

О сверхпроводимости в подходе спинового полярона

A. Ф. Барабанов, Л. А. Максимов⁺, A. В. Михеенков¹⁾

Институт физики высоких давлений РАН, 142092 Троицк, Московская обл., Россия

⁺ РНЦ “Курчатовский институт”, 123182 Москва, Россия

Поступила в редакцию 14 мая 2001 г.

После переработки 14 августа 2001 г.

Для двумерной системы с сильной корреляцией между подсистемой носителей и подсистемой локализованных спинов рассматривается сверхпроводящее спаривание. В случае, когда элементарными возбуждениями являются спиновые поляроны, анализируется модель решетки Кондо. Показано, что для появления сверхпроводящего спаривания недостаточно учета только аномальных функций Грина для голых дырок – оно возникает только при введении аномальных функций Грина для спин-поляронных операторов.

PACS: 71.10.Fd, 71.27.+a, 75.30.Mb

Хорошо известно, что в рамках обычно используемых моделей двумерного слабо допированного антиферромагнетика голые носители описываются функцией Грина, которая имеет как когерентную квазичастичную часть, так и некогерентную часть. Такая структура функции Грина обусловлена сильным взаимодействием голых носителей с подсистемой локализованных спинов \hat{S}_r . При этом важно, что энержетически низко лежащий квазичастичный пик вблизи дна зоны хорошо определен и его спектральная плотность соответствует δ -функции $Z_k\delta(\omega - \varepsilon_k)$ с вычетом $Z_k \leq 1/2$. Этот результат может быть получен в рамках самосогласованного борновского приближения для широко используемых $t - J$ -модели, трехзонной модели Хаббарда и Кондо-решетки (см., например, [1–4]).

Сильное отличие Z_k от единицы и большая некогерентная часть указывают на то, что голая дырка $a_{k\sigma}^+$ не является хорошей квазичастицей. Хорошей квазичастицей является более сложное возбуждение – спиновый полярон, который в общем случае описывается оператором

$$p_{k\sigma}^+ = a_{k\sigma}^+ + b_{k\sigma}^+, \quad (1)$$

где b_k^+ представляет собой сумму членов, имеющих следующий символический вид: $a_{k-k_1-k_2-\dots-k_n}^+ \hat{S}_{k_1} \hat{S}_{k_2} \dots \hat{S}_{k_n}$, (см., например, [5]).

В существующих работах по теории сильно коррелированных систем сначала строятся низколежащие по энергии спин-поляронные состояния и находятся зоны элементарных возбуждений, а в дальней-

шем при изучении проблемы сверхпроводимости рассматривается, насколько нам известно, только спаривание голых носителей, без учета спаривания операторов $a_{k,\sigma}^+$ и $b_{-k,-\sigma}^+$ (см., например, [6]).

В настоящей работе в рамках среднеполевого подхода для простейшего варианта решетки Кондо [7, 8] мы продемонстрируем важность учета аномальных функций Грина вида $\langle \langle b_{-k,-\sigma}^+ | a_{k,\sigma}^+ \rangle \rangle$. Более того, будет показано, что в рассматриваемом подходе без учета подобных функций Грина сверхпроводимость невозможна. Фактически это означает, что механизм сверхпроводящего спаривания в данной модели является сильное взаимодействие электронов с возбуждениями антиферромагнитно упорядоченной спиновой подсистемы.

Гамильтониан решетки Кондо имеет следующий вид:

$$H^{tot} = H_0 + H_1 + H_2, \quad (2)$$

$$H_0 = \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{g}} t_{\mathbf{g}} a_{\mathbf{r}+\mathbf{g}, \sigma}^+ a_{\mathbf{r}, \sigma} = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}, \sigma}^+ a_{\mathbf{k}, \sigma}, \quad (3)$$

$$H_1 = J \sum_{\mathbf{r}, \sigma_1, \sigma_2} a_{\mathbf{r}, \sigma_1}^+ S_{\mathbf{r}}^\alpha \hat{\sigma}_{\sigma_1, \sigma_2}^\alpha a_{\mathbf{r}, \sigma_2}, \quad (4)$$

$$H_2 = \frac{1}{2} I \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{g}} S_{\mathbf{r}+\mathbf{g}}^\alpha S_{\mathbf{r}}^\alpha. \quad (5)$$

Здесь узлы \mathbf{r} образуют двумерную квадратную решетку, $|\mathbf{g}| = 1$ – радиус-векторы ближайших соседей, $a_{\mathbf{r}\sigma}^+$ – оператор рождения для ферми-частиц со

¹⁾e-mail: mikheen@online.ru

спиновым индексом $\sigma = \pm 1$ (пусть для определенности это будут дырки), H_0 описывает обычное перескоковое движение носителей, $t_{\mathbf{g}} = -t$, H_2 – антиферромагнитное взаимодействие локализованных $S = 1/2$ спинов с ближайшими соседями, H_1 – гамильтониан внутриузельного кондовского взаимодействия, $\hat{\sigma}^\alpha$ – матрица Паули, α – декартовы индексы.

Запишем теперь первые два уравнения бесконечной цепочки уравнений для функций Грина, описывающих движение дырки на антиферромагнитном фоне. Эти уравнения имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \omega \langle \langle a_{\mathbf{r}\sigma} | a_{\mathbf{r}_1,\sigma}^+ \rangle \rangle &= \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}_1} + \\ + \sum_{\mathbf{g}} t_{\mathbf{g}} \langle \langle a_{\mathbf{r}+\mathbf{g},\sigma} | a_{\mathbf{r}_1,\sigma}^+ \rangle \rangle + J \langle \langle b_{\mathbf{r}\sigma} | a_{\mathbf{r}_1,\sigma}^+ \rangle \rangle, \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \omega \langle \langle b_{\mathbf{r}\sigma} | a_{\mathbf{r}_1,\sigma}^+ \rangle \rangle &= \\ = \sum_{\mathbf{g},\sigma_1} t_{\mathbf{g}} \langle \langle S_{\mathbf{r}}^\alpha \hat{\sigma}_{\sigma,\sigma_1}^\alpha a_{\mathbf{r}+\mathbf{g},\sigma_1} | a_{\mathbf{r}_1,\sigma}^+ \rangle \rangle + \\ + i I e_{\alpha\beta\gamma} \sum_{\mathbf{g},\sigma_1} \hat{\sigma}_{\sigma,\sigma_1}^\alpha \langle \langle S_{\mathbf{r}+\mathbf{g}}^\beta S_{\mathbf{r}}^\gamma a_{\mathbf{r},\sigma_1} | a_{\mathbf{r}_1,\sigma}^+ \rangle \rangle + \\ + J \frac{3}{4} \langle \langle a_{\mathbf{r}\sigma} | a_{\mathbf{r}_1,\sigma}^+ \rangle \rangle - J \langle \langle b_{\mathbf{r}\sigma} | a_{\mathbf{r}_1,\sigma}^+ \rangle \rangle + \\ + J \sigma \langle \langle 2b_{\mathbf{r},-\sigma}^+ \sum_{\sigma_1} (\sigma_1 a_{\mathbf{r},\sigma_1} a_{\mathbf{r},-\sigma_1}) | a_{\mathbf{r}_1,\sigma}^+ \rangle \rangle. \end{aligned} \quad (7)$$

Здесь $b_{\mathbf{r}\sigma} = S_{\mathbf{r}}^\alpha \hat{\sigma}_{\sigma,\sigma_1}^\alpha a_{\mathbf{r},\sigma_1}$.

В настоящей работе в качестве основного состояния спиновой подсистемы принято сферически симметричное синглетное состояние. Оно характеризуется нулевым средним значением проекции спина на любом узле $\langle S_{\mathbf{r}}^\alpha \rangle = 0$ и ненулевыми антиферромагнитными спиновыми корреляциями $\langle S_0^\alpha S_{\mathbf{r}}^\alpha \rangle$ (которые не зависят от декартова индекса α [9, 10]).

Последнее слагаемое в (7) пропорционально концентрации носителей x , которая является малым параметром задачи ($x \leq 0.2$ в существенной для ВТСП области).

Рассмотрим сначала систему в нормальном состоянии в пределе малого допирования. Система уравнений (6), (7) для функций Грина $\langle \langle a_{\mathbf{r}\sigma} | a_{\mathbf{r}_1,\sigma}^+ \rangle \rangle, \langle \langle b_{\mathbf{r}\sigma} | a_{\mathbf{r}_1,\sigma}^+ \rangle \rangle$ незамкнута. Для замыкания цепочки уравнений воспользуемся стандартной проекционной техникой Цванцига – Мори [11]. Для системы уравнений (6), (7) это означает, что в правой части (7) необходимо аппроксимировать первые два члена их проекциями на некоторый выбранный операторный базис, а последним членом можно пренебречь.

Простейший операторный базис образуется двумя операторами, которые возникают в первом уравнении

(6) системы. Это операторы уничтожения для “голого” электрона $a_{\mathbf{r}\sigma}$ и внутриузельного спинового полярона оператора $b_{\mathbf{r}\sigma}$. Выбор такого базиса означает, что спиновый полярон будет строиться как когерентная суперпозиция оператора $a_{\mathbf{k}\sigma}$ голой дырки и оператора $b_{\mathbf{k}\sigma}$ дырки, связанной с локальным спином. Такой локальный полярон является аналогом синглета Занга – Райса в трехзонной модели Хаббарда. В пределе сильного кондовского взаимодействия J такие локальные поляроны лучше всего описывают истинную нижнюю квазичастичную зону.

После проектирования система уравнений (6), (7) (без последнего члена в (7)) в \mathbf{k} -представлении приобретает вид

$$(\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}) G_{\mathbf{k}}^1 = 1 + J G_{\mathbf{k}}^2, \quad (8)$$

$$(\omega - e_{\mathbf{k}}) G_{\mathbf{k}}^2 = \frac{3}{4} J G_{\mathbf{k}}^1, \quad (9)$$

$$G_{\mathbf{k}}^1 = \langle \langle a_{\mathbf{k},\sigma} | a_{\mathbf{k},\sigma}^+ \rangle \rangle; \quad G_{\mathbf{k}}^2 = \langle \langle b_{\mathbf{k},\sigma} | a_{\mathbf{k},\sigma}^+ \rangle \rangle; \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\mathbf{k}} &= -2t(\cos k_x + \cos k_y) - \mu; \\ e_{\mathbf{k}} &= \left(\frac{4}{3} c_{\mathbf{g}} \varepsilon_{\mathbf{k}} - J - \frac{16}{3} I c_{\mathbf{g}} \right) - \mu. \end{aligned} \quad (11)$$

Здесь $b_{\mathbf{k},\sigma}$, $a_{\mathbf{k},\sigma}$ и $G_{\mathbf{k}}$ – фурье-образы соответствующих узельных операторов и функций Грина, $c_{\mathbf{g}} = \langle \mathbf{S}_{\mathbf{r}} \mathbf{S}_{\mathbf{r}+\mathbf{g}} \rangle$ – спин-спиновая корреляционная функция. Все энергии отсчитываются от химпотенциала μ .

Решение системы (8), (9) приводит к следующему виду спектра возбуждений для нормального состояния:

$$\omega_{1,2}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \left\{ \varepsilon_{\mathbf{k}} + e_{\mathbf{k}} \mp \sqrt{(\varepsilon_{\mathbf{k}} - e_{\mathbf{k}})^2 + \frac{3}{4} J^2} \right\}. \quad (12)$$

Химпотенциал предполагается лежащим в нижней зоне ω_1 .

Для описания сверхпроводимости необходимо при выполнении проектирования расширить операторный базис, добавив операторы $a_{\mathbf{r}}^+, b_{\mathbf{r}}^+$. Единственный член, имеющий ненулевую проекцию на добавочное подпространство, – последнее слагаемое в правой части (7). Его проекция на $a_{\mathbf{r}}^+$ равна нулю, а проекция на $b_{\mathbf{r}}^+$ имеет следующий вид (отметим, что в данном случае проекционная техника дает точно такой же результат, как и простейшее расцепление):

$$\begin{aligned} J \sigma \langle \langle 2b_{\mathbf{r},-\sigma}^+ \sum_{\sigma_1} (\sigma_1 a_{\mathbf{r},\sigma_1} a_{\mathbf{r},-\sigma_1}) | a_{\mathbf{r}_1,\sigma}^+ \rangle \rangle &\approx \\ \approx J \eta^* \langle \langle \sigma b_{\mathbf{r},-\sigma}^+ | a_{\mathbf{r}_1,\sigma}^+ \rangle \rangle, \end{aligned} \quad (13)$$

$$\eta^* = \left\langle \sum_{\sigma_1} (\sigma_1 a_{\mathbf{r}, \sigma_1} a_{\mathbf{r}, -\sigma_1}) \right\rangle. \quad (14)$$

В результате в правой части (7) возникает аномальная функция Грина $F^2 = \sigma \langle \langle b_{-\mathbf{k}, -\sigma}^+ | a_{\mathbf{k}, \sigma}^+ \rangle \rangle$ и аномальное среднее η^* . Выполняя далее стандартные вычисления, в рамках описанной проекционной техники получим замкнутую систему уравнений для сверхпроводящего случая:

$$\begin{aligned} (\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}) G_{\mathbf{k}}^1 &= 1 + J G_{\mathbf{k}}^2, \\ (\omega - e_{\mathbf{k}}) G_{\mathbf{k}}^2 &= \frac{3}{4} J G_{\mathbf{k}}^1 + J \eta^* F_{\mathbf{k}}^2, \\ (\omega + \varepsilon_{\mathbf{k}}) F_{\mathbf{k}}^1 &= -J F_{\mathbf{k}}^2, \\ (\omega + e_{\mathbf{k}}) F_{\mathbf{k}}^2 &= -\frac{3}{4} J F_{\mathbf{k}}^1 + J \eta^* G_{\mathbf{k}}^2; \end{aligned} \quad (15)$$

$$F^1 = \sigma \langle \langle a_{-\mathbf{k}, -\sigma}^+ | a_{\mathbf{k}, \sigma}^+ \rangle \rangle; \quad F^2 = \sigma \langle \langle b_{-\mathbf{k}, -\sigma}^+ | a_{\mathbf{k}, \sigma}^+ \rangle \rangle. \quad (16)$$

Отметим важнейшую роль, которую играет проектирование правой части на спин-поляронный оператор b^+ . Обычно в литературе при рассмотрении спин-поляронных возбуждений выполняется проектирование только на оператор голого носителя $a_{\mathbf{r}}^+$ (или используется эквивалентное такому проектированию приближение). Причем в некоторых моделях ($t - J$, трехзонная модель Хаббарда) такой подход приводит к появлению сверхпроводящего спаривания. Тем не менее, мы считаем, что подобный ограниченный подход может оказаться недостаточно корректным – из-за принципиальной важности b^+ -части спин-поляронного оператора p^+ (1).

Рассматриваемая модель является наиболее яркой демонстрацией такой ситуации, так как только член (13), возникающий в результате проектирования на оператор b^+ , приводит к сверхпроводящему спариванию (причем к спариванию как спиновых поляронов, так и голых дырок).

Отметим, что дифференцирование функции Грина F^2 по оператору $a_{\mathbf{k}, \sigma}^+$ позволяет получить точное выражение полярон-поляронной функции Грина $F^3 = \sigma \langle \langle b_{-\mathbf{k}, -\sigma}^+ | b_{\mathbf{k}, \sigma}^+ \rangle \rangle$ через F^2 .

Решение системы уравнений (15) позволяет получить выражения для нормальных функций Грина, перенормированных спектра и вычетов $Z_{\mathbf{k}}$. Однако нас интересует только аномальная функция Грина F^1 . Она имеет вид

$$F_{\mathbf{k}}^1 = - \left(\frac{3}{4} \right)^2 \eta J^3 D_{\mathbf{k}}^{-1}, \quad (17)$$

$$\begin{aligned} D_{\mathbf{k}} \equiv & \left[(\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}})(\omega - e_{\mathbf{k}}) - \frac{3}{4} J^2 \right] \times \\ & \times \left[(\omega + \varepsilon_{\mathbf{k}})(\omega + e_{\mathbf{k}}) - \frac{3}{4} J^2 \right] - \\ & - |\eta|^2 (\omega + \varepsilon_{\mathbf{k}})(\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}) J^2. \end{aligned} \quad (18)$$

Спектр возбуждений определяется уравнением $D_{\mathbf{k}} = 0$. Его удобно записать в виде

$$(\omega^2 - \omega_1^2)(\omega^2 - \omega_2^2) - |\eta|^2 (\omega^2 - \varepsilon_{\mathbf{k}}^2) J^2 = 0, \quad (19)$$

где $\omega_1(\mathbf{k}), \omega_2(\mathbf{k})$ – решения уравнения (12), определяющего двухзонный спектр спинового полярона.

Мы предполагаем, что уровень Ферми расположен в нижней полярной зоне ω_1 . J – самый большой параметр задачи, $(\omega_2^2 - \omega_1^2) \sim J^2$. Мы ищем решение (19), близкое к уровню Ферми. Поэтому можно положить $(\omega^2 - \omega_2^2) \approx (\omega_1^2 - \omega_2^2)$. Тогда $F_{\mathbf{k}}^1$ определяется выражением

$$F_{\mathbf{k}}^1 = \left(\frac{3}{4} \right)^2 \eta J^3 \alpha_{\mathbf{k}}^{-2} [\omega^2 - E_{\mathbf{k}}^2]^{-1}, \quad (20)$$

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\omega_1^2 \alpha_{\mathbf{k}}^{-2} (\omega_2^2 - \omega_1^2) + \Delta_{\mathbf{k}}^2}, \quad (21)$$

$$\Delta_{\mathbf{k}}^2 = \alpha_{\mathbf{k}}^{-2} \varepsilon_{\mathbf{k}}^2 J^2 |\eta|^2, \quad (22)$$

$$\alpha_{\mathbf{k}}^2 = (\omega_2^2 - \omega_1^2) + \frac{3}{4} |\eta|^2 J^2. \quad (23)$$

Выражая стандартным образом аномальное среднее η (14) через мнимую часть функции Грина $F_{\mathbf{k}}^1$ (20), получаем самосогласованное уравнение для η :

$$\eta = \frac{v}{(2\pi)^2} \int d\omega d\mathbf{k} n(\omega) \frac{1}{\pi} \text{Im} F^1, \quad (24)$$

где v – площадь элементарной ячейки, $n(\omega) = (\exp(\omega/T) + 1)^{-1}$.

Подчеркнем, что, хотя в уравнении (24) фигурирует аномальная функция Грина только голых дырок, однако эта функция связана с поляронными функциями G_2, F_2 (см. (15)).

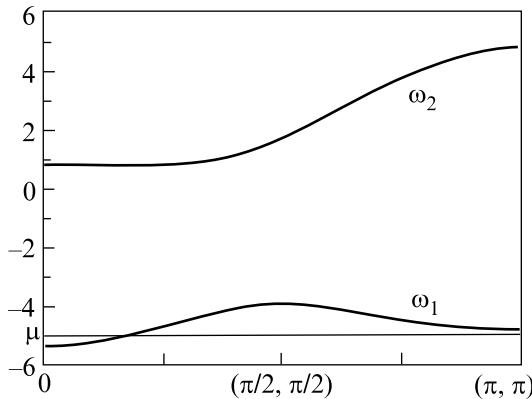
После интегрирования по ω уравнение для η приобретает вид

$$1 = 2 \left(\frac{3}{4} \right)^2 J^3 \frac{v}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{k} \alpha_{\mathbf{k}}^{-2} \frac{1 - 2n(E_{\mathbf{k}})}{2E_{\mathbf{k}}}. \quad (25)$$

Приведем оценку для сверхпроводящей щели Δ при $T = 0$ в простейшем логарифмическом приближении, пренебрегая в (25) зависимостью $\Delta_{\mathbf{k}}$ от \mathbf{k} . Так как

$\eta^2 \ll 1$, можно положить $\alpha_{\mathbf{k}}^{-2}(\omega_2^2 - \omega_1^2) \approx 1$ (см. (23)). Уравнение (25) имеет стандартный вид теории БКШ с эффективной константой связи $g \sim J^3 \alpha_{\mathbf{k}}^{-2} \sim J$, а не J^2 , как было бы в случае слабого кондуктивного взаимодействия.

На рисунке представлен типичный вид поляронных зон $\omega_1(\mathbf{k}) + \mu$, $\omega_2(\mathbf{k}) + \mu$ (12) (для следующих



Относительное положение локальных спин-поляронных зон $\omega_1 + \mu$ (нижняя кривая), $\omega_2 + \mu$ (верхняя кривая) в направлении $(0, 0) - (\pi, \pi)$. Горизонтальная прямая качественно указывает на положение химпотенциала в нижней зоне. Энергетический параметр $t = 1$, остальные параметры приведены в тексте

значений параметров: $t_g = -t$, $J = 3t$, $I = 0.4t$, $t = 1$, $c_g = -0.33$). Будем считать, что химпотенциал расположен около центра нижней зоны. Тогда легко убедиться, что $\omega_2 \sim J$. Энергетический параметр обрезания определяется либо шириной нижней зоны W_1 , либо характерной энергией спиновых возбуждений I . В нашем случае обе эти величины порядка t . Тогда для Δ имеет место следующая оценка:

$$\Delta = W_1 \exp \left(-\frac{\pi W_1 \omega_2^2}{2 (3/4)^2 J^3} \right) \sim t \exp(-t/J). \quad (26)$$

Типичное значение W_1 для ВТСП $0.3 \div 0.5$ эВ, что дает для щели разумную оценку $\Delta \approx 100$ К.

Отметим, что более точная оценка для $\Delta_{\mathbf{k}}$ дается выражением (22), содержащим зависимость Δ от \mathbf{k} . Главная часть этой зависимости определяется множителем $\varepsilon_{\mathbf{k}}^2$. Нетрудно видеть, что в нашем случае $\varepsilon_{\mathbf{k}} > 0$ для любого \mathbf{k} . То есть у щели $\Delta_{\mathbf{k}}$ нет нулей на ферми-поверхности. Однако, как было отме-

чено выше, мы использовали простейший вид спин-поляронного оператора – локальный спиновый полярон. В недавних работах авторов на примере трех моделей ($s - d$ [12], эффективной трехзонной [13] и $t - J$ [14]) было продемонстрировано, насколько важную роль при рассмотрении спинового полярона играет расширение операторного базиса – включение операторов, описывающих “одевание” локального полярона спиновыми флуктуациями в пределах спиновой корреляционной длины ξ . Такое расширение базиса существенно понижает спин-поляронную зону и может привести к более сложной зависимости Δ от \mathbf{k} , в том числе и появлению нулей Δ на поверхности Ферми.

Работа выполнена при поддержке INTAS (грант # 97-11066), Российского фонда фундаментальных исследований (грант # 01-02-16719) и НАТО (Collaborative Linkage Grant # PST.CLG.976416). Авторы благодарны Р.Кузяну и Р.Хайну за стимулирующие обсуждения.

1. E. Dagotto, Rev. Mod. Phys. **66**, 763 (1994).
2. Z. Liu and E. Manousakis, Phys. Rev. **B45**, 2425 (1992).
3. G. Martinez and P. Horsch, Phys. Rev. **B44**, 317 (1991).
4. R. O. Kuzian, R. Hayn, A. F. Barabanov, and L. A. Maksimov, Phys. Rev. **B58**, 6194 (1998).
5. O. F. de Alcantara Bonfim and G. F. Reiter, in *Proc. of the Univ. of Miami Workshop on Electronic Structure and Mechanisms for High Temperature Superconductivity*, Ed. J. Ashkenazi, Plenum, N.Y., 1991.
6. N. M. Plakida and V. S. Oudovenko, Phys. Rev. **B59**, 11949 (1999).
7. P. Prelovsek, Phys. Lett. **A126**, 287 (1988).
8. A. Ramsak and P. Prelovsek, Phys. Rev. **B40**, 2239 (1989); **42**, 10415 (1990).
9. A. F. Barabanov and V. M. Beresovsky, Phys. Lett. **A186**, 175 (1994).
10. A. F. Barabanov and V. M. Beresovsky, ЖЭТФ **106**, 1156 (1994).
11. H. Mori, Prog. Theor. Phys. **33**, 423 (1965).
12. A. F. Barabanov, O. V. Urazaev, A. A. Kovalev, and L. A. Maksimov, Письма в ЖЭТФ **68**, 386 (1998).
13. A. F. Barabanov, R. Hayn, A. A. Kovalev et al., ЖЭТФ (принято в печать), 2001; cond-mat/009237.
14. R. Hayn, A. F. Barabanov, and L. A. Maksimov, Physica **B259–261**, 749 (1999).