ЖЭТФ, 2003, том 124, вып. 2 (8), стр. 367–378

ОБМЕННЫЙ И СПИН-ФЛУКТУАЦИОННЫЙ МЕХАНИЗМЫ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ В КУПРАТАХ

Н. М. Плакида [a*], ***Л. Антон*** [**a,b], ***С. Адам*** [**a,c], ***Г. Адам*** [**a,c]

[a] *Объединенный институт ядерных исследований*
141980, Дубна, Московская обл., Россия

[b] *Institute of Atomic Physics INFLPR*
R-76900, Bucharest, Romania

[c] *Institute of Physics and Nuclear Engineering*
R-76900, Bucharest-Măgurele, Romania

Поступила в редакцию 20 января 2003 г.

Рассматривается микроскопическая теория сверхпроводимости в рамках p–d-модели Хаббарда для плоскости CuO_2. На основе проекционной техники для матричной функции Грина от операторов Хаббарда получено уравнение Дайсона в приближении непересекающихся диаграмм. Решение уравнения для сверхпроводящей щели показывает, что межзонные переходы для хаббардовских подзон приводят к антиферромагнитному обменному спариванию как и в t–J-модели, а внутризонные переходы дополнительно дают спин-флуктуационное спаривание d-волнового типа. Вычислены зависимости сверхпроводящей температуры от концентрации дырок и щели от волнового вектора, которые качественно согласуются с экспериментом.

PACS: 74.20.-z, 74.20.Mn, 74.72.-h

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время большее внимание привлекает спин-флуктуационный механизм высокотемпературной сверхпроводимости в медно-оксидных соединениях (купратах), обусловленный большой величиной антиферромагнитного обменного взаимодействия (см. обзоры [1, 2]). На особую роль сильных электронных корреляций в купратах и связанное с ними антиферромагнитное обменное взаимодействие впервые указал Андерсон [3], который и предложил обменный механизм спаривания в рамках t–J-модели. В дальнейшем исследования сверхпроводимости в рамках t–J-модели проводились в основном в приближении среднего поля (ПСП) (см. [4, 5] и цитированную там литературу[1)]). В пределе низкой плотности электронов сверхпроводящее спаривание было исследовано в **T**-матричном приближении в работе [7]. Поправки к ПСП рассматривались для t–J-модели с помощью диаграммной техники [8] и с помощью метода уравнений движения для функций Грина [9]. В работе [9] было проведено самосогласованное численное решение уравнений Дайсона в приближении непересекающихся диаграмм для массового оператора, которое обнаружило нефермижидкостное поведение в нормальной фазе, а в сверхпроводящей фазе, дополнительно к обменному взаимодействию в ПСП, было получено спин-флуктуационное d-волновое спаривание.

Существует также много работ, где с помощью численных методов проводятся исследования t–J-модели и модели Хаббарда для кластеров конечных размеров (см. обзоры [2, 10]), результаты которых, однако, носят противоречивый характер. Например, в работе [11] было обнаружено достаточно устойчивое d-волновое спаривание в t–J-модели, в то время как в работе [12] авторы не нашли дальнодействующих сверхпроводящих корреляций в исходной модели Хаббарда.

В связи с этим представляется актуальным провести исследование модели Хаббарда с учетом соб-

[*] E-mail: plakida@thsun1.jinr.ru
[**] L. Anton, S. Adam, Gh. Adam

[1)] Мы не обсуждаем спинон-холонные теории, которые представляются недостаточно обоснованными [6].

ственно-энергетических поправок, не прибегая к редукции модели Хаббарда к t–J-модели. В последней зависящие от времени межзонные переходы исключаются из рассмотрения с помощью преобразования Шриффера–Вольфа, которое приводит к мгновенному обменному взаимодействию в хаббардовских подзонах. Это преобразование по существу аналогично сведению электрон-фононной модели с запаздывающим взаимодействием к редуцированной модели Бардина–Купера–Шриффера (БКШ) с мгновенным взаимодействием в ограниченной области электронных энергий. Поэтому для подтверждения результатов, полученных в рамках t–J-модели, важно оценить эффекты запаздывания для межзонных переходов в исходной модели Хаббарда.

В настоящей работе развита микроскопическая теория сверхпроводимости в рамках p–d-модели [13] для плоскости CuO_2 в пределе сильных корреляций. Мы используем технику операторов Хаббарда в методе термодинамических функций Грина и получаем уравнение Дайсона [14], решение которого проводится в приближении непересекающихся диаграмм для массового оператора. Таким образом, нам впервые удается выйти за рамки ПСП, которое ранее использовалось при анализе уравнений для сверхпроводящей щели (см. [15–19]).

Отметим здесь, что теория динамического среднего поля, получившая широкое применение в последнее время при расчете электронной структуры в системах с сильной корреляцией, не может быть непосредственно применена для исследования сверхпроводимости d-волнового типа. Для этого необходимо обобщение теории, которое было предложено в работах [20, 21], где массовый оператор вычислялся в кластерном приближении в четырех характерных **k**-точках зоны Бриллюэна. В нашей технике мы получаем уравнение типа Мигдала–Элиашберга при учете полной **k**-зависимости массового оператора. Анализ полученных уравнений показывает, что эффекты запаздывания для межзонных переходов несущественны, что приводит к антиферромагнитному обменному спариванию подвижных носителей заряда во всей подзоне, как и в ПСП в t–J-модели, а внутризонные переходы определяют спин-флуктуационное спаривание в области энергий порядка обменной энергии J.

В следующем разделе приводится вывод уравнения Дайсона для эффективной p–d-модели Хаббарда. В разд. 3 рассмотрено приближение среднего поля. Уравнение для щели с учетом спин-флуктуационного спаривания получено в разд. 4 и его решение обсуждается в разд. 5.

2. УРАВНЕНИЕ ДАЙСОНА

Рассмотрим p–d-модель для плоскости CuO_2 в пределе сильных кулоновских корреляций на узлах меди [13]:

$$H = \sum_{i,\sigma} \{\epsilon_d\ \tilde{d}^+_{i\sigma} \tilde{d}_{i\sigma} + \epsilon_p\ c^+_{i\sigma} c_{i\sigma}\} + \\ + \sum_{i,j,\sigma} V_{ij}\ \{\tilde{d}^+_{i\sigma} c_{j\sigma} + \text{H.c.}\}, \quad (1)$$

где операторы $\tilde{d}^+_{i\sigma}$ и $c^+_{i\sigma}$ описывают рождение однодырочных состояний d-типа и p-типа в ячейке i квадратной решетки для плоскости CuO_2 с энергиями соответственно ϵ_d и $\epsilon_p = \epsilon_d + \Delta_{pd}$. Ввиду большой величины кулоновской энергии на узлах меди, $U_d \approx 8$ эВ, по сравнению с $\Delta_{pd} \approx 3$ эВ, мы учитываем только однократно занятые $3d$-состояния: $\tilde{d}^+_{i\sigma} = d^+_{i\sigma}(1 - n^d_{i,-\sigma})$. Гибридизация p-состояний кислорода в представлении Ванье и $3d$-состояний меди описывается параметрами $V_{ij} = 2t_{pd}\nu_{ij}$, где коэффициенты $\nu_0 = \nu_{jj} \approx 0.96$, $\nu_1 = \nu_{j,j\pm a_{x/y}} \approx -0.14$, $\nu_2 = \nu_{j,j\pm a_x \pm a_y} \approx -0.02$ [22]. Поскольку гибридизация в одной ячейке $V_0 \approx 2t_{pd} \approx \Delta_{pd}$ много больше гибридизации между первыми (пропорциональной ν_1), вторыми (пропорциональной ν_2) и последующими соседями, $V_0 \gg |V_{i\neq j}|$, необходимо сначала провести диагонализацию одночастичных и двухчастичных состояний в одной ячейке, ввести операторы перехода Хаббарда между этими состояниями и затем вычислить матричные элементы перехода между разными ячейками. В результате применения такой кластерной теории возмущения получаем следующую эффективную модель Хаббарда, где нижняя хаббардовская подзона описывает однодырочные состояния Cu d-типа и верхняя хаббардовская подзона описывает двухдырочные синглетные состояния p–d-типа [22]:

$$H = E_1 \sum_{i,\sigma} X^{\sigma\sigma}_i + E_2 \sum_i X^{22}_i + \sum_{i\neq j,\sigma} \{t^{11}_{ij} X^{\sigma 0}_i X^{0\sigma}_j + \\ + t^{22}_{ij} X^{2\sigma}_i X^{\sigma 2}_j + 2\sigma t^{12}_{ij} (X^{2\bar\sigma}_i X^{0\sigma}_j + \text{H.c.})\}, \quad (2)$$

где введены операторы Хаббарда: $X^{nm}_i = |in\rangle\langle im|$ для четырех состояний $n, m = |0\rangle$, $|\sigma\rangle$; $|2\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle$, $\sigma = \pm 1/2$, $\bar\sigma = -\sigma$. Операторы Хаббарда подчиняются правилам умножения $X^{nm}_i X^{kl}_i = \delta_{m,k} X^{nl}_i$ и удовлетворяют условию полноты $X^{00}_i + X^{\sigma\sigma}_i + X^{\bar\sigma\bar\sigma}_i + X^{22}_i = 1$, которое показывает, что в любом узле i может быть занято лишь одно квантовое состояние $|in\rangle$. В гамильтониане (2) введены энергии $E_1 = \tilde\epsilon_d - \mu$ и $E_2 = 2E_1 + \Delta$, где $\tilde\epsilon_d$ — ренормированная энергия d-дырки, μ — химический потенциал и $\Delta \approx \Delta_{pd}$ — ренормированная разность энергий для хаббардовских подзон, которая играет роль кулоновской энергии U в стандартной модели Хаббарда. Параметры межузельных перескоков для подзон $\alpha, \beta = 1, 2$ определяются соотношением $t_{i\neq j}^{\alpha\beta} = K_{\alpha\beta} V_{ij}$, где $K_{\alpha\beta} \leq 1$ (см. [22]), так что эффективная ширина подзон $W = 8t_{eff} \approx t_{pd} \approx \Delta/2$ и гамильтониан (2) соответствует модели Хаббарда в пределе сильных корреляций. Отметим, что в настоящей работе проведено преобразование для простейшей версии p–d-модели (1), которая содержит минимальное число параметров: t_{pd} и Δ_{pd}. Применение кластерной теории возмущений к более общей p–d-модели [13], включающей кулоновское взаимодействие на узлах меди U_d, кислорода U_p и p–d-взаимодействие U_{pd}, а также p–p-гибридизацию t_{pp}, приводит к такой же эффективной модели Хаббарда (2), но с перенормированными параметрами (см. [23–25]).

Для исследования спектра квазичастиц и сверхпроводимости в модели (2) составим уравнение для одночастичной матричной функции Грина [26]:

$$\tilde{G}_{ij\sigma}(t-t') = \langle\langle \hat{X}_{i\sigma}(t) | \hat{X}^{\dagger}_{j\sigma}(t') \rangle\rangle = \\ = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi}\, \mathrm{e}^{-i\omega(t-t')}\, \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \mathrm{e}^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{i}-\mathbf{j})}\, \tilde{G}_{\sigma}(\mathbf{q},\omega), \quad (3)$$

где мы ввели антикоммутаторную функцию Грина от четырехкомпонентных операторов Намбу $\hat{X}_{i\sigma}$ и $\hat{X}^{\dagger}_{i\sigma} = (X_i^{2\sigma}\ X_i^{\bar{\sigma}0}\ X_i^{\bar{\sigma}2}\ X_i^{0\sigma})$. Функцию Грина (3) удобно записать в виде суперматрицы 2×2, состоящей из матриц 2×2 для двух подзон для нормальной, $\hat{G}_{ij\sigma}(\omega)$, и аномальной, $\hat{F}_{ij\sigma}(\omega)$, компонент:

$$\tilde{G}_{ij\sigma}(\omega) = \begin{pmatrix} \hat{G}_{ij\sigma}(\omega) & \hat{F}_{ij\sigma}(\omega) \\ \hat{F}^{\dagger}_{ij\sigma}(\omega) & -\hat{G}_{ji\bar{\sigma}}(-\omega) \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Построим уравнение для функции Грина (3), применяя метод проектирования типа метода Мори, который позволяет избежать неконтролируемых расцеплений для функций Грина высшего порядка. Эта техника подробно описана в наших предыдущих работах [9, 14], и поэтому здесь мы приведем лишь результаты этих вычислений. Последовательное дифференцирование функции Грина (3) по времени t и t' с выделением линейных частей в получаемых уравнениях движения методом проектирования позволяет записать уравнение для ее фурье-компоненты в виде уравнения Дайсона:

$$\left(\tilde{G}_{\sigma}(\mathbf{q},\omega)\right)^{-1} = \left(\tilde{G}^{0}_{\sigma}(\mathbf{q},\omega)\right)^{-1} - \tilde{\Sigma}_{\sigma}(\mathbf{q},\omega). \quad (5)$$

Нулевая функция Грина в обобщенном приближении среднего поля имеет вид

$$\tilde{G}^{0}_{\sigma}(\mathbf{q},\omega) = \left(\omega\tilde{I} - \tilde{E}_{\sigma}(\mathbf{q})\right)^{-1} \tilde{\chi}\ , \quad (6)$$

где $\tilde{I}$ — единичная матрица 4×4. Предполагая, что система находится в парамагнитном состоянии: $\langle X_i^{\sigma\sigma}\rangle = \langle X_i^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}\rangle$, и аномальные средние в матрице $\tilde{\chi} = \langle\{\hat{X}_{i\sigma}, \hat{X}^{\dagger}_{i\sigma}\}\rangle$ для d-волнового спаривания равны нулю:

$$\langle X_i^{02}\rangle = \langle X_i^{0\downarrow} X_i^{\downarrow 2}\rangle = \langle c_{i\downarrow} c_{i\uparrow}\rangle = 0,$$

для этой матрицы получаем представление

$$\tilde{\chi} = \tau_0 \times \begin{pmatrix} \chi_2 & 0 \\ 0 & \chi_1 \end{pmatrix},$$

где τ_0 — единичная матрица и корреляционные функции $\chi_2 = \langle X_i^{22} + X_i^{\sigma\sigma}\rangle = n/2$ и $\chi_1 = \langle X_i^{00} + X_i^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}\rangle = 1 - \chi_2$ зависят лишь от среднего числа дырок n:

$$n = \langle N_i\rangle = \sum_{\sigma} \langle X_i^{\sigma\sigma}\rangle + 2\langle X_i^{22}\rangle. \quad (7)$$

Спектр одночастичных возбуждений в функции Грина (6) определяется матрицей

$$\tilde{E}_{ij\sigma} = \langle\{[\hat{X}_{i\sigma}, H], \hat{X}^{\dagger}_{j\sigma}\}\rangle\ \tilde{\chi}^{-1}. \quad (8)$$

Массовый оператор в уравнении Дайсона (5) определяется собственной частью многочастичной функции Грина от «неприводимых операторов» $\hat{Z}^{(ir)}_{i\sigma} = [\hat{X}_{i\sigma}, H] - \sum_l \tilde{E}_{il\sigma}\hat{X}_{l\sigma}$:

$$\tilde{\Sigma}_{\sigma}(\mathbf{q},\omega) = \tilde{\chi}^{-1} \langle\langle \hat{Z}^{(ir)}_{\mathbf{q}\sigma} | \hat{Z}^{(ir)\dagger}_{\mathbf{q}\sigma}\rangle\rangle^{(prop)}_{\omega}\ \tilde{\chi}^{-1}. \quad (9)$$

Уравнения (6), (5) и (9) дают точное представление для одночастичной функции Грина (3). Для вычисления ее, однако, необходимо использовать некоторые приближения для многочастичной функции Грина в массовом операторе (9), который описывает вклад неупругих процессов рассеяния одночастичных фермиподобных возбуждений на флуктуациях спина и заряда в системе.

3. ПРИБЛИЖЕНИЕ СРЕДНЕГО ПОЛЯ

Рассмотрим сначала электронный спектр в приближении среднего поля, который описывается функцией Грина (6) с матрицей одночастичных возбуждений (8):

$$\tilde{E}_{ij\sigma} = \begin{pmatrix} \hat{\omega}_{ij} & \hat{\Delta}_{ij\sigma} \\ \hat{\Delta}^{\dagger}_{ij\sigma} & -\hat{\omega}_{ji} \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Здесь матрицы $\hat{\omega}_{ij}$ и $\hat{\Delta}_{ij\sigma}$ определяют соответственно нормальные и аномальные компоненты полной матрицы. Спектр одночастичных возбуждений в нормальном состоянии был подробно исследован в работе [22]. Поэтому здесь мы приведем лишь результаты этих вычислений. Диагонализация матрицы $\hat{\omega}_{ij}$ в $\mathbf{q}$-представлении приводит к следующему выражению для спектра одночастичных возбуждений в нормальной фазе:

$$\Omega_{2,1}(\mathbf{q}) = \frac{1}{2}[\omega_2(\mathbf{q}) + \omega_1(\mathbf{q})] \pm \pm \frac{1}{2}\left\{[\omega_2(\mathbf{q}) - \omega_1(\mathbf{q})]^2 + 4|W^{21}|^2\right\}^{1/2}, \quad (11)$$

где спектры возбуждений для подзоны синглетных и подзоны однодырочных состояний без учета гибридизации определяются уравнениями

$$\omega_2(\mathbf{q}) = E_1 + \Delta + a^{22} + \tilde{t}^{22}(\mathbf{q}),$$

$$\omega_1(\mathbf{q}) = E_1 + a^{11} + \tilde{t}^{11}(\mathbf{q}),$$

а их взаимодействие определяется функцией

$$W^{21}(\mathbf{q}) = a^{21} + \tilde{t}^{21}(\mathbf{q}) = \frac{\chi_1}{\chi_2} W^{12}(\mathbf{q}).$$

В этих уравнениях коэффициенты $a^{\alpha\beta}$ определяют перенормировку химического потенциала, а эффективные параметры перескока $\tilde{t}^{\alpha\beta}(\mathbf{q})$ можно записать в виде

$$\tilde{t}^{\alpha\beta}(\mathbf{q}) = \frac{t_{pd}}{N} \sum_{\mathbf{k}} \nu(\mathbf{k}) K^{\alpha\beta}(\mathbf{k} - \mathbf{q}), \quad (12)$$

где перенормировка параметров межузельных перескоков $t_{ij}^{\alpha\beta}$ определяется коэффициентами $K^{\alpha\beta}(\mathbf{q})$. В Приложении 1 приводятся явные выражения для коэффициентов $a^{\alpha\beta}$ и $K_{ij}^{\alpha\beta}$. При учете перескоков только между ближайшими и следующими соседями коэффициент $\nu(\mathbf{q})$ имеет вид

$$\nu(\mathbf{q}) = 2\sum_{j\neq 0} \nu_{0j} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{j}} = 8\nu_1\gamma(\mathbf{q}) + 8\nu_2\gamma'(\mathbf{q}), \quad (13)$$

где $\gamma(\mathbf{q}) = (\cos q_x + \cos q_y)/2$, $\gamma'(\mathbf{q}) = \cos q_x \cos q_y$.

В работе [22] показано, что при половинном заполнении, $n = 1$, система находится в диэлектрическом состоянии с шириной запрещенной зоны порядка Δ, а при легировании дырками, $n = 1+\delta > 1$, уровень Ферми попадает в верхнюю хаббардовскую подзону синглетных состояний. При этом дисперсия одночастичных возбуждений и вес хаббардовских подзон существенно зависят от легирования. При малой концентрации дырок перескоки между ближайшими соседями подавлены за счет сильных антиферромагнитных корреляций и спектр определяется перескоками между вторыми соседями с дисперсией $\gamma'(\mathbf{q})$ в формуле (13). При высокой концентрации дырок, $n \geq 1,2$, антиферромагнитные корреляции становятся несущественными и спектр в основном определяется перескоками между ближайшими соседями с дисперсией $\gamma(\mathbf{q})$ в формуле (13).

Рассмотрим аномальную компоненту $\hat{\Delta}_{ij\sigma}$ матрицы (10), которая определяет сверхпроводящую щель. Эта матрица 2×2 для двух подзон имеет вид

$$\hat{\Delta}_{ij\sigma} = \delta_{ij}\begin{pmatrix} b_\sigma^{22} & b_\sigma^{21} \\ b_\sigma^{12} & b_\sigma^{11} \end{pmatrix} + + (1-\delta_{ij})\begin{pmatrix} \Delta_{ij\sigma}^{22} & \Delta_{ij\sigma}^{21} \\ \Delta_{ij\sigma}^{12} & \Delta_{ij\sigma}^{11} \end{pmatrix}. \quad (14)$$

Одноузельные корреляционные функции $b_\sigma^{\alpha\beta}$ для d-волнового спаривания равны нулю (см. Приложение 1), а компоненты для узлов $i \neq j$ определяются корреляционными функциями

$$\chi_2\Delta_{ij\sigma}^{22} = -2\sigma\, t_{ij}^{21}\langle X_i^{02}N_j\rangle = -\chi_1\,\Delta_{ij\sigma}^{11},$$

$$\chi_2\Delta_{ij\sigma}^{21} = \frac{1}{2}\left(t_{ij}^{22}\langle X_i^{02}N_j\rangle + t_{ij}^{11}\langle N_jX_i^{02}\rangle\right) = = -\chi_1\Delta_{ij\sigma}^{12}. \quad (15)$$

Учитывая правила умножения для хаббардовских операторов, аномальные средние в этих уравнениях могут быть представлены в виде

$$\langle X_i^{02}N_j\rangle = \langle X_i^{0\downarrow}X_i^{\downarrow 2}N_j\rangle = \langle c_{i\downarrow}c_{i\uparrow}N_j\rangle,$$

как и в работах [17–19]. Таким образом, спаривание в ПСП описывается аномальной корреляционной функцией для пары частиц на одном узле, но в разных хаббардовских подзонах: $X_i^{02} = X_i^{0\downarrow}X_i^{\downarrow 2}$, и оператора числа частиц N_j.

Чтобы получить уравнение для сверхпроводящей щели, необходимо вычислить корреляционную функцию $\langle X_i^{02}N_j\rangle$. В работах [17, 19] для этого использовался метод уравнений движения для функций Грина (метод L. Roth), в которых одночастичные операторы в одном узле относились к разным временам, как, например, в функции $\langle c_{i\downarrow}(t)|c_{i\uparrow}(t')N_j(t')\rangle$. Эта процедура расцепления операторов на одном узле неоднозначна, что приводит к нескольким решениям в зависимости от способа расцепления, что и было обнаружено в работах [17, 19]. В работе [18] этот метод не использовался, но решение самосогласованной системы уравнений также приводило к неоднозначным результатам.

В настоящей работе мы проведем вычисление аномальной корреляционной функции $\langle X_i^{02} N_j \rangle$, не прибегая к каким-либо расцеплениям. Для этого мы рассмотрим уравнение для соответствующей функции Грина от исходных операторов

$$L_{ij}(t-t') = \langle\langle X_i^{02}(t) | N_j(t') \rangle\rangle.$$

Дифференцируя функцию Грина по времени t, для ее фурье-компоненты получим уравнение

$$(\omega - E_2)\, L_{ij}(\omega) \approx 2\delta_{ij} \langle X_i^{02} \rangle + \\ + \sum_{m \neq i, \sigma} 2\sigma t_{im}^{12} \{ \langle\langle X_i^{0\bar\sigma} X_m^{0\sigma} | N_j \rangle\rangle_\omega - \langle\langle X_i^{\sigma 2} X_m^{\bar\sigma 2} | N_j \rangle\rangle_\omega \},$$

где в правой части мы опустили вклады, соответствующие внутризонным переходам, поскольку они дают лишь малую поправку к энергии рождения пары на одном узле:

$$|E_2| \approx \Delta \gg |t_{ij}^{\alpha\alpha}|.$$

Пользуясь спектральным представлением, для корреляционной функции при $i \neq j$ получаем выражение

$$\langle X_i^{02} N_j \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{1 - \exp(-\omega/T)} \sum_{m \neq i, \sigma} 2\sigma t_{im}^{12} \times \\ \times \left\{ -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \Big[\frac{1}{\omega - E_2 + i\varepsilon} \Big(\langle\langle X_i^{0\bar\sigma} X_m^{0\sigma} | N_j \rangle\rangle_{\omega + i\varepsilon} - \\ - \langle\langle X_i^{\sigma 2} X_m^{\bar\sigma 2} | N_j \rangle\rangle_{\omega + i\varepsilon} \Big) \Big] \right\}.$$

В зависимости от положения химического потенциала в верхней (синглетной) или нижней (однодырочной) подзоне основной вклад в интеграл в правой части этого уравнения будет давать соответствующая многочастичная функция Грина. При этом вклад от полюса при $\omega = E_2$ в обоих случаях экспоненциально мал, порядка $\exp(-\Delta/T) \ll 1$.

Рассмотрим далее случай дырочного легирования, $n > 1$, когда уровень Ферми лежит в верхней подзоне, $\mu \approx \Delta$, и одноузельные энергии $E_2 \approx E_1 \approx -\Delta$. При этом вклад от нижней подзоны, пропорциональный

$$-\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \langle\langle X_i^{0\bar\sigma} X_m^{0\sigma} | N_j \rangle\rangle_{\omega + i\varepsilon} \approx \delta_{mj} \langle X_i^{0\bar\sigma} X_j^{0\sigma} \rangle \delta(\omega - 2E_1),$$

дает экспоненциально малый вклад порядка $\exp(-2\Delta/T) \ll 1$. В результате для аномальной корреляционной функции получаем оценку

$$\langle X_i^{02} N_j \rangle \approx -\frac{1}{\Delta} \sum_{m \neq i, \sigma} 2\sigma t_{im}^{12} \langle X_i^{\sigma 2} X_m^{\bar\sigma 2} N_j \rangle. \tag{16}$$

Здесь при вычислении интеграла мы пренебрегли эффектами запаздывания, опустив частотную зависимость в знаменателе $1/(\omega - E_2)$, поскольку энергия возбуждения $|E_2| \approx \Delta$ много больше характерных энергий возбуждения в синглетной подзоне порядка $|t_{ij}^{22}|$. Таким образом, прямое вычисление аномальной корреляционной функции показывает, что эффектами запаздывания при обменном взаимодействии, связанном с межзонным переходом, можно пренебречь.

Используя двухузельное приближение в формуле (16): $m = j$, которое обычно применяется при выводе t–J-модели, получим представление

$$\langle X_i^{02} N_j \rangle = \langle c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} N_j \rangle = -\frac{4t_{ij}^{12}}{\Delta} 2\sigma \langle X_i^{\sigma 2} X_j^{\bar\sigma 2} \rangle,$$

где было учтено соотношение $X_j^{\bar\sigma 2} N_j = 2 X_j^{\bar\sigma 2}$. В этом приближении для щели в синглетной подзоне согласно (14) получаем выражение

$$\Delta_{ij\sigma}^{22} = J_{ij} \langle X_i^{\sigma 2} X_j^{\bar\sigma 2} \rangle\, \chi_2^{-1}, \tag{17}$$

которое соответствует обычному выражению для щели в t–J-модели с обменным взаимодействием $J_{ij} = 4(t_{ij}^{12})^2/\Delta$.

Таким образом, последовательно используя технику операторов Хаббарда, мы показали, что в ПСП для модели Хаббарда аномальные корреляционные функции типа $\langle c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} N_j \rangle$ однозначно связаны с аномальными средними для пары электронов (дырок) на соседних узлах, и спаривание обеспечивается за счет стандартного обменного взаимодействия, как и в t–J-модели (см., например, [4, 9]). Поэтому утверждение в работе [19] об особой роли межузельных возбуждений в методе составных операторов, которое основано на использовании расцеплений на одном узле для операторов Хаббарда,

$$\langle X_i^{02} N_j \rangle = \langle X_i^{0\downarrow} X_i^{\downarrow 2} N_j \rangle = \\ = \langle c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} N_j \rangle \to \langle c_{i\downarrow}(t) \,|\, c_{i\uparrow}(t') N_j(t') \rangle,$$

оказывается ошибочным. Кроме того, прямое вычисление аномальной корреляционной функции в модели Хаббарда показывает, что эффектами запаздывания при обменном спаривании, связанном с межзонными переходами, можно пренебречь, что позволяет обосновать результаты, получаемые в t–J-модели для мгновенного обменного взаимодействия. Полученная нами более общая формула (16) при учете трехузельных членов может быть также использована для более последовательного анализа обменного спаривания в модели Хаббарда.

4. УРАВНЕНИЕ ДЛЯ СВЕРХПРОВОДЯЩЕЙ ЩЕЛИ

Рассмотрим массовый оператор (9), который может быть записан в виде суперматрицы, как и функция Грина (4)

$$\tilde{\Sigma}_{ij\sigma}(\omega) = \\ = \tilde{\chi}^{-1} \begin{pmatrix} \hat{M}_{ij\sigma}(\omega) & \hat{\Phi}_{ij\sigma}(\omega) \\ \hat{\Phi}^{\dagger}_{ij\sigma}(\omega) & -\hat{M}_{ji\bar{\sigma}}(-\omega) \end{pmatrix} \tilde{\chi}^{-1}, \quad (18)$$

где матрицы $\hat{M}$ и $\hat{\Phi}$ обозначают нормальные и аномальные компоненты полной матрицы (см. Приложение 2, формула (38)). Согласно (9) они определяются через многочастичные функции Грина, которые описывают неупругое рассеяние одночастичных фермиподобных возбуждений $X_1(t)$ на флуктуациях спина и заряда, которые в общем виде представляются операторами бозе-типа $B_{1'}(t)$, (см. Приложение 1, формулы (35)–(37)). В настоящей работе будет вычислен массовый оператор в приближении непересекающихся диаграмм, которое соответствует самосогласованному борновскому приближению. Это приближение описывается некоррелированным распространением фермиподобных и бозеподобных возбуждений и на диаграммном языке соответствует скелетной петлевой диаграмме. Следовательно, в этом приближении зависящая от времени парная корреляционная функции от операторов $X_1(t)$ и $B_{1'}(t)$ для узлов ($1 \neq 1'$, $2 \neq 2'$) представляется в виде произведения корреляционных функций:

$$\langle B_{1'}(t)X_1(t)B_{2'}(t')X_2(t')\rangle \approx \\ \approx \langle X_1(t)X_2(t')\rangle\langle B_{1'}(t)B_{2'}(t')\rangle.$$

Пользуясь спектральными теоремами для функций Грина, многочастичную функцию Грина можно записать в виде

$$\langle\!\langle B_{1'}X_1|B_{2'}X_2\rangle\!\rangle_\omega \approx \frac{1}{\pi^2}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\omega_1 d\omega_2}{\omega-\omega_1-\omega_2} \times \\ \times N(\omega_1,\omega_2)\,\mathrm{Im}\langle\!\langle X_1|X_2\rangle\!\rangle_{\omega_1}\,\mathrm{Im}\langle\!\langle B_{1'}|B_{2'}\rangle\!\rangle_{\omega_2}, \quad (19)$$

где $N(\omega_1,\omega_2) = (1/2)[\mathrm{th}(\omega_1/2T) + \mathrm{cth}(\omega_2/2T)]$. В рамках этого приближения получаем самосогласованную систему уравнений для массового оператора (18) и одночастичной функции Грина (4). Для ее решения необходимо еще задать спектральную плотность бозонных возбуждений, определяемую запаздывающей коммутаторной функцией Грина $\langle\langle B_{1'}|B_{2'}\rangle\rangle_{\omega_2}$.

В низшем порядке по межзонной гибридизации можно ввести независимые функции Грина для подзоны синглетных и однодырочных состояний. Рассмотрим далее для определенности случай дырочного легирования, $n > 1$, когда уровень Ферми лежит в верхней подзоне: $\mu \approx \Delta$. Учитывая выражения, полученные в ПСП для спектра одночастичных возбуждений в нормальной фазе (11) и для щели (17), для синглетной зоны получаем функции Грина в виде матрицы 2×2:

$$\hat{G}^{22}_\sigma(\mathbf{q},\omega) = \chi_2\left\{\omega\hat{\tau}_0 - \left[\Omega_2(\mathbf{q}) + \frac{M^{22}_\sigma(\mathbf{q},\omega)}{\chi_2}\right]\hat{\tau}_3 - \right. \\ \left. - \left[\Delta^{22}_\sigma(\mathbf{q}) + \frac{\Phi^{22}_\sigma(\mathbf{q},\omega)}{\chi_2}\right]\hat{\tau}_1\right\}^{-1}, \quad (20)$$

где τ_0, τ_3, τ_1 — матрицы Паули. Нормальная $M^{22}_\sigma(\mathbf{q},\omega)$ и аномальная $\Phi^{22}_\sigma(\mathbf{q},\omega)$ компоненты массового оператора для синглетной подзоны согласно (19) имеют вид

$$M^{22}_\sigma(\mathbf{q},\omega) = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} d\omega_1 K^{(+)}(\omega,\omega_1|\mathbf{k},\mathbf{q}-\mathbf{k}) \times \\ \times \left\{-\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\left[K^2_{22}G^{22}_\sigma(\mathbf{k},\omega_1) + K^2_{12}G^{11}_\sigma(\mathbf{k},\omega_1)\right]\right\}, \quad (21)$$

$$\Phi^{22}_\sigma(\mathbf{q},\omega) = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} d\omega_1 K^{(-)}(\omega,\omega_1|\mathbf{k},\mathbf{q}-\mathbf{k}) \times \\ \times \left\{-\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\left[K^2_{22}F^{22}_\sigma(\mathbf{k},\omega_1) - K^2_{12}F^{11}_\sigma(\mathbf{k},\omega_1)\right]\right\}. \quad (22)$$

Ядро интегрального уравнения имеет такой же вид, как и в теории Элиашберга:

$$K^{(\pm)}(\omega,\omega_1|\mathbf{k},\mathbf{q}-\mathbf{k}) = t^2_{pd}\,|\nu(\mathbf{k})|^2 \times \\ \times \int\limits_{-\infty}^{+\infty} d\omega_2 \frac{N(\omega_1,\omega_2)}{\omega-\omega_1-\omega_2}\left[\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\,\chi^{(\pm)}_{sc}(\mathbf{q}-\mathbf{k},\omega_2)\right], \quad (23)$$

где спектральная плотность бозонных возбуждений определяется соответствующими динамическими восприимчивостями для зарядовых и спиновых флуктуаций:

$$\chi^{(\pm)}_{sc}(\mathbf{q},\omega) = \chi_s(\mathbf{q},\omega) \pm \chi_c(\mathbf{q},\omega) = \\ = -\left[\langle\!\langle \mathbf{S}_\mathbf{q}|\mathbf{S}_{-\mathbf{q}}\rangle\!\rangle_\omega \pm \frac{1}{4}\langle\!\langle \delta N_\mathbf{q}|\delta N_{-\mathbf{q}}\rangle\!\rangle_\omega\right]. \quad (24)$$

Аналогичные выражения получаются и для функции Грина для однодырочной хаббардовской подзоны $G^{11}_\sigma(\mathbf{k},\omega)$ (см. Приложение 2).

Полное решение самосогласованной системы уравнений для массовых операторов (21), (22) и функций Грина (20) для двух подзон представляет большие вычислительные трудности, как показывает опыт подобного расчета в [9] в t–J-модели для одной подзоны. Поэтому в настоящей работе для оценки характера сверхпроводящего перехода мы ограничимся приближением слабой связи для массового оператора. В этом приближении ядро интегрального уравнения (23) для энергий возбуждения (ω, ω_1), близких к энергии Ферми, можно аппроксимировать функцией

$$K^{(\pm)}(\omega, \omega_1|\mathbf{k}, \mathbf{q}-\mathbf{k}) \approx \approx -\frac{1}{2}\,\mathrm{th}\left(\frac{\omega_1}{2T}\right)\lambda^{(\pm)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}-\mathbf{k}), \quad (25)$$

где $|\omega, \omega_1| \le \omega_s \ll W$ и ω_s — характерная энергия бозонов, ответственных за спаривание. В этом приближении эффективное взаимодействие определяется статической восприимчивостью:

$$\lambda^{(\pm)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}-\mathbf{k}) = = t_{pd}^2|\nu(\mathbf{k})|^2\,\mathrm{Re}\,\chi_{sc}^{(\pm)}(\mathbf{q}-\mathbf{k}, \omega_2 = 0). \quad (26)$$

Приближение слабой связи (25) можно использовать для оценки вкладов в массовый оператор (21), (22) за счет функции Грина синглетной подзоны $G_\sigma^{22}(\mathbf{k}, \omega_1)$ и $F_\sigma^{22}(\mathbf{k}, \omega_1)$, энергия возбуждений ω_1 в которых мала. Вклады же в массовый оператор от функций Грина однодырочной подзоны $G_\sigma^{11}(\mathbf{k}, \omega_1)$ и $F_\sigma^{11}(\mathbf{k}, \omega_1)$ при энергиях возбуждения $\omega_1 \approx \Delta$, много больших ширины синглетной подзоны, оказываются пренебрежимо малыми, порядка $(t_{eff}/\Delta)^2$, и ими можно пренебречь.

Используя принятые приближения для массового оператора функции Грина, приходим к уравнению для сверхпроводящей щели в синглетной подзоне типа БКШ:

$$\tilde{\Delta}_\sigma^{22}(\mathbf{q}) = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}}\left[J(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - K_{22}^2\lambda^{(-)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}-\mathbf{k})\right] \times \times \frac{\tilde{\Delta}_\sigma^{22}(\mathbf{k})}{2\mathcal{E}_2(\mathbf{k})}\,\mathrm{th}\,\frac{\mathcal{E}_2(\mathbf{k})}{2T}, \quad (27)$$

где сверхпроводящая щель $\tilde{\Delta}_\sigma^{22}(\mathbf{q}) = \Delta_\sigma^{22}(\mathbf{q}) + \Phi_\sigma^{22}(\mathbf{q}, \omega \approx 0)/\chi_2$. Энергия квазичастичных возбуждений в сверхпроводящей фазе имеет стандартный вид $\mathcal{E}_2(\mathbf{q}) = \left[\varepsilon_2^2(\mathbf{q}) + |\tilde{\Delta}_\sigma^{22}(\mathbf{q})|^2\right]^{1/2}$, где введена перенормированная энергия одночастичных возбуждений $\varepsilon_2(\mathbf{q}) \approx \Omega_2(\mathbf{q}) + M_\sigma^{22}(\mathbf{q}, \omega = \varepsilon_2(\mathbf{q}))/\chi_2$, которая отсчитывается от энергии Ферми: $\varepsilon_2(\mathbf{q}_F) = 0$. В уравнении (27) интегрирование по $\mathbf{k}$ для обменного взаимодействия ведется по всей синглетной подзоне, в то время как для второго слагаемого, пропорционального $\lambda^{(-)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}-\mathbf{k})$, интегрирование по энергиям проводится вблизи энергии Ферми в слое толщиной порядка $\pm\omega_s$.

Подобное же уравнение получается и в случае электронного легирования, $n = 1 + \delta \le 1$, когда химический потенциал лежит в однодырочной зоне, $\mu \approx 0$. В этом случае, используя приближение слабой связи для массовых операторов и функцию Грина однодырочной подзоны, приходим к уравнению для щели $\tilde{\Delta}_\sigma^{11}(\mathbf{q})$, аналогичному (27).

5. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Для решения уравнения для щели (27) необходимо использовать модель для статической восприимчивости (26). При этом достаточно рассмотреть только вклад спиновых флуктуаций, энергия возбуждений которых много меньше энергии зарядовых флуктуаций: $\omega_s \approx J \ll \omega_c \approx W$. В этом случае взаимодействие (27) можно представить в виде $\lambda_s(\mathbf{k}, \mathbf{q}-\mathbf{k}) = t_{pd}^2\,|\nu(\mathbf{k})|^2\,\chi_s(\mathbf{q}-\mathbf{k})$, где для статической спиновой восприимчивости $\chi_s(\mathbf{q}-\mathbf{k})$ можно принять модель, предложенную в работе [27] на основе численных расчетов:

$$\chi_s(\mathbf{q}) \approx \frac{1}{\omega_s}\langle \mathbf{S}_\mathbf{q}\mathbf{S}_{-\mathbf{q}}\rangle = \frac{\chi_0(\xi)}{1 + \xi^2[1 + \gamma(\mathbf{q})]}. \quad (28)$$

Эта модель определяется двумя параметрами: корреляционной длиной ξ и характерной энергией $\omega_s \le J$ антиферромагнитных спиновых флуктуаций. Восприимчивость (28) имеет максимум при $\mathbf{q} = \mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ — антиферромагнитном волновом векторе, при котором $1 + \gamma(\mathbf{Q}) = 0$. Значение восприимчивости при этом определяется коэффициентом $\chi_0(\xi)$, величина которого находится из условия нормировки для спина $S = 1/2$ в одном узле:

$$\frac{1}{N}\sum_i\langle \mathbf{S}_i\mathbf{S}_i\rangle = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}}\langle \mathbf{S}_\mathbf{q}\mathbf{S}_{-\mathbf{q}}\rangle = \frac{3}{4}(1-\delta).$$

Из этого уравнения получаем

$$\chi_0(\xi) = \frac{3(1-\delta)}{4\omega_s C(\xi)},$$

где

$$C(\xi) = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}}\{1 + \xi^2[1 + \gamma(\mathbf{q})]\}^{-1}.$$

При больших ξ имеем $\chi_0(\xi) \propto \xi^2/\ln\xi$.

Рассмотрим сначала аналитическую оценку для температуры сверхпроводящего перехода T_c, решая уравнение (27) для d-волнового спаривания со щелью в виде

$$\tilde{\Delta}^{22}_{\sigma}(\mathbf{q}) = \Delta^{d}_{\sigma}(\cos q_x - \cos q_y) = \Delta^{d}_{\sigma}\eta(\mathbf{q}).$$

Умножая обе части уравнения на $\eta(\mathbf{q})$ и выполняя интегрирование по $\mathbf{q}$, получим уравнение для определения T_c:

$$1 = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\varepsilon_2(\mathbf{k})} \operatorname{th}\frac{\varepsilon_2(\mathbf{k})}{2T_c} \times \\ \times \left[J\,\eta^2(\mathbf{k}) + \lambda_s\,(4\gamma(\mathbf{k}))^2\eta^2(\mathbf{k})\right]. \quad (29)$$

Здесь при интегрировании спин-флуктуационного вклада мы учли, что спиновая восприимчивость $\chi_s(\mathbf{q}-\mathbf{k})$ в (27) имеет максимум при $\mathbf{q}-\mathbf{k} = \mathbf{Q} = (\pi,\pi)$, что позволяет получить оценку

$$\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}} \eta(\mathbf{q})\chi_s(\mathbf{q}-\mathbf{k}) \approx \\ \approx -\frac{\eta(\mathbf{k})}{N}\sum_{\mathbf{q}'}\chi_s(\mathbf{q}') = -\frac{\eta(\mathbf{k})3(1-\delta)}{4\omega_s}$$

и ввести эффективную константу спин-флуктуационного взаимодействия

$$\lambda_s = \frac{3}{4\omega_s}(2\nu_1 K_{22}\,t_{pd})^2(1-\delta) \approx \frac{t^2_{eff}}{\omega_s}.$$

Переходя к интегрированию по энергии, уравнение (29) можно записать в виде

$$1 \approx \int\limits_{-\mu}^{\widetilde{W}-\mu} \frac{d\epsilon}{2\epsilon} \times \\ \times \operatorname{th}\frac{\epsilon}{2T_c}[JN_d(\epsilon) + \theta(\omega_s - |\epsilon|)\lambda_s N_{sf}(\epsilon)], \quad (30)$$

где $\theta(x) = 1$ для $x < 1$ и $\theta(x) = 0$ при $x > 1$. Интегрирование по энергии проводится по ренормированной ширине синглетной подзоны $\widetilde{W}$ со взвешенной плотностью состояний для обменного,

$$N_d(\epsilon) = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}} \eta^2(\mathbf{k})\delta(\epsilon - \varepsilon_2(\mathbf{k})),$$

и спин-флуктуационного,

$$N_{sf}(\epsilon) = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}} \eta^2(\mathbf{k})\,(4\gamma(\mathbf{k}))^2\,\delta(\epsilon - \varepsilon_2(\mathbf{k}))$$

взаимодействий. Обе плотности состояний нормированы на единицу:

$$\int\limits_{-\infty}^{-\infty} d\epsilon N_{d,sf}(\epsilon) = 1.$$

Отметим, что основной вклад в плотность состояний для двумерной решетки дают области вблизи особенностей Ван Хова, $|\mathbf{k}| = (0,\pi),(\pi,0)$. В то время как обменное взаимодействие в этих областях дает большой вклад, $\eta^2(\mathbf{k}) = 4$, вклад спин-флуктуационного взаимодействия оказывается подавленным: $\gamma^2(\mathbf{k}) = 0$. Поэтому эффективная константа связи для обменного взаимодействия $V_{ex} = J\,N_d(0)$ может быть больше спин-флуктуационной константы $V_{sf} = \lambda_s\,N_{sf}(0)$ даже при $\lambda_s \approx t^2_{eff}/\omega_s > J$. Учитывая также, что область действия спин-флуктуационного спаривания ω_s значительно меньше области, где действует обменное взаимодействие $\widetilde{W}$, приходим к выводу, что обменное взаимодействие обеспечивает более высокие температуры сверхпроводящего перехода.

Стандартные оценки в логарифмическом приближении при $T_c \ll \omega_s \ll \mu$ дают для обменного спаривания $T_c^{ex} \approx \sqrt{\mu(\widetilde{W}-\mu)}\exp(-1/V_{ex})$ и для спин-флуктуационного спаривания $T_c^{sf} \approx \approx \omega_s\exp(-1/V_{sf})$. Отметим, что как T_c^{ex}, так и T_c^{sf} обращаются в нуль при $n \to 0$ за счет стремления к нулю эффективных взаимодействий, V_{ex}, V_{sf}, пропорциональных плотности состояний $N_{d,sf}(\epsilon)$, что согласуется с результатами работы [7]. При учете обоих вкладов выражение для T_c удобно записать в виде

$$T_c \approx \omega_s\exp(-\frac{1}{\tilde{V}_s}), \\ \tilde{V}_s = V_{sf} + \frac{V_{ex}}{1 - V_{ex}\ln(\mu/\omega_s)}, \quad (31)$$

вводя здесь эффективную константу связи $\tilde{V}_s$ для спин-флуктуационного взаимодействия, которая значительно увеличивается при учете обменного вклада. Действительно, полагая здесь для оценок $\mu = \widetilde{W}/2 \approx 0.35$ эВ, $\omega_s \approx J \approx 0.13$ эВ и $V_{sf} \approx V_{ex} = 0.2$, получим $\tilde{V}_s \approx 0.2 + 0.25 = 0.45$ и $T_c \approx 160$ К, в то время как только спин-флуктуационный вклад дает $T_c^0 \approx \omega_s\exp(-1/V_{sf}) \approx 10$ К. Подобные же оценки можно провести и для случая электронного легирования $n \le 1$. В случае стандартной модели Хаббарда с равными параметрами межузельных перескоков получим одинаковые зависимости $T_c(\delta)$ от концентрации δ носителей ввиду электрон-дырочной симметрии. В эффективной p–d-модели (2) эта симметрия отсутствует и зависимость $T_c(\delta)$ для подзоны синглетных состояний, рассмотренной выше, и однодырочных состояний при электронном легировании будет различной.

Подтверждение приведенных оценок мы получили при численном решении уравнения для щели (27), используя прямое суммирование в $\mathbf{k}$-пространстве. При этом мы искали решения только d-волнового типа, при которых сверхпроводящая щель удовлетворяет условию $\tilde{\Delta}_\sigma^{22}(q_x, q_y) = -\tilde{\Delta}_\sigma^{22}(q_y, q_x)$. При нем автоматически выполняется тождество $\langle X_i^{\sigma 2} X_i^{\bar{\sigma} 2}\rangle = (1/N)\sum_{\mathbf{k}} \langle X_{\mathbf{k}}^{\sigma 2} X_{-\mathbf{k}}^{\bar{\sigma} 2}\rangle = 0$, которое следует из алгебры операторов Хаббарда. Определение температуры сверхпроводящего перехода $T_c(\delta)$ в линеаризованном уравнении (27) сводилось к поиску максимальных собственных значений для дискретного интегрального уравнения Фредгольма, а $\mathbf{k}$-зависимость щели определялась соответствующей собственной функцией этого уравнения. В качестве параметров p–d-модели были выбраны следующие значения: $\Delta_{pd} = 2t_{pd} = 3$ эВ, $t_{eff} \approx K_{22} 2\nu_1 t_{pd} \approx 0.14 t_{pd} \approx 0.2$ эВ. Для обменного взаимодействия мы приняли стандартное для t–J-модели значение $J = 0.4 t_{eff}$. Параметры в модели спиновой восприимчивости (28) — антиферромагнитная корреляционная длина при характерном ее значении $\xi = 3$ и энергия спиновых флуктуаций $\omega_s = 0.15$ эВ — предполагались не зависящими от концентрации дырок.

Результаты численного решения представлены на рис. 1 для зависимости температуры сверхпроводящего перехода T_c от концентрации дырок $\delta = n-1$ в синглетной подзоне (в единицах $t_{eff} \approx 0.2$ эВ). Спин-флуктуационное взаимодействие дает температуру перехода почти в три раза ниже, чем при учете обоих вкладов. Уменьшение корреляционной длины ξ приводит к существенному понижению спин-флуктуационного вклада в T_c. Максимальная температура $T_c^{max} \approx 0.12 t_{eff} \approx 270$ К достигается при оптимальном легировании $\delta_{opt} \approx 0.13$. Как известно, приближение слабой связи (25) приводит к завышенным значениям T_c: полный учет вкладов за счет массового оператора приводит к существенному понижению T_c (см., например, расчеты для t–J-модели [9]). При $\delta \to 0$ наш расчет показывает, что T_c также стремится к нулю, хотя в этом случае необходимо учитывать возможность появления антиферромагнитной неустойчивости и сопутствующей ей псевдощели в спектре квазичастиц [28]. Последняя также приводит к подавлению T_c. Дополнительный учет уменьшения корреляционной длины ξ с ростом концентрации дырок приведет к существенному понижению T_c при больших δ. В целом же зависимость $T_c(\delta)$ качественно согласуется с экспериментом и результатами численного моделирования для t–J-модели [11]. На рис. 2 приведена зависимость сверхпроводящей щели $\tilde{\Delta}^{22}(\mathbf{k})$ от волнового вектора $\mathbf{k}$ в первой четверти зоны Бриллюэна: $(0 \le k_x, k_y \le 1$, в единицах $\pi/a)$ при $\delta = 0.13$ для трех температур: $T = 0$ (*а*), $T = 0.5T_c$ (*б*) и $T = 0.9T_c$ (*в*). Числа на изолиниях показывают значение щели, а $(+/-)$ — ее знак. Поверхность Ферми изображена кружками. Расчет воспроизводит d-волновую симметрию щели, но со значительно более сложной зависимостью, чем простая модель в виде $\tilde{\Delta}_\sigma^{22}(\mathbf{q}) = \Delta_\sigma^d(\cos q_x - \cos q_y)$. При этом учет только спин-флуктуационного вклада приводит к максимальным значениям щели вне поверхно-

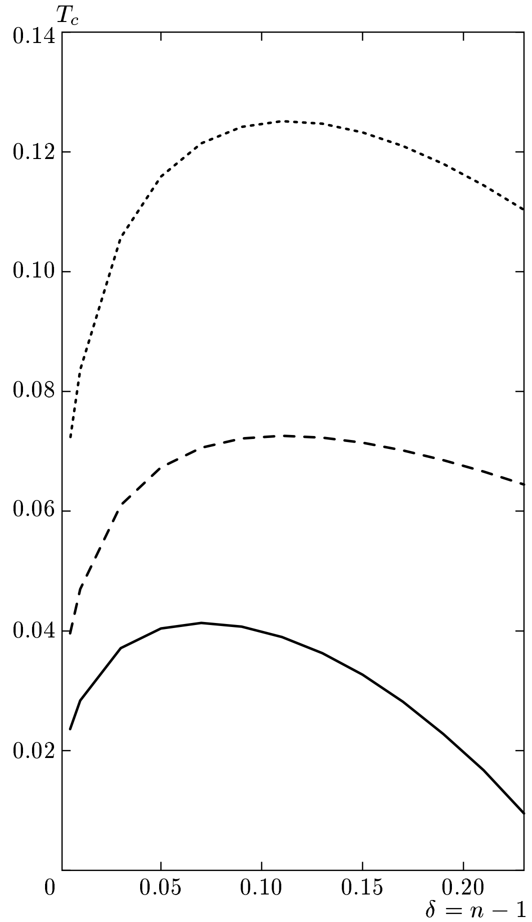

Рис. 1. Величина $T_c(\delta)$ (в единицах t_{eff}) при учете спин-флуктуационного вклада (сплошная линия), обменного взаимодействия (штриховая линия), обоих вкладов (пунктирная линия)

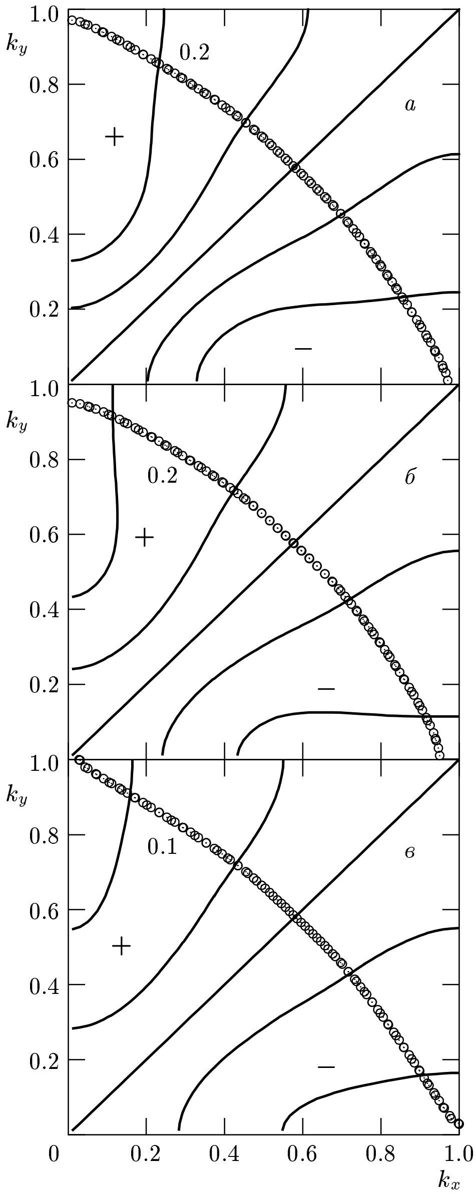

Рис. 2. Зависимость величины щели $\tilde{\Delta}^{22}(\mathbf{k})$ от волнового вектора $\mathbf{k}$ в первой четверти зоны Бриллюэна: ($0 \le k_x, k_y \le 1$, в единицах π/a) при $\delta = 0.13$ для трех температур: $T = 0$ (*а*), $T = 0.5T_c$ (*б*) и $T = 0.9T_c$ (*в*). Числа показывают значение щели, а (+/−) — ее знак. Поверхность Ферми изображена кружками

сти Ферми, которая при оптимальном легировании, как показано на рис. 2, лежит вблизи антиферромагнитной зоны Бриллюэна: $|k_x|+|k_y| = \pi$. Это объясняется малой величиной спин-флуктуационного взаимодействия вблизи антиферромагнитной зоны Бриллюэна, где $\gamma^2(\mathbf{k}) = 0$, в соответствии с замечанием Шриффера в работе [29] при обсуждении феноменологических моделей спин-флуктуационного спаривания. Поэтому учет обменного вклада оказывается существенным для достижения высоких T_c при «большой» поверхности Ферми.

В заключение приведем основные результаты проведенных расчетов в рамках p–d-модели Хаббарда (2). Наиболее важным для сверхпроводящего спаривания d-типа является обменное взаимодействие, связанное с межзонными перескоками. Эффекты запаздывания для этого механизма несущественны, и поэтому его можно аппроксимировать мгновенным обменным взаимодействием, как и в t–J-модели. Понижение кинетической энергии электронов при наличии сильных корреляций (запрет двухкратного заполнения квантовых состояний) за счет межзонных перескоков в решетке с ближним антиферромагнитным порядком и обусловливает спаривание электронов (дырок) в этом механизме. Как отмечал Андерсон [30], подобный механизм отсутствует в феноменологических спин-фермионных моделях, не учитывающих сильных корреляций. Спин-флуктуационное спаривание, обусловленное рассеянием на спиновых флуктуациях, дает определенный вклад в повышение температуры перехода, но эффективно проявляется только при достаточно высокой интенсивности спиновых флуктуаций. Полученные результаты подтверждают расчеты, проведенные в рамках t–J-модели [9]. Однако более сложный характер сверхпроводящих корреляций в модели Хаббарда в ПСП по сравнению с t–J-моделью (ср. (16) и (17)) требует учета динамических процессов, связанных с межзонными перескоками с большой энергией, что, по-видимому, объясняет несоответствие результатов, получаемых при численных расчетах для t–J-модели [11] и модели Хаббарда [12], которые позволяют учесть лишь ограниченное число возбужденных состояний.

Проведенные в настоящей работе расчеты связаны с определенными приближениями. Для уточнения полученных результатов необходимо провести самосогласованный расчет для функций Грина (4) и массового оператора (18), как это было сделано для t–J-модели [9]. При этом необходимо также получить выражение для динамической спиновой восприимчивости (24), не прибегая к приближению слабой связи (25). Эти вычисления предполагается провести в дальнейшем.

Авторы хотели бы поблагодарить П. Хорша (P. Horsch), Ф. Манчини (F. Mancini) и В. С. Удовенко за обсуждения. Один из авторов (Н. П.) благодарен проф. П. Фулде (P. Fulde) за гостеприимство во время его посещения Института комплексных систем Макса Планка. Авторы (С. А. и Г. А.) отмечают частичную финансовую поддержку гранта Румынии MER (№ 7038GR).

ПРИЛОЖЕНИЕ 1

Чтобы вычислить матрицу одночастичных возбуждений (8), необходимо рассмотреть уравнения движения для операторов Хаббарда:

$$\begin{aligned} Z_i^{\sigma 2} = [X_i^{\sigma 2}, H] = (E_1 + \Delta) X_i^{\sigma 2} + \\ + \sum_{l \neq i, \sigma'} \left(t_{il}^{22} B_{i\sigma\sigma'}^{22} X_l^{\sigma' 2} - 2\sigma t_{il}^{21} B_{i\sigma\sigma'}^{21} X_l^{0\bar{\sigma}'} \right) - \\ - \sum_{l \neq i} X_i^{02} \left(t_{il}^{11} X_l^{\sigma 0} + 2\sigma t_{il}^{21} X_l^{2\bar{\sigma}} \right), \end{aligned} \quad (32)$$

$$\begin{aligned} Z_i^{0\bar{\sigma}} = [X_i^{0\bar{\sigma}}, H] = E_1 X_i^{0\bar{\sigma}} + \\ + \sum_{l \neq i, \sigma'} \left(t_{il}^{11} B_{i\sigma\sigma'}^{11} X_l^{0\bar{\sigma}'} - 2\sigma t_{il}^{12} B_{i\sigma\sigma'}^{12} X_l^{\sigma' 2} \right) - \\ - \sum_{l \neq i} X_i^{02} \left(t_{il}^{22} X_l^{2\bar{\sigma}} + 2\sigma t_{il}^{12} X_l^{\sigma 0} \right), \end{aligned} \quad (33)$$

$$Z_i^{2\bar{\sigma}} = - \left(Z_i^{\bar{\sigma} 2} \right)^{\dagger}, \quad Z_i^{\sigma 0} = - \left(Z_i^{0\sigma} \right)^{\dagger}. \quad (34)$$

Здесь операторы $B_{i\sigma\sigma'}^{\alpha\beta}$ описывают спиновые и зарядовые флуктуации

$$\begin{aligned} B_{i\sigma\sigma'}^{22} = (X_i^{22} + X_i^{\sigma\sigma}) \delta_{\sigma'\sigma} + X_i^{\sigma\bar{\sigma}} \delta_{\sigma'\bar{\sigma}} = \\ = (\frac{1}{2} N_i + S_i^z) \delta_{\sigma'\sigma} + S_i^{\sigma} \delta_{\sigma'\bar{\sigma}}, \end{aligned} \quad (35)$$

$$B_{i\sigma\sigma'}^{21} = (\frac{1}{2} N_i + S_i^z) \delta_{\sigma'\sigma} - S_i^{\sigma} \delta_{\sigma'\bar{\sigma}}, \quad (36)$$

$$B_{i\sigma\sigma'}^{11} = \delta_{\sigma'\sigma} - B_{i\sigma\sigma'}^{21}, \quad B_{i\sigma\sigma'}^{12} = \delta_{\sigma'\sigma} - B_{i\sigma\sigma'}^{22}. \quad (37)$$

После выполнения необходимых коммутаций получаем матрицу одночастичных возбуждений в виде (10), компоненты которой приведены ниже:

$$\chi_2 \, a^{22} = \sum_{m \neq i} V_{im} \left(K_{22} \langle X_i^{2\bar{\sigma}} X_m^{\bar{\sigma} 2} \rangle - K_{11} \langle X_m^{\sigma 0} X_i^{0\sigma} \rangle \right),$$

$$\begin{aligned} \chi_2 \, a^{21} = - \sum_{m \neq i} V_{im} \left(K_{22} \langle X_i^{\sigma 0} X_m^{\bar{\sigma} 2} \rangle + \right. \\ \left. + K_{11} \langle X_i^{\bar{\sigma} 2} X_m^{\sigma 0} \rangle \right) - \\ - 2\sigma \sum_{m \neq i} V_{im} K_{12} \left(\langle X_i^{\sigma 0} X_m^{0\sigma} \rangle - \langle X_m^{2\bar{\sigma}} X_i^{\bar{\sigma} 2} \rangle \right). \end{aligned}$$

Перенормировка параметров перескока определяется корреляционными функциями

$$\begin{aligned} \chi_2 K_{ij}^{22} &= K_{22} \chi_{ij}^{cs} - K_{11} \langle X_i^{02} X_j^{20} \rangle, \\ \chi_1 K_{ij}^{11} &= K_{11} \left(\chi_{ij}^{cs} + 1 - n \right) - K_{22} \langle X_i^{02} X_j^{20} \rangle, \\ \chi_2 K_{ij}^{21} &= 2\sigma K_{12} \left(\chi_{ij}^{cs} - \frac{1}{2} n - \langle X_i^{02} X_j^{20} \rangle \right), \end{aligned}$$

где статическая корреляционная функция для числа частиц и спинов имеет вид $\chi_{ij}^{cs} = (1/4) \langle N_i N_j \rangle + \langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \rangle$. Одноузельные аномальные корреляционные функции в (14) определяются соотношениями

$$\begin{aligned} \chi_2 b_{\sigma}^{22} = \sum_{m \neq i} V_{im} \{ K_{22} \left(\langle X_i^{\bar{\sigma} 2} X_m^{\sigma 2} \rangle - \langle X_i^{\sigma 2} X_m^{\bar{\sigma} 2} \rangle \right) - \\ - 2\sigma K_{12} \left(\langle X_i^{\sigma 2} X_m^{0\sigma} \rangle + \langle X_i^{\bar{\sigma} 2} X_m^{0\bar{\sigma}} \rangle \right) \}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \chi_1 b_{\sigma}^{11} = - \sum_{m \neq i} V_{im} \{ K_{11} \left(\langle X_i^{0\sigma} X_m^{0\bar{\sigma}} \rangle - \langle X_i^{0\bar{\sigma}} X_m^{0\sigma} \rangle \right) - \\ - 2\sigma K_{12} \left(\langle X_i^{0\sigma} X_m^{\sigma 2} \rangle + \langle X_i^{0\bar{\sigma}} X_m^{\bar{\sigma} 2} \rangle \right) \}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \chi_2 b_{\sigma}^{21} = \sum_{m \neq i} V_{im} \{ K_{22} \left(\langle X_i^{0\sigma} X_m^{\sigma 2} \rangle + \langle X_i^{0\bar{\sigma}} X_m^{\bar{\sigma} 2} \rangle \right) - \\ - 2\sigma K_{12} \left(\langle X_i^{0\sigma} X_m^{0\bar{\sigma}} \rangle - \langle X_i^{0\bar{\sigma}} X_m^{0\sigma} \rangle \right) \}. \end{aligned}$$

ПРИЛОЖЕНИЕ 2

При вычислении массового оператора (9) в качестве неприводимых операторов, описывающих рассеяние одночастичных возбуждений на спиновых и зарядовых флуктуациях, учитывая уравнения движения (32)–(34), мы используем следующие функции: $Z_{i,\sigma,2}^{(ir)} = \sum_{l \neq i, \sigma'} \left(t_{il}^{22} \delta B_{i\sigma\sigma'}^{22} X_l^{\sigma' 2} - 2\sigma t_{il}^{21} \delta B_{i\sigma\sigma'}^{21} X_l^{0\bar{\sigma}'} \right)$, $Z_{i,0,\bar{\sigma}}^{(ir)} = \sum_{l \neq i, \sigma'} \left(t_{il}^{11} \delta B_{i\sigma\sigma'}^{11} X_l^{0\bar{\sigma}'} - 2\sigma t_{il}^{12} \delta B_{i\sigma\sigma'}^{12} X_l^{\sigma' 2} \right)$. Здесь $\delta B_{i\sigma\sigma'}^{\alpha\beta} = B_{i\sigma\sigma'}^{\alpha\beta} - \langle B_{i\sigma\sigma'}^{\alpha\beta} \rangle$.

В результате массовый оператор в представлении (18) принимает вид

$$\begin{aligned} \hat{M}_{ij\sigma}(\omega) &= \\ &= \left\langle\!\!\left\langle \begin{pmatrix} \left(Z_i^{\sigma 2} \right)^{(ir)} \\ \left(Z_i^{0\bar{\sigma}} \right)^{(ir)} \end{pmatrix} \middle| \begin{pmatrix} \left(Z_j^{2\sigma} \right)^{(ir)} & \left(Z_j^{\bar{\sigma} 0} \right)^{(ir)} \end{pmatrix} \right\rangle\!\!\right\rangle_{\omega}, \\ \hat{\Phi}_{ij\sigma}(\omega) &= \\ &= \left\langle\!\!\left\langle \begin{pmatrix} \left(Z_i^{\sigma 2} \right)^{(ir)} \\ \left(Z_i^{0\bar{\sigma}} \right)^{(ir)} \end{pmatrix} \middle| \begin{pmatrix} \left(Z_j^{\bar{\sigma} 2} \right)^{(ir)} & \left(Z_j^{0\sigma} \right)^{(ir)} \end{pmatrix} \right\rangle\!\!\right\rangle_{\omega}. \end{aligned} \quad (38)$$

Вычисление этих функций в приближении непересекающихся диаграмм приводит к следующему выражению для матрицы массового оператора:

$$\hat{M}_\sigma(\mathbf{q},\omega) = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} d\omega_1 K^{(+)}(\omega,\omega_1|\mathbf{k},\mathbf{q}-\mathbf{k}) \times$$
$$\times \left\{-\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\left[\hat{P}_2^{(+)}G_\sigma^{22}(\mathbf{k},\omega_1) + \hat{P}_1^{(+)}G_\sigma^{11}(\mathbf{k},\omega_1)\right]\right\},$$

$$\hat{\Phi}_\sigma(\mathbf{q},\omega) = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} d\omega_1 K^{(-)}(\omega,\omega_1|\mathbf{k},\mathbf{q}-\mathbf{k}) \times$$
$$\times \left\{-\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\left[\hat{P}_2^{(-)}F_\sigma^{22}(\mathbf{k},\omega_1) - \hat{P}_1^{(-)}F_\sigma^{11}(\mathbf{k},\omega_1)\right]\right\},$$

где коэффициенты при функциях Грина определяются матрицами

$$\hat{P}_2^{(\pm)} = \begin{pmatrix} K_{22}^2 & \pm 2\sigma K_{21}K_{22} \\ 2\sigma K_{21}K_{22} & \pm K_{21}^2 \end{pmatrix},$$
$$\hat{P}_1^{(\pm)} = \begin{pmatrix} K_{21}^2 & \pm 2\sigma K_{21}K_{11} \\ 2\sigma K_{21}K_{11} & \pm K_{11}^2 \end{pmatrix}.$$

Явный вид массового оператора для синглетной зоны в диагональном приближении приведен в уравнениях (21), (22).

ЛИТЕРАТУРА

1. Ю. А. Изюмов, УФН **169**, 225 (1999).
2. D. J. Scalapino, Phys. Rep. **250**, 329 (1995); E-print archives, cond-mat/9908287.
3. P. W. Anderson, Science **235**, 1196 (1987); P. W. Anderson, *The Theory of Superconductivity in the High-T_c Cuprates*, Princeton University Press, Princeton, New Jersey (1997).
4. N. M. Plakida, V. Yu. Yushankhai, and I. V. Stasyuk, Physica C **160**, 80 (1989); V. Yu. Yushankhai, N. M. Plakida, and P. Kalinay, Physica C **174**, 401 (1991).
5. Н. М. Плакида, Письма в ЖЭТФ **74**, 38 (2001).
6. N. M. Plakida, Condensed Matter Phys. (Ukraine) **5**, 707 (2002); E-print archives, cond-mat/0210385.
7. M. Yu. Kagan and T. M. Rice, J. Phys.: Condens. Matter **6**, 3771 (1994).
8. Yu. A. Izyumov and B. M. Letfulov, Int. J. Mod. Phys. B **6**, 3771 (1992).
9. N. M. Plakida and V. S. Oudovenko, Phys. Rev. B **59**, 11949 (1999).
10. E. Dagotto, Rev. Mod. Phys. **66**, 763 (1994).
11. S. Sorella, G. B. Martins, F. Becca, C. Gazza, L. Capriotti, A. Parola, and E. Dagotto, Phys. Rev. Lett. **88**, 117002 (2002).
12. Z. B. Huang, H. Q. Lin, and J. E. Gubernatis, Phys. Rev. B **64**, 205101 (2001).
13. V. J. Emery, Phys. Rev. Lett. **58**, 2794 (1987); C. M. Varma, S. Schmitt-Rink, and E. Abrahams, Sol. St. Comm. **62**, 681 (1987).
14. N. M. Plakida, Physica C **282–287**, 1737 (1997).
15. Р. О. Зайцев, В. Ф. Иванов, ФТТ **29**, 2554, 3111 (1987); R. O. Zaitsev and V. F. Ivanov, Int. J. Mod. Phys. B **5**, 153 (1988); Phisica C **153–155**, 1295 (1988).
16. N. M. Plakida and I. V. Stasyuk, Mod. Phys. Lett. **2**, 969 (1988).
17. J. Beenen and D. M. Edwards, Phys. Rev. B **52**, 13636 (1995).
18. A. Avella, F. Mancini, D. Villani, and H. Matsumoto, Physica C **282–287**, 1757 (1997); T. Di Matteo, F. Mancini, H. Matsumoto, and V. S. Oudovenko, Physica B **230–232**, 915 (1997).
19. T. D. Stanescu, I. Martin, and Ph. Phillips, Phys. Rev. B **62**, 4300 (2000).
20. Th. Maier, M. Jarrell, Th. Pruschke, and J. Keller, Phys. Rev. Lett. **85**, 1524 (2000).
21. A. I. Lichtenstein and M. I. Katsnelson, Phys. Rev. B **62**, R9283 (2000).
22. N. M. Plakida, R. Hayn, and J.-L. Richard, Phys. Rev. B **51**, 16599 (1995).
23. L. F. Feiner, J. H. Jefferson, and R. Raimondi, Phys. Rev. B **53**, 8751 (1996); R. Raimondi, J. H. Jefferson, and L. F. Feiner, Phys. Rev. B **53**, 8774 (1996).
24. V. Yu. Yushankhai, V. S. Oudovenko, and R. Hayn, Phys. Rev. B **55**, 15562 (1997).
25. В. В. Вальков, С. Г. Овчинников, *Квазичастицы в сильно коррелированных системах,* Изд-во СО РАН, Новосибирск (2001), гл. 8.
26. Д. Н. Зубарев, УФН **71**, 71 (1960).
27. J. Jaklič and P. Prelovsék, Phys. Rev. Lett. **74**, 3411 (1995); **75**, 1340 (1995).
28. P. Prelovsék and A. Ramšak, Phys. Rev. B **63**, 180506(R) (2001).
29. J. R. Schrieffer, J. Low Temp. Phys. **99**, 397 (1995).
30. P. W. Anderson, Adv. Phys. **46**, 3 (1997).