2N} \sum_{n,\sigma} \langle c_{n\sigma}^{\dagger} c_{n+l,\sigma} \rangle, \\ d_l &= \frac{1}{2N} \sum_{n,\sigma} (-1)^n \frac{\sigma}{|\sigma|} \langle c_{n\sigma}^{\dagger} c_{n+l,\sigma} \rangle, \\ w_l &= \frac{1}{2N} \sum_n \text{sign}(l_x^2 - l_y^2) \langle c_{n\uparrow}^{\dagger} c_{n+l\downarrow}^{\dagger} + \text{H.c.} \rangle, \\ J_{\mu} &= \frac{i}{8N} \sum_n \sum_{s,s'} (-1)^n (\sigma_{\mu})_{s,s'} \times \\ &\times \langle [c_{ns}^{\dagger} c_{n+\bar{x},s'} - c_{ns}^{\dagger} c_{n+\bar{y},s'}] - \text{H.c.} \rangle. \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь r_l — компоненты плотности, d_l — аналогичные компоненты чередующегося спина, w_l — аномальные средние d -симметрии, J_μ — токовые параметры порядка. В силу симметрии величины r_l , d_l , w_l зависят только от модуля $l = |\mathbf{l}|$, но не от направления вектора $\mathbf{l} = (l_x, l_y)$. В уравнениях (5) σ_μ ($\mu = 0, 1, 2, 3$) — матрицы Паули и \bar{x} , \bar{y} — единичные векторы соответственно по осям x и y .

Прежние расчеты [8] относились к состояниям без токовых компонент для моделей с параметрами $U/t = 8$, $V/t = 0-0.1$, $t'/t = 0.05-0.1$. Для таких моделей характерны решения с антиферромагнитным расщеплением зоны в достаточно большой области допирования и совместимая с антиферромагнитным порядком сверхпроводимость d -симметрии в границах той же области. Значение δ_{opt} зависело от t'/t и составляло $\delta_{opt} = 0.18-0.22$ для указанных значений t'/t . Было проверено также, что учет только одной первой гармоники $l = 1$ среди всех аномальных средних w_l передает фазовую кривую с достаточной точностью. По этой причине в расчетах фазовых кривых мы сохраним только первую гармонику как в аномальных средних, так и в токовых параметрах порядка. В таком приближении средняя энергия в расчете на один центр решетки равна

$$\frac{1}{N} \bar{H}(y_\nu) = \bar{H}^N(r_l, d_l) + k_w w_1^2 + k_J \sum_{\mu} J_{\mu}^2, \quad (6)$$

где \bar{H}^N относится к нормальной фазе. Токовые компоненты $J_{\mu=0,1,2,3}$ относятся к чередующимся зарядовым токам ($\mu = 0$) или спиновым токам разных проекций спина. Речь идет о циркулярных токах на элементарных плакетках квадратной решетки. Величины $J_{\mu=1,2}$ — спиновые токи с поляризацией спина, поперечной по отношению к оси z квантования чередующихся спинов в d_0 .

Выражения для величин w_1 и J_μ через операторы в k -пространстве имеют вид

$$w_1 = \frac{1}{2N} \sum_k^G \langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger + \text{H.c.} \rangle \varphi^d(k), \quad (7)$$

$$J_\mu = \frac{i}{4N} \sum_k^G \sum_{s,s'} (\sigma_\mu)_{s,s'} \langle c_{ks}^\dagger c_{\bar{k}s'} - \text{H.c.} \rangle \varphi^d(k), \quad (8)$$

$$\tilde{k} = k + (\pi, \pi), \quad \varphi^d(k) = \frac{1}{2} (\cos k_x - \cos k_y).$$

Функции $\varphi^d(k)$ в (7), (8) имеют одинаковую угловую зависимость $d_{x^2-y^2}$ -симметрии. Тот факт, что наблюдаемая псевдощель характеризуется близкой анизотропией, дал авторам [5, 6] основания для гипотезы о связи псевдощели и токовых параметров

порядка. Суммирование по k распространяется на всю зону Бриллюэна G исходной решетки.

Поясним, какие взаимодействия в эффективном гамильтониане (4) в принципе могут индуцировать как d -сверхпроводимость, так и токовые параметры порядка J_μ . Уже в члене первого порядка по вариационному параметру α в эффективном гамильтониане (4) появляется взаимодействие коррелированных прыжков вида

$$V_{chi} = -\frac{1}{2} \alpha U \sum_{\langle nm \rangle, \sigma} (c_{n\sigma}^\dagger c_{m\sigma} + \text{H.c.}) \times \\ \times (n_{n,-\sigma} + n_{m,-\sigma} - 2n_{n,-\sigma} n_{m,-\sigma}). \quad (9)$$

Среднее от (9) по состояниям с параметрами порядка (5) в расчете на один центр решетки равно

$$\frac{1}{N} \langle V_{chi} \rangle = -8\alpha U r_1 [r_0(1 - r_0) + d_0^2 + r_1^2] + \\ + \kappa^{(1)} \left(w_1^2 + \sum_{\mu} J_{\mu}^2 \right), \quad \kappa^{(1)} = -8\alpha U r_1. \quad (10)$$

Требование понижения энергии нормального состояния при образовании валентных связей, т. е. отрицательный знак первого члена в (10), определяет такой знак α , при котором константы $\kappa^{(1)}$ при членах w_1^2 и J_{μ}^2 в (10) отрицательны. Это означает принципиальную возможность существования токовых фаз. Для каждой связи $\langle nm \rangle$ взаимодействие (9) содержит вклад $V_{nm} \sim \alpha U c_{n\sigma}^\dagger c_{m\sigma} n_{n,-\sigma} n_{m,-\sigma}$, обеспечивающий притяжение дырок в d -канале. Такой член был опущен в усеченном взаимодействии коррелированных прыжков вида $V_{nm} \sim c_{n\sigma}^\dagger c_{m\sigma} (n_{n,-\sigma} + n_{m,-\sigma})$. Последнее применялось Хиршем [15] к добавочным дыркам кислородной системы с малой концентрацией. Оно способно обеспечить притяжение лишь в s -канале. Но однозонная модель Хаббарда (2) относится к гибридной p - d -зоне с большой, порядка единицы, суммарной концентрацией дырок и здесь s -сверхпроводимость подавлена сильным отталкиванием U . Между тем существенный при большой концентрации член вида $\sim c_{n\sigma}^\dagger c_{m\sigma} n_{n,-\sigma} n_{m,-\sigma}$ способен обеспечить притяжение в d -канале.

Полные константы κ_w , κ_J сверхпроводящих и токовых параметров порядка в (6),

$$\kappa_w = \kappa_w^{(1)} + \kappa_w^{(2)} + 4V, \quad \kappa_J = \kappa_J^{(1)} + \kappa_J^{(2)} - 4V, \quad (11)$$

включают вклады первого и второго порядков по α и кулоновоподобное взаимодействие соседей. Ранее [8] при исследовании сверхпроводимости были рассчитаны все вклады в κ_w . При $U/t = 8$

и $V = 0$ эта константа меняется в пределах $\kappa_w(V = 0) = -(1.2-1.5)t$ в области $\delta \leq 0.3$. Она обеспечивает d -сверхпроводимость, обязанную образованию валентных связей. Введение взаимодействия $V > 0$ подавляет d -сверхпроводимость, уменьшая T_c^{max} , и при $V \geq 0.3t$, когда константа κ_w становится положительной, образование пар становится невозможным. Но это же взаимодействие V увеличивает модуль отрицательной константы k_J . Вклады первого порядка по α в κ_w и κ_J одинаковы. Для вклада $\kappa_J^{(2)}$ второго порядка по α бралась аналогичная оценка $\kappa_J^{(2)} \sim \kappa_w^{(2)}$. Она достаточна в условиях, когда неопределенный параметр V варьировался в значительных пределах. Таким образом, расчеты проводились для моделей со следующим соотношением констант:

$$\kappa_J = \kappa_w - 8V, \quad \kappa_w = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \bar{H}}{\partial w_1^2}. \quad (12)$$

Существование токовых параметров порядка и совместимость их со сверхпроводящим порядком исследуется на основе решений среднего поля для задачи с эффективным гамильтонианом (4).

Процедура минимизации \bar{H} по Φ стандартна. Самосогласованное некоррелированное состояние $\Phi = \prod_{k\lambda} \langle \chi_{k\lambda}^\dagger \rangle$ определяется заполнением нижних одноэлектронных состояний $\chi_{k\lambda}^\dagger$ линейризованного гамильтониана

$$H_{lin} = \sum_{\nu} \frac{\partial \bar{H}}{\partial y_{\nu}} (\hat{y}_{\nu} - y_{\nu}) + \bar{H}(y_{\nu'}) = \sum_{\sigma} \sum_k^{G/4} \hat{h}_{k\sigma} + \text{const.} \quad (13)$$

Здесь операторы \hat{y}_{ν} отвечают соответствующим средним y_{ν} в определениях (5) [8]. Для общего случая, когда отличны от нуля все указанные параметры порядка (5), вектор k в сумме пробегает $1/4$ часть зоны Бриллюэна G исходной решетки, например, область $\{|k_x + k_y| \leq \pi, \quad k_x > 0\}$. Для каждого k соответствующий линейный оператор \hat{h}_k в (13) имеет вид

$$\hat{h}_k = h_{ij}(k) b_{ik}^\dagger b_{jk} \quad (14)$$

в базисе следующих операторов намбу-представления:

$$b_{ik}^\dagger = \{c_{k\uparrow}^\dagger, c_{\bar{k}\uparrow}^\dagger, c_{k\downarrow}^\dagger, c_{\bar{k}\downarrow}^\dagger, c_{-k\uparrow}, c_{-\bar{k}\uparrow}, c_{-k\downarrow}, c_{-\bar{k}\downarrow}\}_i, \quad (15)$$

$$i = 1, \dots, 8, \quad \bar{k} = k + (\pi, \pi).$$

Матрица $h_{ij}(k)$ дается формулой (20) Приложения. Диагонализация h_{ij} определяет согласно (24) одноэлектронные энергии $E_{k\lambda}$ и собственные функции

$\chi_{k\lambda}^\dagger$ линейризованного гамильтониана. Последние, в свою очередь, определяют искомые параметры порядка $\{y_{\nu}\}$ в соответствии с формулами (25) Приложения.

Предварительно, до исследования совместимости токового и сверхпроводящего порядков, проводился поиск фазовых кривых $T_J(\delta)$ и $T_c(\delta)$. Напомним, что для рассматриваемых решений нормальная фаза отвечает спиновому антиферромагнитному порядку и хаббардовскому расщеплению зоны. Энергии соответствующих решений с двумерным антиферромагнитным порядком значительно ниже энергий парамагнитных состояний. Это не означает реального дальнего порядка в системе, но говорит лишь о достаточно большой длине антиферромагнитных корреляций. Хотя приближение среднего поля в отношении H_{eff} не может дать величину длины антиферромагнитных корреляций, мы предполагаем, что оно тем не менее может служить базой для исследования эффектов близкодействия от корреляций типа валентных связей. Отметим также, что область сверхпроводимости как по температуре, так и по допированию оказывается разумной только для антиферромагнитных решений в связи с увеличением плотности состояний в нижней подзоне. Для парамагнитных решений величина T_c и ширина области сверхпроводимости по допированию оказываются слишком малыми.

Температуры $T_J(\delta)$ и $T_c(\delta)$ возникновения токовой фазы с поляризацией μ или d -сверхпроводимости на базе низшего нормального состояния с антиферромагнитным порядком определяются из уравнений, являющихся линейным разложением соответствующих уравнений (25) для J_{μ}, w_1 при $J_{\mu} \rightarrow 0, w_1 \rightarrow 0$. В результате для $T_J(\delta)$ и $T_c(\delta)$ получаем соответственно уравнения

$$1 - \frac{1}{2N} \kappa_J \sum_k^{G/2} [g_{\mu}(k) \varphi_k^q]^2 \frac{1}{kT} \times \times f(E_1)[1 - f(E_1)] = 0, \quad (16)$$

$$1 - \frac{1}{4N} \kappa_w \sum_k^{G/2} [g_w(k) \varphi_k^d]^2 \frac{1}{|E_1|} \times \times [1 - 2f(|E_1|)] = 0, \quad (17)$$

$$E_1 = \bar{\xi}_k - \mu - D_k, \quad D_k = \sqrt{\delta \xi_k^2 + \Delta_k^2},$$

$$\bar{\xi}_k = \frac{1}{2}(\xi_k + \xi_{\bar{k}}),$$

$$\delta\xi_k = \frac{1}{2}(\xi_k - \xi_{\bar{k}}), \quad g_{\mu=1,2}(k) = g_w(k) = -\frac{\Delta_k}{D_k}, \quad (18)$$

$$g_{\mu=0,3}(k) = -\frac{\delta\xi_k}{D_k}.$$

Здесь f — фермиевская функция, $E_1 = E_1(k)$ — энергия нижней хаббардовской зоны, отсчитанная от химического потенциала, функции ξ_k, Δ_k определены формулами (21) Приложения. Вектор k в сумме пробегает значения внутри магнитной зоны Бриллюэна (составляющий половину зоны Бриллюэна G исходной решетки). Функции $g(k)$ отражают перенормировку спаривающих взаимодействий, т.е. матричных элементов от операторов тока J_μ или w_1 по состояниям нижней хаббардовской зоны. Константа κ_w в (17) вычислялась, как и в [8], с учетом вкладов аномальных средних в \bar{H} от всех членов эффективного гамильтониана (2). Вклады первого порядка по вариационному параметру α в константы κ_J и κ_w совпадают. С учетом этого для константы κ_J использовалась величина, оцененная по формуле (12).

Расчеты показали, что чередующиеся зарядовые и продольные токовые параметры порядка $J_{\mu=0,3}$ нереализуемы в моделях с антиферромагнитным расщеплением зоны. Причина заключается в том, что для $\mu = 0, 3$ функция g_μ , характеризующая матричные элементы от J_μ по состояниям от нижней зоны, обращается в нуль в областях $k \sim (\pi, 0)$, ответственных за ван-хововскую особенность в плотности состояний. Аналогичные функции для поперечных токовых поляризации с $\mu = 1, 2$ в (16), как и для аномальных средних d -симметрии, стремятся к 1 при $k \rightarrow (\pi, 0)$. В отсутствие реального дальнего антиферромагнитного порядка речь идет только о поляризациях относительно локальной ориентации чередующегося спина. Различие свойств поперечных и продольных токовых поляризаций имеет то же происхождение, что и различие продольной и поперечной спиновых восприимчивостей в моделях с антиферромагнитным расщеплением зоны [16, 17].

На рисунке 1 представлены фазовые кривые $T_J(\delta)$ для поперечных поляризаций и $T_c(\delta)$ для моделей с $U/t = 8$ и двумя вариантами параметров t', V . Параметр t' влияет непосредственно на положение ван-хововской особенности и соответственно на величину δ_{opt} . Он выбирался из разумных значений $\delta_{opt} \sim 0.2-0.24$. Введение взаимодействия $V > 0$ подавляет сверхпроводящий, но усиливает токовый порядок согласно его вкладам (12) в константы κ_w, κ_J , т.е. уменьшает T_c^{max} , но повышает T_J^{max} . Речь идет о температурах возникновения одного из двух параметров порядка, сверхпроводящего или токового, на фоне нормального состояния без указанных

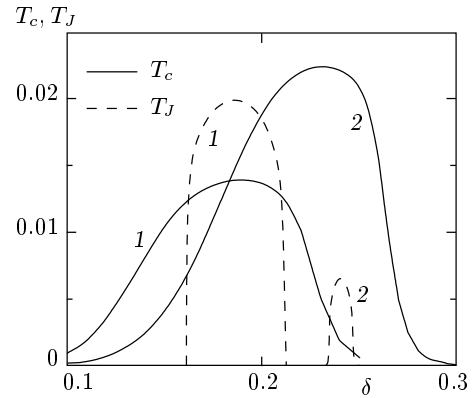


Рис. 1. Фазовые кривые $T_c(\delta)$ и $T_J(\delta)$, отвечающие переходу решений нормальной фазы в сверхпроводящее состояние или токовое состояние с поперечной поляризацией для модели Хаббарда с $U = 8$. Кривые 1 относятся к модели с параметрами $t' = 0.05, V = 0.1$, кривые 2 — к модели с $t' = 0.1, V = 0$. Все величины T_c, T_J, U, t', V — в единицах t

порядков. Фазовая кривая токовой фазы ограничивает лишь очень узкую область допирования вблизи оптимального значения. Ее ширина существенно меньше ширины области сверхпроводимости.

Полный самосогласованный расчет как со сверхпроводящими, так и с токовыми параметрами порядка показывает их несовместимость. Итерационная процедура сходится либо к решению со сверхпроводящим порядком без токов ($w_l \neq 0, J = 0$), либо к токовому состоянию без аномальных средних ($J \neq 0, w_l = 0$). Последнее существует только в узкой области допирования вокруг оптимального значения и только при соотношении констант $\kappa_J/\kappa_w > 1.45$. В частности, для систем с $V = 0$ ($\kappa_J \sim \kappa_w$) решений с токовым порядком не существует: во всей области допирования сверхпроводящий порядок подавляет токовый. С увеличением V решения с $J \neq 0$ возникают в узкой области допирования вблизи оптимального значения, но с подавлением в этой области аномальных средних. На рисунке 2 приведены полученные в самосогласованном расчете параметры порядка $w_l, J_{\mu=2}$ как функции допирования для модели с параметрами $U/t = 8, t'/t = 0.05, V/t = 0.1$. Но такое поведение не соответствует эксперименту, так как в купратах не наблюдается подавление сверхпроводимости в середине области ее существования (при $\delta \sim \delta_{opt}$).

Интересно подчеркнуть, что для $t-t'-U-V$ -моделей Хаббарда с большим взаимодействием час-

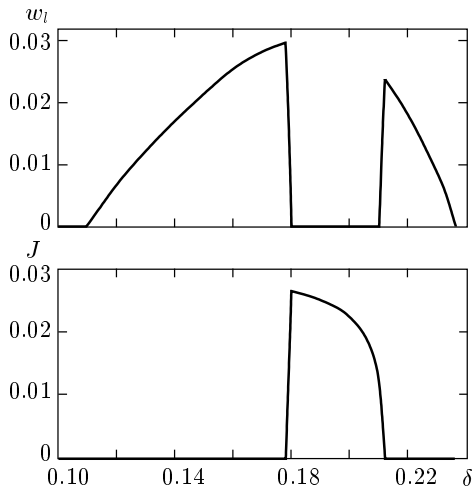


Рис. 2. Зависимости от допирования аномально-го и токового параметров порядка в полном само-согласованном решении среднего поля для эффек-тивного гамильтониана (4), учитывающего корреляции типа валентных связей. Параметры модели — $U = 8$, $t' = 0.05$, $V = 0.1$ (в единицах t). На рис. 1 им отвечают фазовые кривые 1

тиц соседних узлов, $V > 0.25t$, d -сверхпроводимость оказывается полностью подавленной, но возникают устойчивые токовые фазы с поперечной поляризацией спиновых токов. Аналогично кривым $T_c(\delta)$ при $V = 0$, соответствующие фазовые кривые $T_\mu(\delta)$ имеют характерный максимум при $\delta = \delta_{opt}$, при котором химический потенциал совпадает с ван-хововской особенностью в плотности состояний.

Для модели с хаббардовским расщеплением зоны ($U/t \sim 8$) сама возможность сверхпроводящего спаривания корреляционной природы и величина T_c чувствительно зависят от параметра V . Использованные значения $V/t \leq 0.1$ меньше, чем оценки $V/t \sim 0.2-0.3$, вытекающие из кластерного вывода однозонной модели Хаббарда [18]. Другой параметр $t'/t \leq 0.1$, определяющий δ_{opt} , выбран также меньшим, чем значения $t'/t \sim 0.2-0.3$, обычно используемые в моделях сильной связи с нерасщепленной зоной [19]. По этой причине представляло интерес провести расчет фазовых кривых $T_c(\delta)$ для систем с большими $t'/t \sim 0.3$. Для таких систем «оптимальное» допирование, при котором химический потенциал совпадает с ван-хововской сингулярностью, оказывается достаточно большим и лежит вне области антиферромагнитного упорядочения спинов — в области, в которой нижние по энергии решения среднего поля для H_{eff} парамагнитны. На рисунке 3

представлены зависимости от допирования температуры сверхпроводящего перехода $T_c(\delta)$ и компоненты $d_0(\delta)$ чередующегося спина для моделей с большими значениями t' . Для них характерны большие значения δ_{opt} и резкое убывание T_c в момент исчезновения антиферромагнитного расщепления зоны (обращения в нуль величины d_0). Последнее связано с уменьшением плотности состояний на границе Ферми. Однако токовые фазы в системах с большим t' отсутствуют. Естественно, что метод среднего поля для H_{eff} дает слишком грубое описание антиферромагнитных корреляций. Он не способен описать антиферромагнитные корреляции с конечным радиусом, помимо антиферромагнитных корреляций соседних узлов, обязанных образованию валентных связей. По-видимому, это является причиной слишком резкого увеличения d_0 и убывания T_c в момент перехода парамагнитного решения в антиферромагнитное. Тем не менее результаты рис. 3 указывают на то, что в моделях с большим параметром t' можно ожидать включения в области оптимального допирования локальных антиферромагнитных корреляций. Для таких систем в областях недодопирования и передопирования реализуются состояния соответственно с локальным антиферромагнитным порядком либо без него, т. е. начальная стадия формирования хаббардовского расщепления зоны может иметь место при оптимальном допировании. На такую возможность указывают и выполненные в [14] расчеты модели Хаббарда в технике слэйв-бозонов. Они обнаруживают возникновение в недодопированных системах ($\delta < \delta_{opt}$) фазы с локальным спиновым порядком. Однако для количественного описания эволюции антиферромагнитного состояния к парамагнитному рассмотрение среднего поля для H_{eff} недостаточно точно.

Таким образом, узкая область допирования, в которой существуют решения с токовой фазой, никак не совпадает с областью псевдощелевого поведения купратов. Поведение $T_J(\delta)$ и зависимость от допирования расщепления $\Delta_J(\delta)$ ван-хововской особенности, обязанного токовому параметру порядка, резко отличаются от поведения соответствующих характеристик псевдощели $T^*(\delta)$ и $\Delta_{ps}(\delta)$. Обнаруженная в расчетах несовместимость сверхпроводящего порядка и токовых параметров порядка также противоречит сосуществованию щели и псевдощели в недодопированной области. Следовательно, гипотеза о токовой фазе как причине псевдощелевого поведения купратов должна быть отвергнута, если модели с большим U/t и хаббардовским расщеплением зоны проводимости

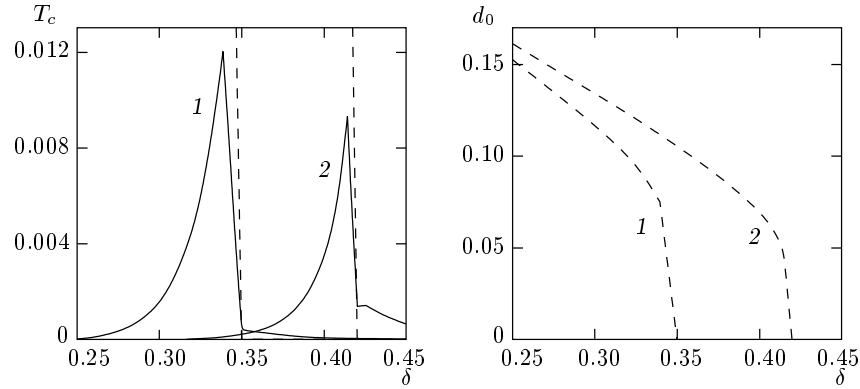


Рис. 3. Фазовые кривые $T_c(\delta)$ и величины чередующегося спина $d_0(\delta)$ для моделей с $U = 8, V = 0$ и значениями $t' = 0.3$ либо $t' = 0.4$ (соответственно кривые 1 и 2). Все величины и T_c — в единицах t

адекватны для описания допированных купратов.

Авторы благодарны В. Я. Кривнову за стимулирующие обсуждения проблемы.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты 00-03-32981 и 00-15-97334).

ПРИЛОЖЕНИЕ

Матрицы $h_{ij}(k)$ восьмого порядка, определяющие линеаризованный гамильтониан (14) в базисе (15), равны

$$h_{ij}(k) = h_{ij}^N + \frac{1}{2} \frac{\partial \bar{H}}{\partial w_1} \theta_{ij}^w \varphi^d(k) + \frac{1}{2} \sum_{\mu} \frac{\partial \bar{H}}{\partial J_{\mu}} \theta_{ij}^{\mu} \varphi^d(k), \quad (19)$$

$$h_{ij}^N = \begin{pmatrix} a+b & & & \\ & a-b & & \\ & & -a+b & \\ & & & -a-b \end{pmatrix}, \quad (20)$$

$$a = \begin{pmatrix} \xi_k & 0 \\ 0 & \xi_{\tilde{k}} \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 0 & \Delta_k \\ \Delta_k & 0 \end{pmatrix}.$$

Матрицы θ^{ν} определены ниже формулами (26)–(28). Незаполненные места в h^N и в θ^{ν} — это нулевые мат-

рицы. Функции ξ_k, Δ_k равны

$$\xi_k = \frac{1}{2} \sum_l \frac{\partial \bar{H}}{\partial r_l} \varphi_l^s(k) - \mu, \quad (21)$$

$$\Delta_k = \frac{1}{2} \sum_l \frac{\partial \bar{H}}{\partial d_l} \varphi_l^s(k), \quad \tilde{k} = k + (\pi, \pi),$$

$$\varphi_l^s(k) = (-1)^l \varphi_l^s(\tilde{k}) = \frac{1}{2} [\cos k_x l_x \cos k_y l_y + \cos k_y l_x \cos k_x l_y], \quad (22)$$

$$\varphi_1^d(k) = \frac{1}{2} (\cos k_x - \cos k_y). \quad (23)$$

Вектор $\mathbf{l} = (l_x, l_y)$ в гармониках (22) — один из решеточных векторов с данным модулем ($l = |\mathbf{l}| = 0, 1, \sqrt{2}, 2, \sqrt{5}, 3$ для r_l или $l = 0, \sqrt{2}, 2$ для d_l). Диагонализация $h_{ij}(k)$,

$$h_{ij}(k) U_{j\lambda} = U_{i\lambda} E_{k\lambda}, \quad (24)$$

определяет одноэлектронные энергии $E_{k\lambda}$ и матрицу $U_{i\lambda}$ собственных векторов в базисе (15). Последние позволяют вычислить искомые параметры порядка,

$$y_{\nu} = \frac{1}{2N} \sum_k^{G/4} \frac{\partial \bar{H}}{\partial y_{\nu}} \theta_{ij}^{\nu} \varphi_{\nu}(k) U_{i\lambda}^* U_{j\lambda} f(E_{k\lambda}). \quad (25)$$

Матрицы $\theta^\nu = \theta^w$ или $\theta^\nu = \theta^\mu$ для $y_\nu = w_1, J_\mu$ в (25) равны

$$\theta^w = \begin{pmatrix} & & \sigma_3 \\ & -\sigma_3 & \\ \sigma_3 & & \end{pmatrix}, \quad (26)$$

$$\theta^{\mu=0,3} = \begin{pmatrix} \sigma_2 & & & \\ & \zeta_\mu \sigma_2 & & \\ & & \zeta_\mu \sigma_2 & \\ & & & \sigma_2 \end{pmatrix},$$

$$\theta^{\mu=1} = - \begin{pmatrix} & \sigma_2 & & \\ \sigma_2 & & & \\ & & & -\sigma_2 \\ & & \sigma_2 & \end{pmatrix}, \quad (27)$$

$$\theta^{\mu=2} = i \begin{pmatrix} & \sigma_2 & & \\ -\sigma_2 & & & \\ & & & -\sigma_2 \\ & & \sigma_2 & \end{pmatrix}.$$

Здесь $\zeta_\mu = (-1)^\mu$, σ_ν — матрицы Паули.

Аналогичные матрицы θ^d и θ^r для вычисления d_l, r_l равны

$$\theta^d = \begin{pmatrix} \sigma_1 & & & \\ & -\sigma_1 & & \\ & & -\sigma_1 & \\ & & & \sigma_1 \end{pmatrix}, \quad (28)$$

$$\theta^r = \begin{pmatrix} \sigma_\gamma & & & \\ & \sigma_\gamma & & \\ & & -\sigma_\gamma & \\ & & & -\sigma_\gamma \end{pmatrix},$$

где $\sigma_\gamma = \sigma_0$ или $\sigma_\gamma = \sigma_3$ для вычисления r_l соответственно с «четными» l ($l = 0, \sqrt{2}, 2$) или с «нечетными» l ($l = 1, \sqrt{5}, 3$). Функция $\varphi_\nu(k)$ в (25) для вычисления $y_\nu = d_l, r_l$ равна соответствующей l -гармонике $\varphi_l^s(k)$ обобщенной s -симметрии, определенной формулой (22), либо функция $\varphi_\nu(k) = \varphi_1^d(k)$ равна аналогичной d -гармонике (23) для случая $y_\nu = w_1$ или J_μ .

ЛИТЕРАТУРА

1. V. M. Krasnov, A. E. Kovalev, A. Yurgens, and D. Winkler, E-print archives, cond-mat/0006479 (2000); Phys. Rev. Lett. **86**, 2657 (2001).

2. Yu. I. Latyshev, V. N. Pavlenko, S. J. Kim, T. Yamashita, L. N. Bulaevskii, M. J. Graf, A. V. Balatsky, N. Morozov, and M. P. Maley, E-print archives, cond-mat/0005116 (2000).

3. V. J. Emery and S. A. Kivelson, Nature **374**, 4347 (1995).

4. R. S. Markiewicz, Phys. Rev. B **56**, 9091 (1999); R. S. Markiewicz, C. Kusko, and V. Kidambi, Phys. Rev. B **60**, 627 (1999); R. S. Markiewicz and C. Kusko, Phys. Rev. Lett. **84**, 5674 (2000).

5. S. Chakravarty, R. B. Laughlin, D. K. Morr, and Ch. Nayak, E-print archives, cond-mat/0005443 (2000).

6. T. Dahm, D. Manske, and L. Tewordt, Phys. Rev. B **56**, R11419 (1997).

7. N. M. Plakida, V. S. Oudovenko, R. Horsch, and A. J. Liechtenstein, Phys. Rev. B **55**, 11997 (1997).

8. A. A. Ovchinnikov and M. Ya. Ovchinnikova, Phys. Lett. A **249**, 531 (1998); A. A. Овчинников, М. Я. Овчинникова, Е. А. Плеханов, Письма в ЖЭТФ **67**, 350 (1998); ЖЭТФ **114**, 985 (1998); **115**, 649 (1999).

9. R. O. Kuzian, R. Hayn, A. F. Barabanov, and L. A. Maksimov, Phys. Rev. B **58**, 6194 (1998).

10. F. Onufrieva, P. Pfeuty, and M. Kisilev, Phys. Rev. Lett. B **82**, 2370 (1999).

11. P. Lou and H. Wu, E-print archives, cond-mat/0003229 (2000).

12. T. Timusk and B. Statt, Rep. Prog. Phys. **62**, 61 (1999).

13. A. A. Ovchinnikov and M. Ya. Ovchinnikova, E-print archives, cond-mat/9912096 (1999); A. A. Овчинников, М. Я. Овчинникова, ЖЭТФ **118**, 1434 (2000).

14. B. Kyung, E-print archives, cond-mat/0003492 (2000).

15. J. E. Hirsch, Phys. Rev. B **67**, 10741 (1992); J. E. Hirsch, E-print archives, cond-mat/0007115 (2000); E-print archives, cond-mat/0007328 (2000).

16. A. V. Chubukov and K. A. Mусаelyan, Phys. Rev. B **51**, 12605 (1995).

17. А. А. Овчинников, М. Я. Овчинникова, ЖЭТФ **116**, 1058 (1999).

18. H. B. Schuttler and A. J. Fedro, Phys. Rev. B **45**, 7588 (1992).

19. R. J. Radke and M. R. Norman, Phys. Rev. B **50**, 9554 (1994).