

ВЛИЯНИЕ СПИНОВЫХ ФЛУКТУАЦИЙ НА СВЕРХПРОВОДЯЩУЮ ФАЗУ ФЕРМИОНОВ ХАББАРДА $t-t'-t''-J^*$ -МОДЕЛИ

В. В. Вальков^{a,b,c*}, *А. А. Головня*^{a,c}

^a *Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук
660036, Красноярск, Россия*

^b *Сибирский федеральный университет
660041, Красноярск, Россия*

^c *Сибирский государственный аэрокосмический университет
660074, Красноярск, Россия*

Поступила в редакцию 25 июня 2007 г.,
после переработки 18 июля 2008 г.

Методом диаграммной техники для операторов Хаббарда исследовано влияние спин-флуктуационных процессов рассеяния на область реализации сверхпроводящей фазы сильно коррелированных электронов (фермионов Хаббарда). При учете вкладов от аномальных компонент $P_{0\sigma,\bar{\sigma}0}$ силового оператора \hat{P} получены модифицированные уравнения Горькова, представляющие собой бесконечную систему интегральных уравнений. Показано, что в однопетлевом приближении для $t-t'-t''-J^*$ -модели, учитывающей дальние перескоки и трехцентровые взаимодействия, процессы спин-флуктуационного рассеяния отражаются посредством нормальных $P_{0\sigma,0\sigma}$ и аномальных $P_{0\sigma,\bar{\sigma}0}$ компонент силового оператора. При этом трехцентровые взаимодействия по разному ренормируют ядра интегральных уравнений для сверхпроводящей d -фазы в выражениях для массового и силового операторов. В отмеченном приближении для симметрии параметра порядка сверхпроводящей фазы d -типа система интегральных уравнений сведена к системе неоднородных уравнений для амплитуд. Найденные зависимости критической температуры от концентрации электронов показали, что совместное влияние дальних перескоков, трехцентровых взаимодействий и спин-флуктуационных процессов приводит к значительной ренормировке области реализации сверхпроводящей фазы.

PACS: 71.27.+a, 74.20.Mn, 75.40.Gb

1. ВВЕДЕНИЕ

Развитие микроскопической теории высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) чаще всего осуществляется в рамках модельных гамильтонианов, отражающих наличие в системе сильных электронных корреляций. С этим обстоятельством связана высокая популярность модели Хаббарда [1], а также моделей, являющихся ее много-

зонным обобщением [2, 3]. После работы Андерсона [4] повышенный интерес вызывает так называемая $t-J$ -модель, способная, как известно, описать обменный и спин-флуктуационный механизмы синглетного спаривания электронов с d -типом симметрии параметра порядка [5–12]. Наряду с этим, исходя из общих свойств сильно коррелированных систем, были предложены новые механизмы спаривания в купратных сверхпроводниках [13–15].

Для микроскопических моделей сильно коррелированных систем вывод уравнений самосогласования сверхпроводящей фазы может быть реализо-

*E-mail: vvv@iph.krasn.ru

ван несколькими способами. Один из них основан на методе неприводимых функций Грина, построенных на операторах Хаббарда [5, 7]. Другой подход связан с использованием графической формы теории возмущений для мацубаровских функций Грина в атомном представлении [6, 10, 16–19]. Такую методику исследования сильно коррелированных систем принято называть диаграммной техникой для операторов Хаббарда. Расчеты, проведенные при использовании отмеченных подходов, показали, что в простейшем приближении структура получающихся уравнений для сверхпроводящей фазы качественно аналогична структуре уравнений теории БКШ.

При выходе за рамки среднего поля в структуре уравнений сверхпроводящей фазы сильно коррелированных систем возникают качественные отличия. Одна из причин заключается в том, что в графическом ряду для мацубаровских функций Грина присутствуют так называемые концевые диаграммы [6, 10, 16]. Важная роль этих диаграмм в квантовой теории магнетизма была установлена достаточно давно (см., например, [10, 18]). Их полную совокупность называют концевым множителем [6, 10, 18] или силовым оператором. Последний термин был предложен в работе [20] при анализе особенностей диаграммной техники для спиновых операторов.

Описание сверхпроводящей фазы связано с введением как нормальных, так и аномальных функций Грина [21]. В соответствии с этим, массовый оператор приобретает матричную структуру, характеризуюсь нормальными и аномальными компонентами. Аналогично следует ожидать, что силовой оператор также будет представляться в матричном виде. Его недиагональные компоненты отражают аномальные составляющие силового оператора и должны быть учтены при построении теории сверхпроводящей фазы сильно коррелированных систем. Однако до настоящего времени такой учет проведен не был.

В данной работе показано, что диаграммный ряд для нормальных и аномальных функций Грина действительно содержит графики, относящиеся к классу аномальных концевых диаграмм и дающие вклад в аномальные компоненты силового оператора. С учетом этого факта для $t-t'-t''-J^*$ -модели, учитывающей дальние перескоки и трехцентровые взаимодействия, в графической форме представлены уравнения для мацубаровских функций Грина и записаны их аналитический вид. Показано, что аномальные компоненты силового оператора имеют существенное значение при вычислении аномальных средних. Конкретные расчеты проведены в однопетлевом приближении, в котором аномальные компонен-

ты силового оператора (в отличие от массового оператора) зависят от мацубаровской частоты. Это приводит к тому, что в рассматриваемом приближении сверхпроводящая фаза описывается бесконечной системой интегральных уравнений. При вычислении температуры перехода в сверхпроводящую фазу с симметрией параметра порядка d -типа эта система решалась численно. Проведенные расчеты позволили изучить совместное влияние перескоков электронов на узлы из дальних координационных сфер, трехцентровых взаимодействий и спиновых флуктуаций на область реализации сверхпроводящей фазы с данным типом симметрии параметра порядка. Показано, что процессы спин-флуктуационного рассеяния отражаются через нормальные и аномальные компоненты силового оператора и существенно влияют на концентрационную зависимость критической температуры сверхпроводящего перехода. При этом наиболее существенное влияние спиновых флуктуаций проявляется в той области параметров модели, где в простейших приближениях фазовая диаграмма системы близка к экспериментально наблюдаемой. Это означает, что при последовательном развитии теории сверхпроводящей фазы хаббардовских фермионов наряду с аномальными компонентами массового оператора необходимо учитывать также и аномальные компоненты силового оператора.

Дальнейшее изложение статьи организовано следующим образом. В разд. 2 описано получение общих уравнений для нормальных и аномальных мацубаровских функций Грина при учете вкладов от аномальных компонент силового оператора. Показывается, что эти аномальные компоненты принципиально меняют структуру выражения для аномальных средних. Раздел 3 посвящен аналитическому вычислению в однопетлевом приближении для $t-t'-t''-J^*$ -модели аномальных компонент массового и силового операторов. В разд. 4 выведена бесконечная система интегральных уравнений самосогласования для сверхпроводящей фазы. Упрощение этой системы для симметрии параметра порядка d -типа и вывод алгоритма вычисления критической температуры представлены в разд. 5. В разд. 6 проведен расчет нормальных компонент силового и массового операторов. Здесь же представлены результаты численных расчетов, демонстрирующие существенную роль спин-флуктуационных процессов рассеяния, отражающихся посредством учета компонент силового оператора. В заключительном разд. 7 обобщены основные результаты данной работы.

2. УРАВНЕНИЯ ГОРЬКОВА ПРИ УЧЕТЕ АНОМАЛЬНЫХ КОМПОНЕНТ СИЛОВОГО ОПЕРАТОРА

Проанализируем модификацию уравнений само-согласования для сверхпроводящей фазы, индуцированную явным учетом аномальных компонент силового оператора. Рассмотрение проведем в рамках $t-t'-t''-J^*$ -модели, правильно отражающей предел сильных корреляций модели Хаббарда. В атомном представлении гамильтониан $t-t'-t''-J^*$ -модели записывается в виде [12]

$$H = \sum_{f\sigma} (\varepsilon - \mu) X_f^{\sigma\sigma} + \sum_{fm\sigma} t_{fm} X_f^{\sigma 0} X_m^{0\sigma} + \sum_{fm} J_{fm} \left(X_f^{+-} X_m^{-+} - X_f^{++} X_m^{--} \right) + \sum_{\substack{fmg\sigma \\ (f \neq g)}} \left(\frac{t_{fm} t_{mg}}{U} \right) \times (X_f^{\sigma 0} X_m^{\bar{\sigma}\sigma} X_g^{0\bar{\sigma}} - X_f^{\sigma 0} X_m^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} X_g^{0\sigma}). \quad (1)$$

Здесь X_f^{pq} — операторы Хаббарда: $X_f^{0\sigma}$ ($X_f^{0\bar{\sigma}}$) описывает переход иона, находящегося в узле f , из одноэлектронного состояния с проекцией спинового момента σ ($\bar{\sigma} = -\sigma$) в состояние без электронов, $X_f^{\sigma 0}$ описывает обратный процесс. Одноузельные переходы, связанные с изменением проекции спинового момента, отражаются посредством операторов X_f^{+-} и X_f^{-+} . Диагональные операторы $X_f^{\sigma\sigma}$ и X_f^{00} являются проекционными операторами для одноэлектронного и нуль-электронного секторов гильбертова подпространства, соответствующего узлу f . Энергия одноэлектронного одноионного состояния обозначена посредством ε , μ — химический потенциал системы, t_{fm} — интеграл перескока электрона из узла m на узел f , J_{fm} — параметр обменной связи между одноэлектронными состояниями на узлах m и f .

Три первых слагаемых гамильтониана (1), как известно, соответствуют t - J -модели, а последнее описывает трехцентровые взаимодействия ($H_{(3)}$), которые иногда называют коррелированными перескоками. Гамильтониан (1) может быть получен из модели Хаббарда в режиме сильных электронных корреляций $|t_{fm}| \ll U$, если концентрация носителей тока $n < 1$ [12]. Включение $H_{(3)}$ обусловлено тем, что индуцируемые им эффекты существенно влияют на концентрационную зависимость критической температуры $T_c(n)$ [22]. Поскольку же конкретный характер зависимости $T_c(n)$ меняется при добавлении перескоков между узлами из дальних координацион-

ных сфер, в дальнейшем мы не будем ограничиваться приближением ближайших соседей и будем считать, что отличными от нуля являются три параметра перескока t , t' и t'' . В литературе такую модель иногда называют $t-t'-t''-J^*$ -модель (знак звездочки указывает на присутствие в гамильтониане взаимодействий $H_{(3)}$). Заметим, что необходимость учета трехцентровых взаимодействий при анализе свойств модели Хаббарда в режиме сильных корреляций демонстрируется в последнее время во многих работах (см., например, [23]).

Известно, что описание обычных сверхпроводников можно провести в рамках уравнений Горькова, связывающих функции Грина с нормальными $\Sigma_{0\uparrow,0\uparrow}(\mathbf{k}, i\omega_n)$ и аномальными $\Sigma_{0\uparrow,0\downarrow}(\mathbf{k}, i\omega_n)$ компонентами массового оператора $\hat{\Sigma}(\mathbf{k}, i\omega_n)$. Как отмечено во Введении, при рассмотрении электронных систем с сильными корреляциями на основе графической формы теории возмущений в атомном представлении необходимо учитывать также и аномальные компоненты $P_{0\uparrow,0\downarrow}(\mathbf{k}, i\omega_n)$, $P_{0\downarrow,0\uparrow}(\mathbf{k}, i\omega_n)$ силового оператора $\hat{P}(\mathbf{k}, i\omega_n)$. В этой связи кратко остановимся на изменениях в уравнениях сверхпроводящей фазы, индуцированных учетом аномальных компонент $P_{0\sigma,0\bar{\sigma}}(\mathbf{k}, i\omega_n)$ и $P_{\bar{\sigma}0,0\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_n)$.

Введем мацубаровские функции Грина в атомном представлении [16]:

$$D_{\alpha\beta}(f\tau; g\tau') = - \left\langle T_{\tau} \tilde{X}_f^{\alpha}(\tau) \tilde{X}_g^{-\beta}(\tau') \right\rangle. \quad (2)$$

Под α и β понимается пара индексов одноузельных состояний, например, (0σ) , $(\bar{\sigma}0)$, $(+-)$. При этом, если $\beta = (pq)$, то $-\beta = (qp)$. Оператор T_{τ} является оператором упорядочения по мацубаровскому времени. В правой части определения (2) операторы Хаббарда берутся в «гейзенберговском» представлении с мацубаровским временем τ ,

$$\tilde{X}_f^{\alpha}(\tau) = \exp(\tau H) X_f^{\alpha} \exp(-\tau H), \quad 0 < \tau < 1/T, \quad (3)$$

где T — температура системы, а H — ее гамильтониан.

Для получения уравнений Горькова рассмотрим нормальные $D_{0\sigma,0\sigma}$, $D_{\bar{\sigma}0,\bar{\sigma}0}$ и аномальные $D_{0\sigma,\bar{\sigma}0}$, $D_{\bar{\sigma}0,0\sigma}$ функции Грина. Для краткости изложения введем матричную электронную функцию

$$\hat{D}_{\sigma}(f\tau; g\tau') = \begin{bmatrix} D_{0\sigma,0\sigma}(f\tau; g\tau'), & D_{0\sigma,\bar{\sigma}0}(f\tau; g\tau') \\ D_{\bar{\sigma}0,0\sigma}(f\tau; g\tau'), & D_{\bar{\sigma}0,\bar{\sigma}0}(f\tau; g\tau') \end{bmatrix} \quad (4)$$

и определим ее фурье-образ $\hat{D}_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_m)$:

$$\hat{D}_\sigma(f\tau; g\tau') = \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}, \omega_m} \exp \{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_f - \mathbf{R}_g) - i\omega_m(\tau - \tau')\} \hat{D}_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_m). \quad (5)$$

Из графического ряда для функции $\hat{D}_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_m)$ следует матричное соотношение

$$\hat{D}_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_m) = \hat{G}_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_m) \hat{P}_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_m), \quad (6)$$

где $\hat{P}_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_m)$ — силовой оператор

$$\hat{P}_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_m) = \begin{bmatrix} P_{0\sigma,0\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_m), & P_{0\sigma,\bar{\sigma}0}(\mathbf{k}, i\omega_m) \\ P_{\bar{\sigma}0,0\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_m), & P_{\bar{\sigma}0,\bar{\sigma}0}(\mathbf{k}, i\omega_m) \end{bmatrix}, \quad (7)$$

а $\hat{G}_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_m)$ — функция, удовлетворяющая уравнению Горькова

$$\text{---} = \text{---} + \text{---} \circ \hat{\Sigma}. \quad (8)$$

Здесь жирной линией обозначена матричная функция Грина

$$\hat{G}_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_m) = \begin{bmatrix} G_{0\sigma,0\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_m), & G_{0\sigma,\bar{\sigma}0}(\mathbf{k}, i\omega_m) \\ G_{\bar{\sigma}0,0\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_m), & G_{\bar{\sigma}0,\bar{\sigma}0}(\mathbf{k}, i\omega_m) \end{bmatrix}, \quad (9)$$

посредством вписанного в круг $\hat{\Sigma}$ обозначен матричный массовый оператор

$$\hat{\Sigma}_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_m) = \begin{bmatrix} \Sigma_{0\sigma,0\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_m), & \Sigma_{0\sigma,\bar{\sigma}0}(\mathbf{k}, i\omega_m) \\ \Sigma_{\bar{\sigma}0,0\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_m), & \Sigma_{\bar{\sigma}0,\bar{\sigma}0}(\mathbf{k}, i\omega_m) \end{bmatrix}. \quad (10)$$

Двум тонким линиям ставится в соответствие коллективная функция Грина $\hat{G}_\sigma^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_m)$, определяемая графическим уравнением

$$\text{---} = \text{---} + \text{---} \circ \hat{P} \text{---} \text{---}. \quad (11)$$

Тонкая линия соответствует затравочной матричной функции Грина в атомном представлении

$$\hat{G}_0(i\omega_m) = \begin{bmatrix} 1/(i\omega_m - \varepsilon + \mu), & 0 \\ 0, & 1/(i\omega_m + \varepsilon - \mu) \end{bmatrix}, \quad (12)$$

полукругу с \hat{P} — введенный выше силовой оператор, а волнистой линии — оператор взаимодействия

$$\hat{V}_\sigma(\mathbf{k}) = \begin{bmatrix} V_{0\sigma,0\sigma}(\mathbf{k}), & V_{0\sigma,\bar{\sigma}0}(\mathbf{k}) \\ V_{\bar{\sigma}0,0\sigma}(\mathbf{k}), & V_{\bar{\sigma}0,\bar{\sigma}0}(\mathbf{k}) \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} t_{\mathbf{k}}, & 0 \\ 0, & -t_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}. \quad (13)$$

В аналитической записи уравнения (8) и (11) имеют вид

$$\begin{aligned} \hat{G}_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_m) &= \hat{G}_\sigma^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_m) + \hat{G}_\sigma^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_m) \hat{\Sigma}_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_m) \hat{G}_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_m), \\ \hat{G}_\sigma^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_m) &= \hat{G}_0(i\omega_m) + \hat{G}_0(i\omega_m) \hat{P}_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_m) \hat{V}_\sigma(\mathbf{k}) \hat{G}_\sigma^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_m). \end{aligned} \quad (14)$$

Отсюда находим, что

$$\hat{G}_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_m) = \left\{ \hat{G}_0^{-1}(i\omega_m) - \hat{P}_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_m) \hat{V}_\sigma(\mathbf{k}) - \hat{\Sigma}_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_m) \right\}^{-1}. \quad (15)$$

Учитывая, что в сверхпроводящей фазе отличны от нуля аномальные компоненты как массового $\Sigma_{0\sigma,\bar{\sigma}0}$, так и силового $P_{0\sigma,\bar{\sigma}0}$ операторов, из уравнения (15) получаем выражения для используемых в дальнейшем компонент функции Грина $\hat{G}_\sigma(k, i\omega_m)$:

$$\begin{aligned} G_{0\sigma,0\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_m) &= \frac{i\omega_m + \varepsilon - \mu + t_{\mathbf{k}} P_{\bar{\sigma}0,\bar{\sigma}0}(\mathbf{k}, i\omega_m) - \Sigma_{\bar{\sigma}0,\bar{\sigma}0}(\mathbf{k}, i\omega_m)}{\det(\mathbf{k}, i\omega_m)}, \\ G_{0\sigma,\bar{\sigma}0}(\mathbf{k}, i\omega_m) &= \frac{\Sigma_{0\sigma,\bar{\sigma}0}(\mathbf{k}, i\omega_m) - t_{\mathbf{k}} P_{0\sigma,\bar{\sigma}0}(\mathbf{k}, i\omega_m)}{\det(\mathbf{k}, i\omega_m)}, \end{aligned} \quad (16)$$

где

$$\begin{aligned} \det(\mathbf{k}, i\omega_m) &= \{i\omega_m + \varepsilon - \mu + t_{\mathbf{k}} P_{\bar{\sigma}0,\bar{\sigma}0}(\mathbf{k}, i\omega_m) - \Sigma_{\bar{\sigma}0,\bar{\sigma}0}(\mathbf{k}, i\omega_m)\} \times \\ &\times \{i\omega_m - \varepsilon + \mu - t_{\mathbf{k}} P_{0\sigma,0\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_m) - \Sigma_{0\sigma,0\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_m)\} - \\ &- \{\Sigma_{0\sigma,\bar{\sigma}0}(\mathbf{k}, i\omega_m) - t_{\mathbf{k}} P_{0\sigma,\bar{\sigma}0}(\mathbf{k}, i\omega_m)\} \times \\ &\times \{\Sigma_{\bar{\sigma}0,0\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_m) + t_{\mathbf{k}} P_{\bar{\sigma}0,0\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_m)\}. \end{aligned} \quad (17)$$

Из представленных выражений следует, что аномальные компоненты $P_{0\sigma,\bar{\sigma}0}(\mathbf{k}, i\omega_m)$ силового оператора имеют существенное значение при вычислении

аномальных термодинамических средних. Действительно, принимая во внимание (6), получаем, что

$$D_{0\sigma, \bar{\sigma}0}(\mathbf{k}, i\omega_m) = G_{0\sigma, 0\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_m)P_{0\sigma, \bar{\sigma}0}(\mathbf{k}, i\omega_m) + G_{0\sigma, \bar{\sigma}0}(\mathbf{k}, i\omega_m)P_{\bar{\sigma}0, \bar{\sigma}0}(\mathbf{k}, i\omega_m). \quad (18)$$

Следовательно, выражение для аномального одновременного одноузельного среднего определяется двумя слагаемыми:

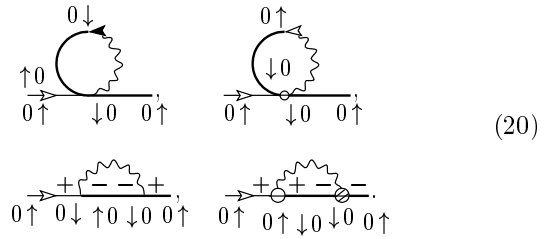
$$\begin{aligned} \langle X_f^{0\bar{\sigma}} X_f^{0\sigma} \rangle &= \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}, \omega_m} \exp(i\omega_m \delta) \times \\ &\times \left\{ \frac{\Sigma_{0\sigma, \bar{\sigma}0}(\mathbf{k}, i\omega_m) P_{\bar{\sigma}0, \bar{\sigma}0}(\mathbf{k}, i\omega_m)}{\det(\mathbf{k}, i\omega_m)} + \right. \\ &\left. + \frac{[i\omega_m + \varepsilon - \mu - \Sigma_{\bar{\sigma}0, \bar{\sigma}0}(\mathbf{k}, i\omega_m)] P_{0\sigma, \bar{\sigma}0}(\mathbf{k}, i\omega_m)}{\det(\mathbf{k}, i\omega_m)} \right\} = \\ &= 0, \quad \delta \rightarrow +0. \quad (19) \end{aligned}$$

Видно, что рассматриваемое аномальное среднее в сильно коррелированных системах не является величиной, пропорциональной только аномальной компоненте массового оператора. Из-за наличия аномальной компоненты силового оператора возникает дополнительный вклад (второе слагаемое в фигурной скобке). Это означает, что условие обращения в нуль рассмотренного аномального среднего (из-за алгебры операторов Хаббарда) обретает характер дополнительной связи между нормальными и аномальными компонентами массового и силового операторов.

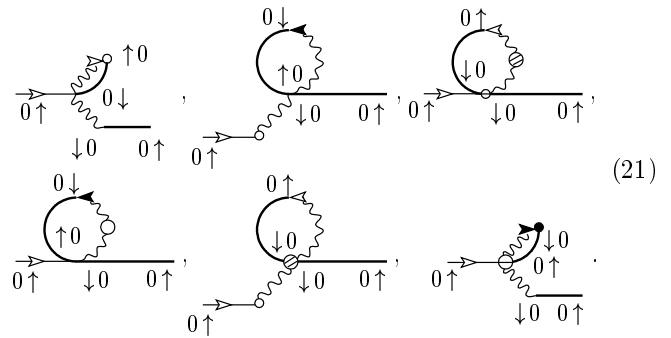
Проведенный анализ показывает, что описание сверхпроводящей фазы хаббардовских фермионов в общем случае должно основываться не на одном уравнении, определяющем аномальный массовый оператор, а на системе уравнений, определяющих одновременно аномальные компоненты как массового, так и силового операторов.

3. АНОМАЛЬНЫЕ КОМПОНЕНТЫ МАССОВОГО И СИЛОВОГО ОПЕРАТОРОВ В ОДНОПЕТЛЕВОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

Для получения явных уравнений, описывающих сверхпроводящую фазу, проведем вычисление аномальных величин в однопетлевом приближении. В этом случае аномальная компонента $\Sigma_{0\uparrow, \downarrow 0}(\mathbf{k}, i\omega_m)$ массового оператора определяется десятью графиками. Четыре диаграммы



происходят от взаимодействий, соответствующих t - J -модели [10], а шесть графиков



отражают вклады от трехцентровых взаимодействий. В диаграммах (20) волнистой линии со стрелкой ставится в соответствие интеграл перескока в импульсном представлении $t_{\mathbf{q}}$. Конец такой линии со светлой (темной) стрелкой формирует фрагмент диаграммы, индуцируемый оператором $X_f^{0\uparrow}$ ($X_f^{0\downarrow}$). Волнистым линиям без стрелок соответствуют обменные интегралы $J_{\mathbf{q}}$. При этом продольное взаимодействие $J_{fm} X_f^{++} X_m^{--}$ изображается посредством волнистой линии с двумя большими кружками, причем концу со светлым кружком соответствует фрагмент диаграммы, в котором при спаривании участвовал оператор X_f^{++} . Заштрихованному кружку в отмеченном смысле соответствует оператор X_f^{--} . Поперечному же взаимодействию $J_{fm} X_f^{+-} X_m^{-+}$ ставится в соответствие волнистая линия, на концах которой указывается последовательность из двух противоположных значений проекции спинового момента. Эта последовательность однозначно указывает на тот из двух операторов, участвующих в описании поперечного взаимодействия, спаривание с которым индуцировало данный фрагмент диаграммы. В диаграммах (21) матричному элементу трехцентрового взаимодействия в импульсном представлении соответствуют две волнистые линии, соединенные либо через светлый (или заштрихованный) кружок, либо непосредственно без кружка под острым углом. То

пологическая структура присоединения концов таких линий к фрагментам диаграмм такая же, как и у линий взаимодействия, соответствующих процессам перескока. При этом наличие кружка указывает на то, что в процессе использования теоремы Вика в спариваниях принимал участие диагональный оператор, а в случае соединения под углом участвовал недиагональный квазибозевский оператор $X_f^{\sigma\bar{\sigma}}$.

Ставя в соответствие графикам (20) и (21) аналитические выражения, находим составляющие аномальной компоненты массового оператора

$$\begin{aligned} \Sigma_{0\uparrow,\downarrow 0}^{(t-J)}(\mathbf{k}) &= \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}, \omega_l} (t_{\mathbf{q}} + J_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}) \delta F(q), \\ \Sigma_{0\uparrow,\downarrow 0}^{(3)}(\mathbf{k}) &= \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}, \omega_l} A_{\mathbf{k}}^{(3)}(\mathbf{q}) \delta F(q), \end{aligned} \quad (22)$$

где

$$\begin{aligned} A_{\mathbf{k}}^{(3)}(\mathbf{q}) &= \left(1 - \frac{n}{2}\right) \frac{2t_{\mathbf{k}}t_{\mathbf{q}}}{U} - \\ &- \left(1 - \frac{n}{2}\right) J_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \frac{n}{2} \left(\frac{2t_{\mathbf{q}}^2}{U} - J_0\right). \end{aligned} \quad (23)$$

Посредством δF в формуле (22) обозначена разность аномальных функций Грина:

$$\begin{aligned} \delta F(q) &= F_{\downarrow}(q) - F_{\uparrow}(q), \quad F_{\sigma}(q) = G_{0\sigma, \bar{\sigma} 0}(q), \\ q &\equiv (\mathbf{q}, i\omega_l), \quad \omega_l = (2l + 1)\pi T. \end{aligned} \quad (24)$$

Складывая составляющие, находим аномальную компоненту массового оператора:

$$\begin{aligned} \Sigma_{12}(\mathbf{k}) &\equiv \Sigma_{0\uparrow,\downarrow 0}(\mathbf{k}) = \Sigma_{0\uparrow,\downarrow 0}^{(t-J)}(\mathbf{k}) + \Sigma_{0\uparrow,\downarrow 0}^{(3)}(\mathbf{k}) = \\ &= \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}, \omega_m} A_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}) \delta F(q), \end{aligned} \quad (25)$$

где

$$\begin{aligned} A_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}) &= t_{\mathbf{q}} + \frac{n}{2} J_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + \\ &+ \left(1 - \frac{n}{2}\right) \frac{2t_{\mathbf{k}}t_{\mathbf{q}}}{U} - \frac{n}{2} \left(\frac{2t_{\mathbf{q}}^2}{U} - J_0\right). \end{aligned} \quad (26)$$

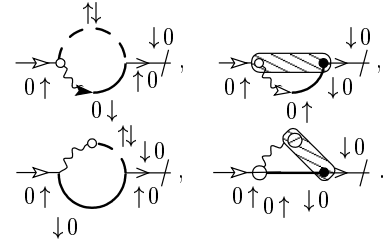
Видно, что в коэффициенте перед $J_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}$ возникла ренормировка: $1 \rightarrow 1 - (1 - n/2) = n/2$, полученная ранее методом неприводимых функций Грина в работе [5]. В работе [22] было показано, что эта ренормировка лежит в основе понижения в десятки раз критической температуры сверхпроводящей фазы с $d_{x^2-y^2}$ -симметрией параметра порядка.

Проводя вычисления, аналогичные предыдущим (с очевидной заменой стрелок и знаков, обозначающих проекции спиновых моментов на противоположные, а также линий со светлыми стрелками на

линии с темными стрелками), получаем используемое в дальнейшем соотношение

$$\Sigma_{0\uparrow,\downarrow 0}(\mathbf{k}) = -\Sigma_{0\downarrow,\uparrow 0}(\mathbf{k}). \quad (27)$$

Перейдем к вычислению аномальной компоненты силового оператора $P_{0\uparrow,\downarrow 0}(k)$. В рассматриваемом приближении взаимодействия t - J -модели для этой компоненты дают вклады, определяемые четырьмя графиками:



$$(28)$$

После сопоставления аналитических выражений получаем

$$\begin{aligned} P_{0\uparrow,\downarrow 0}^{(t-J)}(k) &= -\frac{T}{N} \sum_q (t_{\mathbf{q}} + J_{\mathbf{q}-\mathbf{k}}) \Lambda_{\uparrow}^{(a)}(q; q-k), \\ k &\equiv (\mathbf{k}, i\omega_m), \quad q \equiv (\mathbf{q}, i\omega_l), \end{aligned} \quad (29)$$

где $\Lambda_{\uparrow}^{(a)}(q; q-k)$ определяется посредством комбинации аномальных функций Грина с фурье-образами функций Грина поперечных ($D_{\perp}(q-k)$) и продольных ($D_{\parallel}(q-k)$) спиновых компонент, а также функцией Грина, описывающей зарядовые флуктуации ($C(q-k)$):

$$\begin{aligned} \Lambda_{\sigma}^{(a)}(q; q-k) &= F_{\bar{\sigma}}(q) D_{\perp}(q-k) - \\ &- F_{\sigma}(q) \left[D_{\parallel}(q-k) - \frac{1}{4} C(q-k) \right] \end{aligned} \quad (30)$$

при $\sigma = \uparrow$. Фурье-представление бозевских функций Грина определено обычным образом:

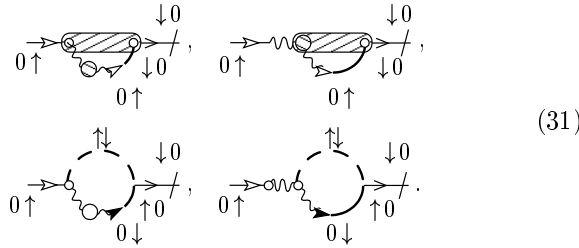
$$\begin{aligned} &- \langle T_{\tau} \tilde{X}_f^{\uparrow\downarrow}(\tau) \tilde{X}_g^{\downarrow\uparrow}(\tau') \rangle = \frac{T}{N} \times \\ &\times \sum_{\mathbf{q}, \omega_s} \exp\{i[\mathbf{q}(\mathbf{R}_f - \mathbf{R}_g) - \omega_s(\tau - \tau')]\} D_{\perp}(\mathbf{q}, i\omega_s), \\ &\omega_s = 2\pi s T, \\ &- \langle T_{\tau} \tilde{S}_f^z(\tau) \tilde{S}_g^z(\tau') \rangle = \frac{T}{N} \times \\ &\times \sum_{\mathbf{q}, \omega_s} \exp\{i[\mathbf{q}(\mathbf{R}_f - \mathbf{R}_g) - \omega_s(\tau - \tau')]\} D_{\parallel}(\mathbf{q}, i\omega_s), \\ &\omega_s = 2\pi s T, \end{aligned}$$

$$-\langle T_\tau \Delta \tilde{N}_f(\tau) \Delta \tilde{N}_g(\tau') \rangle = \frac{T}{N} \times \sum_{\mathbf{q}, \omega_s} \exp \{i [\mathbf{q}(\mathbf{R}_f - \mathbf{R}_g) - \omega_s(\tau - \tau')]\} C(\mathbf{q}, i\omega_s),$$

$$\omega_s = 2\pi sT.$$

В последнем выражении $\Delta \tilde{N}_f(\tau) = \tilde{N}_f(\tau) - \langle N_f \rangle$, $\tilde{N}_f(\tau) = \tilde{X}_f^{\uparrow\uparrow}(\tau) + \tilde{X}_f^{\downarrow\downarrow}(\tau)$, τ — мацубаровское время.

Приведенная ниже четверка графиков задает аномальную компоненту силового оператора $P_{0\uparrow,\downarrow}^{(3)}(k)$, обусловленную трехцентровыми взаимодействиями:



Их суммарный аналитический вклад определяется выражением

$$P_{0\uparrow,\downarrow}^{(3)}(k) = -\frac{T}{2N} \sum_q A_{\mathbf{k}}^{(3)}(\mathbf{q}) \Lambda_{\uparrow}^{(a)}(q; q-k), \quad (32)$$

$$k \equiv (\mathbf{k}, i\omega_m), \quad q \equiv (\mathbf{q}, i\omega_l).$$

Объединяя формулы (29) и (32), получим полный вид аномальной компоненты силового оператора:

$$P_{0\uparrow,\downarrow}(k) = -\frac{T}{N} \sum_q B_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}) \Lambda_{\uparrow}^{(a)}(q; q-k), \quad (33)$$

$$k \equiv (\mathbf{k}, i\omega_m), \quad q \equiv (\mathbf{q}, i\omega_l),$$

где

$$B_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}) = t_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \left(1 + \frac{n}{2}\right) J_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + \left(1 - \frac{n}{2}\right) \frac{t_{\mathbf{k}} t_{\mathbf{q}}}{U} - \frac{n}{2} \left(\frac{t_{\mathbf{q}}^2}{U} - \frac{J_0}{2} \right). \quad (34)$$

Видно, что ядро $B_{\mathbf{k}}(\mathbf{q})$ силового оператора также содержит ренормированный трехцентровыми взаимодействиями коэффициент, стоящий перед $J_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}$, однако в отличие от ренормировки для $\Sigma_{0\uparrow,\downarrow}(\mathbf{k})$, ренормировка для $P_{0\uparrow,\downarrow}(\mathbf{k}, i\omega_m)$ иная:

$$1 \rightarrow 1 - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{n}{2}\right) = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{n}{2}\right). \quad (35)$$

Это означает, что при учете вкладов от силового оператора описание сверхпроводящей фазы с

$d_{x^2-y^2}$ -симметрией параметра порядка в t - J^* -модели не может быть сведено к описанию на основе уравнений для t - J -модели, но с ренормированным $J \rightarrow \tilde{J} = (n/2)J$.

Вторая особенность обусловлена зависимостью $P_{0\uparrow,\downarrow}(\mathbf{k}, i\omega_m)$ от мацубаровской частоты (аномальная компонента массового оператора $\Sigma_{0\uparrow,\downarrow}(\mathbf{k})$ зависит только от квазиимпульса). В результате сверхпроводящая фаза в рассматриваемом приближении описывается бесконечной системой интегральных уравнений самосогласования.

4. СИСТЕМА УРАВНЕНИЙ САМОСОГЛАСОВАНИЯ ДЛЯ СВЕРХПРОВОДЯЩЕЙ ФАЗЫ

Вывод уравнений самосогласования упрощается, если использовать симметричную комбинацию аномальных компонент силового оператора:

$$P(k) = P_{0\uparrow,\downarrow}(k) - P_{0\downarrow,\uparrow}(k), \quad k \equiv (\mathbf{k}, i\omega_m).$$

Аналитическое выражение для $P_{0\downarrow,\uparrow}(k)$ можно получить из уравнения (33), если заменить $\Lambda_{\uparrow}^{(a)}(q; q-k)$ на $\Lambda_{\downarrow}^{(a)}(q; q-k)$. В справедливости этого легко убедиться, если воспользоваться графическим представлением. Преимущество использования $P(k)$ связано с тем, что $P(k)$ так же, как и $\Sigma_{0\uparrow,\downarrow}(\mathbf{k})$, выражается через введенную выше разность аномальных функций Грина $\delta F(q)$. При этом формируется симметричная комбинация из поперечных и продольных спиновых функций Грина [24, 25]:

$$P(k) = -\frac{T}{N} \sum_q B_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}) \left[D_{\perp}(q-k) + D_{\parallel}(q-k) - \frac{1}{4} C(q-k) \right] \delta F(q), \quad q \equiv (\mathbf{q}, i\omega_l). \quad (36)$$

Используя найденные выражения для аномальных компонент массового и силового операторов, представления (16), а также соотношение (27), получим систему уравнений самосогласования относи-

тельно $\Sigma_{12}(\mathbf{k})$ и $P(\mathbf{k}, i\omega_m)$:

$$\begin{aligned} \Sigma_{12}(\mathbf{k}) &= \\ &= -\frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}, \omega_l} A_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}) \frac{2\Sigma_{12}(\mathbf{q}) - t_{\mathbf{q}}P(\mathbf{q}, i\omega_l)}{\det(\mathbf{q}, i\omega_l)}, \\ P(\mathbf{k}, i\omega_m) &= \\ &= -\frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}, \omega_l} B_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}) \chi_C^-(\mathbf{q} - \mathbf{k}, i\omega_l - i\omega_m) \times \\ &\quad \times \frac{2\Sigma_{12}(\mathbf{q}) - t_{\mathbf{q}}P(\mathbf{q}, i\omega_l)}{\det(\mathbf{q}, i\omega_l)}. \end{aligned} \quad (37)$$

При введении спин-зарядовой восприимчивости

$$\chi_C^-(\mathbf{q}, i\omega_s) = - \left[3D_{\parallel}(\mathbf{q}, i\omega_s) - \frac{1}{4}C(\mathbf{q}, i\omega_s) \right] \quad (38)$$

учтена сферическая симметрия спиновых корреляционных функций [24, 25].

Если в первом уравнении системы положить $P(\mathbf{q}, i\omega_l) = 0$ и пренебречь зависящими от мацубаровских частот вкладками в нормальные компоненты силового оператора, то можно провести суммирование по ω_l . При этом получается хорошо известное уравнение, определяющее в приближении среднего поля решения для $\Sigma_{12}(\mathbf{k})$ в сверхпроводящей фазе как для s -, так и для d -типа симметрии сверхпроводящего параметра порядка. В действительности, как видно из второго уравнения системы (37), этот случай реализуется лишь при $\chi_C^- \rightarrow 0$. Для конечных χ_C^- самосогласованное решение системы имеет место лишь при $P(\mathbf{q}, i\omega_l) \neq 0$, а сверхпроводящая фаза описывается посредством бесконечного числа интегральных уравнений, определяющих $\Sigma_{12}(\mathbf{k})$ и $P(\mathbf{k}, i\omega_m)$. Если динамическую восприимчивость χ_C^- заменить на статическую, то для s -фазы при $U = \infty$ вытекающее из системы (37) уравнение для T_c получается точно таким же, как и в работах [26, 27]. Заметим, что в отмеченных работах уравнение для T_c находилось из анализа в куперовском канале амплитуды рассеяния, вычисленной в парамагнитной фазе при учете процессов рассеяния на спиновых флуктуациях. Это означает, что в однопетлевом приближении учет аномальных компонент силового оператора соответствует принятию во внимание процессов спин-флуктуационного рассеяния. Для симметрии параметра порядка d -типа справедливость этого утверждения можно продемонстрировать, если ввести приводимый по Ларкину (неприводимый по Дайсону массовый оператор является приводимым по Ларкину [20]) аномальный дайсоновский массовый оператор

$$\Delta(\mathbf{k}, i\omega_m) = \Sigma_{12}(\mathbf{k}) - \frac{1}{2}t_{\mathbf{k}}P(\mathbf{k}, i\omega_m). \quad (39)$$

Тогда система уравнений самосогласования для $\Delta(\mathbf{k}, i\omega_m)$ записывается в следующем виде:

$$\begin{aligned} \Delta(\mathbf{k}, i\omega_m) &= -\frac{T}{N} \times \\ &\times \sum_{\mathbf{q}, \omega_l} \{ 2A_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}) - t_{\mathbf{k}}B_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}) \chi_C^-(\mathbf{q} - \mathbf{k}, i\omega_l - i\omega_m) \} \times \\ &\quad \times \frac{\Delta(\mathbf{q}, i\omega_l)}{\det(\mathbf{q}, i\omega_l)}. \end{aligned} \quad (40)$$

Первое слагаемое ядра этого интегрального уравнения соответствует приближению среднего поля. Второе слагаемое определяет спин-флуктуационный механизм куперовского спаривания. Ранее подобное представление для уравнения для сверхпроводящего параметра порядка было выведено в работе [28] методом диаграммной техники Хаббарда. В рамках метода неприводимых функций Грина для t - J -модели описание сверхпроводящей фазы при учете спин-флуктуационного механизма спаривания было реализовано в работе [24]. При этом также было показано, что влияние спиновых флуктуаций математически отражается посредством появления в интегральном ядре уравнения для параметра порядка слагаемого, содержащего динамическую восприимчивость [24, 25]. В этой связи следует отметить цикл работ, основанных на феноменологическом подходе к спин-флуктуационному механизму сверхпроводящего спаривания в спин-фермионных моделях (см., например, работы [29, 30] и ссылки в них). В этих работах при описании сверхпроводящей фазы в ядро интегрального уравнения феноменологически вводится только одно слагаемое, пропорциональное динамической восприимчивости. При этом мультипликативные коэффициенты, которые, вообще говоря, появляются в теории и связаны со спецификой модели, при таком подходе теряются.

В нашем случае уравнение (40) выведено на основе микроскопического подхода для t - J^* -модели, учитывающей трехцентровые взаимодействия. Существенно, что эти взаимодействия, например, для симметрии d -типа перенормируют слагаемое, соответствующее приближению среднего поля [5], по одному сценарию, а мультипликативный фактор, стоящий перед восприимчивостью, — по другому.

Ниже мы ограничимся рассмотрением сверхпроводящей фазы с $d_{x^2-y^2}$ -симметрией параметра порядка.

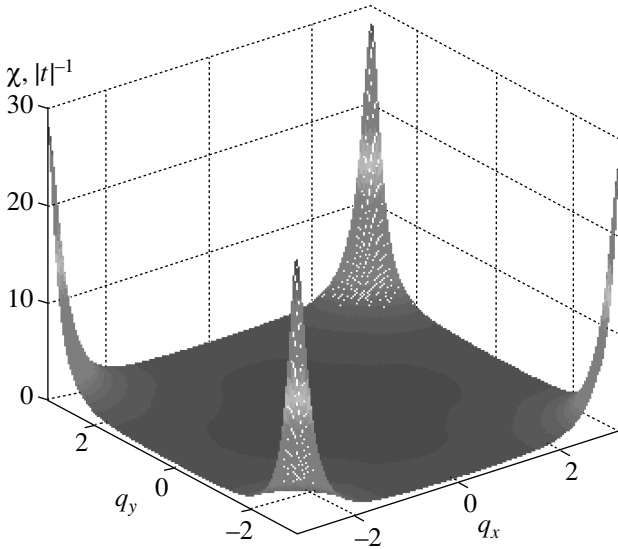


Рис. 1. Зависимость поперечной компоненты восприимчивости в GRPA-приближении от квазиимпульса

5. АЛГОРИТМ ВЫЧИСЛЕНИЯ КРИТИЧЕСКОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ

Для решения уравнений самосогласования необходимо найти функцию $\chi_C^-(\mathbf{q}, i\omega_m)$. Следуя работе [24], воспользуемся модельным подходом, при котором спин-зарядовая восприимчивость $\chi_C^-(\mathbf{q}, i\omega_m)$ представляется в виде произведения

$$\chi_{mod}(\mathbf{q}, i\omega_m) = \chi_s(\mathbf{q}) \chi(i\omega_m), \quad (41)$$

причем, как и в работе [24], считается, что зарядовыми флуктуациями можно пренебречь. Вид модельных функций найдем из сопоставления с восприимчивостью, полученной в обобщенном приближении хаотических фаз [10]:

$$\chi_{GRPA}(\mathbf{k}, i\omega_l) = -\Pi(\mathbf{k}, i\omega_l) \times \{ [1 - \Lambda(\mathbf{k}, i\omega_l)] [1 - Q(\mathbf{k}, i\omega_l)] - \Pi(\mathbf{k}, i\omega_l) \times [\Phi(\mathbf{k}, i\omega_l) + J(\mathbf{k})] \}^{-1} \quad (42)$$

при учете дальних перескоков (обозначения см. в работе [10]). Рассчитанная по этой формуле зависимость восприимчивости от волнового вектора при значениях параметров модели $t' = 0.2|t|$, $t'' = 0.3|t|$, $J = 0.4|t|$, $n = 0.75$, $T = 0.03|t|$, $\omega_m = 2\pi T$ показана на рис. 1. Видно, что в окрестности точки $\mathbf{q} = \mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ имеет место ярко выраженный пик, соответствующий экспериментальным данным. Имея это в виду, в дальнейшем квазиимпульсную

зависимость будем аппроксимировать посредством δ -функции:

$$\chi_s(\mathbf{q}) = 4\pi^2 \delta(q - Q). \quad (43)$$

При таком подходе зависимость от мацубаровской частоты хорошо описывается функцией, использованной в работе [24]. В результате для восприимчивости получаем следующее представление:

$$\chi_{mod}(\mathbf{q}, i\omega_m) = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2 \delta(q - Q) \frac{3n}{2\Omega} \times \text{th}\left(\frac{\Omega}{2T}\right) \frac{1}{1 - (i\omega_m/\Omega)^2}. \quad (44)$$

Записанная в такой форме мацубаровская восприимчивость удовлетворяет правилу сумм

$$T \sum_{\mathbf{q}, i\omega_m} \chi_{mod}(\mathbf{q}, i\omega_m) = \frac{3n}{4}. \quad (45)$$

Выбор параметра Ω осуществлялся из условия наилучшего совпадения «мощности» пика в окрестности $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$ на разных мацубаровских частотах, т. е. из уравнения

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \chi_{GRPA}(\mathbf{k}, i\omega_l) = n\Omega \text{th}\left(\frac{\Omega}{2T}\right) \frac{1}{1 - (i\omega_m/\Omega)^2} = \chi(i\omega_l). \quad (46)$$

В результате вычислений установлено, что наилучшее согласие достигается при $\Omega = 2|t|$.

Решение системы (37) проведем при учете перескоков электронов между узлами, находящимися в пределах трех координационных сфер. Тогда фурье-образы $t_{\mathbf{q}}$ и $J_{\mathbf{q}}$ записываются в виде ($t_1 \equiv t$; $t_2 \equiv t'$; $t_3 \equiv t''$)

$$t_{\mathbf{q}} = \sum_{n=1}^3 4t_n \gamma_n(\mathbf{q}), \quad J_{\mathbf{q}} = \sum_{n=1}^3 4J_n \gamma_n(\mathbf{q}), \quad (47)$$

где $\gamma_n(\mathbf{q})$ — инварианты для квадратной решетки,

$$\gamma_1(\mathbf{q}) = \frac{1}{2} (\cos q_x + \cos q_y), \quad \gamma_2(\mathbf{q}) = \cos q_x \cos q_y, \\ \gamma_3(\mathbf{q}) = \frac{1}{2} (\cos 2q_x + \cos 2q_y).$$

Для симметрии параметра порядка $d_{x^2-y^2}$ -типа вклады дают только J_1 и J_3 . Учитывая, что $J_3 = 2t_3^2/U$ и J_3 мало по сравнению с J_1 , при решении уравнений самосогласования можно ограничиться вкладами только от главного инварианта:

$$\Sigma_{12}(\mathbf{k}) = \Delta (\cos k_x - \cos k_y), \quad (48) \\ P(\mathbf{k}, i\omega_l) = P(i\omega_l) (\cos k_x - \cos k_y).$$

При этом система уравнений самосогласования сводится к уравнениям для амплитуд Δ и $P(i\omega_l)$:

$$\begin{aligned} & \left[1 + nJ_1 T \sum_{\omega_l} a_{11}^{(0)}(i\omega_l) \right] \Delta = \\ & = \frac{nJ_1}{2} T \sum_{\omega_l} a_{11}^{(1)}(i\omega_l) P(i\omega_l), \\ & P(i\omega_m) + 8\tilde{J}_1 T \sum_{\omega_l} \chi(i\omega_l - i\omega_m) a_{11}^{(0)}(i\omega_l) \Delta = \\ & = 4\tilde{J}_1 T \sum_{\omega_l} \chi(i\omega_l - i\omega_m) a_{11}^{(1)}(i\omega_l) P(i\omega_l), \end{aligned} \quad (49)$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{J}_1 &= \frac{1+n/2}{2} J_1, \quad a_{11}^{(r)}(i\omega_m) = \frac{1}{N} \times \\ & \times \sum_{\mathbf{q}} \frac{(\cos q_x - \cos q_y)^2}{\det(\mathbf{q}, i\omega_m)} (t_{\mathbf{q}})^r, \quad r = 0, 1. \end{aligned} \quad (50)$$

В точке $T = T_c$ параметры Δ и $P(i\omega_l)$ обращаются в нуль, однако их отношение остается конечным. Вводя функцию $\varphi(i\omega_l) = P(i\omega_l)/\Delta$ и полагая $T = T_c$, приходим к системе неоднородных уравнений:

$$\begin{aligned} \varphi(i\omega_m^c) - 4\tilde{J}_1 T \sum_{\omega_l^c} \chi(i\omega_l^c - i\omega_m^c) a_{11}^{(1)}(i\omega_l^c) \varphi(i\omega_l^c) = \\ = -8\tilde{J}_1 T_c \sum_{\omega_l} \chi(i\omega_l^c - i\omega_m^c) a_{11}^{(0)}(i\omega_l), \end{aligned} \quad (51)$$

используемых для нахождения $\varphi(i\omega_m)$. Индекс «с» у мацубаровских частот означает, что входящая в их определение температура равна критической.

Замыкающее уравнение может быть представлено в виде правила сумм, непосредственно следующей из системы (49):

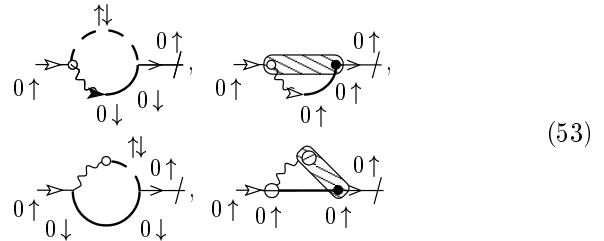
$$T_c \sum_{\omega_m^c} \varphi(i\omega_m^c) = 3 \left(1 + \frac{n}{2} \right). \quad (52)$$

Уравнения (51) и (52) использовались при численных расчетах для нахождения концентрационной зависимости критической температуры.

6. НОРМАЛЬНЫЕ КОМПОНЕНТЫ МАССОВОГО И СИЛОВОГО ОПЕРАТОРОВ. КРИТИЧЕСКАЯ ТЕМПЕРАТУРА

Влияние нормальных компонент массового $\Sigma_{11}(k) \equiv \Sigma_{0\uparrow,0\uparrow}(k) = \Sigma_{0\downarrow,0\downarrow}(k)$ и силового $P_{11} \equiv P_{0\uparrow,0\uparrow} = P_{0\downarrow,0\downarrow}(k)$, ($k \equiv (\mathbf{k}, i\omega_m)$) операторов на условия реализации сверхпроводящей фазы

проведем в том же однопетлевом приближении. Выделяя добавку, соответствующую приближению Хаббард I в явном виде, $P_{11} = 1 - n/2 + \delta P_{11}(k)$, получим, что поправка $\delta P_{11}^{(tJ)}(k)$, обусловленная взаимодействиями t - J -модели, определяется четырьмя графиками:



и аналитически, при учете независимости нормальных функций Грина (магнитное поле отсутствует) от значения проекции спинового момента, записывается в виде

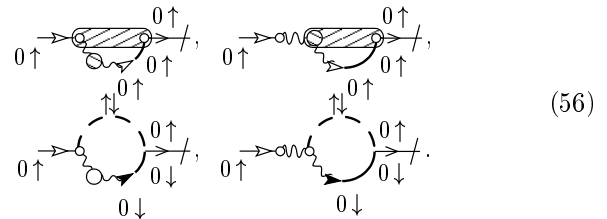
$$\begin{aligned} \delta P_{11}^{(tJ)}(k) &= \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}} (t_{\mathbf{q}} + J_{\mathbf{q}-\mathbf{k}}) G(\mathbf{q}) \chi_C^+(\mathbf{q}), \\ k &\equiv (\mathbf{k}, i\omega_m), \quad \mathbf{q} \equiv (\mathbf{q}, i\omega_l), \end{aligned} \quad (54)$$

где

$$\begin{aligned} \chi_C^+(\mathbf{q}, i\omega_s) &= - \left[3D_{\parallel}(\mathbf{q}, i\omega_s) + \frac{1}{4} C(\mathbf{q}, i\omega_s) \right], \\ \omega_s &= 2\pi s T. \end{aligned} \quad (55)$$

Здесь, так же как и ранее, учтена сферическая симметрия спиновых корреляционных функций. Посредством $G(\mathbf{q})$ обозначена нормальная компонента функции Грина $G_{0\sigma,0\sigma}(\mathbf{q})$, у которой опущены спиновые индексы.

Вклад в нормальную компоненту силового оператора, связанный с наличием трехцентровых взаимодействий, определяется четырьмя графиками:



В аналитическом виде этот вклад записывается следующим образом:

$$\begin{aligned} \delta P_{11}^{(3)}(k) &= \frac{T}{2N} \sum_{\mathbf{q}} A_{\mathbf{k}}^{(3)}(\mathbf{q}) G(\mathbf{q}) \chi_C^+(\mathbf{q} - \mathbf{k}), \\ k &\equiv (\mathbf{k}, i\omega_m), \quad \mathbf{q} \equiv (\mathbf{q}, i\omega_l). \end{aligned} \quad (57)$$

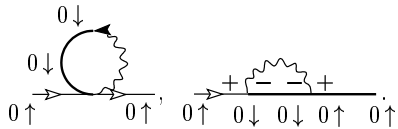
Суммируя (54) и (57), получаем аналитическое выражение для полной поправки:

$$\delta P_{11}(k) = \frac{T}{N} \sum_q B_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}) G(q) \chi_C^+(q-k), \quad (58)$$

$$k \equiv (\mathbf{k}, i\omega_m), \quad q \equiv (\mathbf{q}, i\omega_l).$$

Как и в случае аномальной компоненты, трехцентровые взаимодействия перенормируют коэффициент перед $J_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}$, стоящий в $B_{\mathbf{k}}(\mathbf{q})$ по правилу (35). Нормальная компонента силового оператора в рассматриваемом приближении является комплексной величиной. Для ее явного нахождения необходимо воспользоваться полученным представлением для функций Грина (16). При этом возникает система интегральных уравнений, решение которой проводилось численным методом. Поскольку в представлении (16) входят также и нормальные компоненты массового оператора, остановимся кратко на их вычислении.

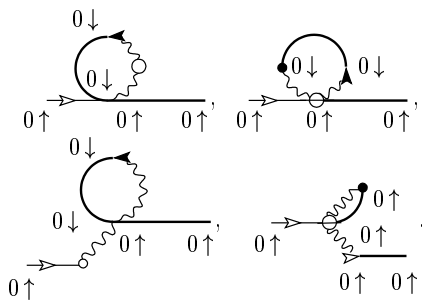
Вклад в нормальную компоненту массового оператора Σ_{11} за счет взаимодействий t - J -модели определяется двумя графиками:


(59)

Соответствующее аналитическое выражение имеет вид

$$\Sigma_{11}^{(t,J)}(\mathbf{k}) = -\frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}, \omega_l} (t_{\mathbf{q}} + J_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}) G(\mathbf{q}, i\omega_m) \times \exp(i\omega_l \delta), \quad \delta \rightarrow +0. \quad (60)$$

Влияние трехцентровых взаимодействий на поправку к нормальной компоненте массового оператора задается четырьмя графиками:


(61)

В аналитической записи имеем

$$\Sigma_{11}^{(3)}(\mathbf{k}) = \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}, \omega_l} \left\{ (1-n) \left(\frac{J_0}{2} - \frac{t_{\mathbf{q}}^2}{U} \right) + \left(1 - \frac{n}{2} \right) \left(J_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \frac{2t_{\mathbf{k}} t_{\mathbf{q}}}{U} \right) \right\} \times G(\mathbf{q}, i\omega_l) \exp(i\omega_l \delta). \quad (62)$$

Используя полученные выражения, находим полную нормальную компоненту массового оператора:

$$\Sigma_{11}(\mathbf{k}) = -\frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}, \omega_l} \left\{ t_{\mathbf{q}} + \frac{n}{2} J_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + (2-n) \frac{t_{\mathbf{k}} t_{\mathbf{q}}}{U} + (1-n) \left(\frac{t_{\mathbf{q}}^2}{U} - \frac{J_0}{2} \right) \right\} \times G(\mathbf{q}, i\omega_l) \exp(i\omega_l \delta). \quad (63)$$

Подставляя выражение для модельной восприимчивости (44), получим упрощенную систему уравнений для вычисления нормальных компонент силового и массового операторов (слагаемые, приводящие к ренормировке химического потенциала, опущены):

$$\delta P_{11}(\mathbf{k}, \omega_m) = T \sum_{i\omega_l} (t_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} - 4\tilde{J}_1) \chi(i\omega_l - i\omega_m) \times \left\{ i\omega_l - \varepsilon + \mu - t_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} \times \left[\left(1 - \frac{n}{2} \right) + \delta P_{11}(\mathbf{k} + \mathbf{Q}, \omega_l) \right] + \Sigma_{11}(\mathbf{k}) \right\}^{-1}, \quad (64)$$

$$\Sigma_{11}(\mathbf{k}) = -\gamma_1(\mathbf{k}) \frac{nT}{2N} \sum_{\mathbf{q}, \omega_l} J_{\mathbf{q}} \left\{ i\omega_l - \varepsilon + \mu - t_{\mathbf{q}} \left[\left(1 - \frac{n}{2} \right) + \delta P_{11}(\mathbf{q}, \omega_l) \right] - \Sigma_{11}(\mathbf{q}) \right\}^{-1}.$$

При численном решении этих уравнений использовалось также и уравнение для химического потенциала, записанное с учетом ренормировок, обусловленных вкладами Σ_{11} и P_{11} :

$$\frac{n}{2} = \frac{T}{N} \times \sum_{\mathbf{q}, \omega_m} e^{i\omega_m \delta} \frac{P_{11}(\mathbf{q}, i\omega_m)}{i\omega_m - \varepsilon + \mu - P_{11}(\mathbf{q}, i\omega_m) t_{\mathbf{q}} - \Sigma_{11}(\mathbf{q})}, \quad \delta \rightarrow +0. \quad (65)$$

При суммировании по мадубаровским частотам в этом уравнении использовалась найденная самосогласованным образом зависимость $P_{11}(\mathbf{q}, i\omega_m)$.

На рис. 2, для примера, представлены результаты численных расчетов для мнимой и вещественной частей нормальной компоненты силового оператора

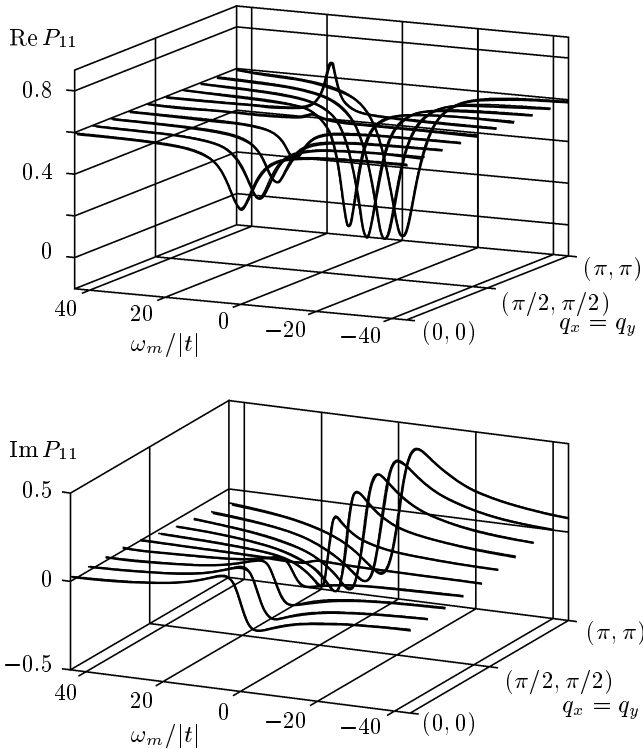


Рис. 2. Зависимости вещественной и мнимой частей нормальных компонент силового оператора от маубаровской частоты и волнового вектора

для следующего набора параметров: $t' = -0.1|t|$, $t'' = -0.1|t|$, $J = 0.4|t|$, $n = 0.8$, $T = 0.01|t|$. При изменении параметров модели качественные особенности зависимости P_{11} от ω_m сохраняются. Видно, что P_{11} является сильно изменяющейся функцией маубаровской частоты в области $|\omega_m| \leq 40|t|$. При $|\omega_m| \gg |t|$ мнимая часть P_{11} быстро убывает до нуля, а реальная составляющая стремится к значению, соответствующему приближению Хаббард I, т. е. $P_{11} \rightarrow 1 - n/2$. Следовательно, в области частот, меньших, либо соизмеримых с абсолютным значением первого интеграла перескока, необходимо учитывать отличие P_{11} от простейшей аппроксимации Хаббард I.

После самосогласованного вычисления нормальных и аномальных компонент массового и силового операторов по уравнению (52) были рассчитаны концентрационные зависимости критической температуры. На рис. 3 приведены зависимости критической температуры T_c от концентрации электронов n , полученные при использовании двух приближений, для значений параметров $t' = -0.1|t_1|$, $t'' = -0.1|t_1|$, $J_1 = 0.4|t_1|$. Штриховой кривой показана зависимость, соответствующая приближению

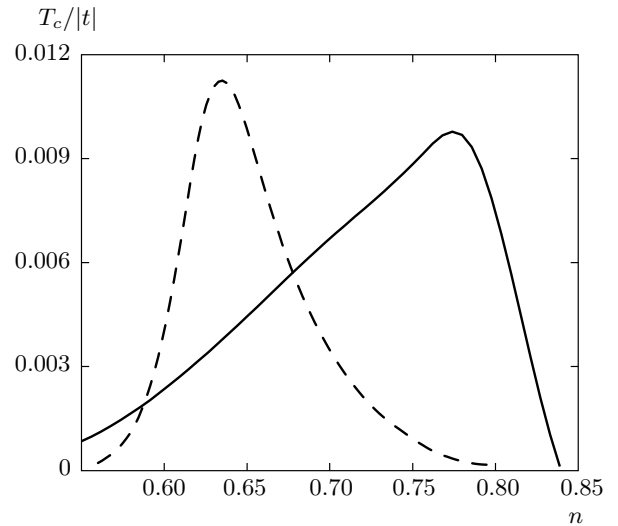


Рис. 3. Зависимости критической температуры перехода в сверхпроводящую фазу T_c от концентрации электронов n

среднего поля; сплошной линией — кривая, полученная при учете компонент динамических процессов спин-флуктуационного рассеяния. Параметры выбирались такими, чтобы значение концентрации в точке максимума кривой соответствовало оптимальному допированию. На рисунке видно, что учет компонент силового оператора заметно модифицирует характер концентрационной зависимости. Например, точка, соответствующая максимуму на концентрационной зависимости $T_c(n)$, смещается в область больших концентраций электронов и лучше соответствует экспериментальным данным. Таким образом, условия реализации сверхпроводящей фазы с симметрией параметра порядка d -типа значительно изменяются при учете спин-флуктуационных процессов рассеяния. Заметим, что существует область параметров, когда приближение среднего поля давало бы качественно удовлетворительное согласие с экспериментальными данными. В то же время включение процессов спин-флуктуационного рассеяния приводило к кардинальному изменению области реализации рассматриваемой сверхпроводящей фазы. В частности, не только происходило смещение кривой концентрационной зависимости, но и имело место значительное понижение критической температуры. Ввиду отсутствия практического интереса и экономии места такие зависимости здесь не приводятся. Следует отметить, однако, что такие результаты лишней раз подчеркивают ограниченность приближения среднего поля и важную роль процес-

сов спин-флуктуационного рассеяния, отражаемых в рамках предложенного подхода посредством нормальных и аномальных компонент массового и силового операторов.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результаты представленных вычислений демонстрируют, что сверхпроводящая фаза сильно коррелированных электронов (фермионы Хаббарда) описывается системой уравнений самосогласования, содержащей новый элемент — аномальную компоненту силового оператора $P_{0\sigma,\bar{\sigma}0}(\mathbf{k}, i\omega_m)$. Учет этой величины не только модифицирует формальную структуру уравнений самосогласования, но и существенно влияет на концентрационную зависимость критической температуры перехода в сверхпроводящую фазу с $d_{x^2-y^2}$ -симметрией параметра порядка. В этой связи остановимся на следующих моментах.

1. В данной работе проанализирован только d -тип симметрии сверхпроводящей фазы. Решение для сверхпроводящей фазы с симметрией s -типа также может быть получено из представленной системы уравнений самосогласования. В частности, уравнение для критической температуры, вытекающее из этой системы, полностью совпадает с соответствующим уравнением, полученным ранее в работах [26, 27], где анализировалась амплитуда рассеяния в куперовском канале. В этих работах была отмечена существенная роль спин-флуктуационных процессов рассеяния при вычислении T_c . Совпадение уравнений для T_c , найденных на основе анализа амплитуды рассеяния в парафазе и на основе уравнений в сверхпроводящей фазе, подтверждает тезис об учете эквивалентных в физическом отношении процессов, хотя и описываемых разными математическими структурами. Аналогичное совпадение имеет место и для симметрии параметра порядка d -типа.

2. Включение трехцентровых взаимодействий и дальних перескоков обусловлено следующими причинами. Во-первых, даже в приближении среднего поля трехцентровые взаимодействия существенно влияют на значение критической температуры [22] и в недавних работах Андерсона с сотрудниками эти взаимодействия стали приниматься во внимание [23]. С другой стороны, учет дальних перескоков сказывается как на характере уравнения для T_c [31], так и на значении концентрации носителей, при котором наблюдается максимальная критическая температура. Проведенный анализ ро-

ли спин-флуктуационных процессов рассеяния показал, что для интерпретации экспериментальных данных существенное значение имеет одновременный учет трехцентровых взаимодействий и перескоков электронов между узлами, находящимися в пределах трех координационных сфер. Следует обратить внимание на то, что трехцентровые взаимодействия по-разному перенормируют константу связи в выражениях для компонент массового и силового операторов. Это обстоятельство становится важным по следующей причине. Без учета поправок к силовому оператору роль трехцентровых взаимодействий для d -фазы сводилась лишь к замене обменного параметра на эффективный. Поскольку же в силовом операторе перенормировка иная, последовательный учет трехцентровых взаимодействий не сводится к какой-либо ренормировке константы связи.

3. Если на модификацию вида уравнений самосогласования повлияли только аномальные компоненты силового оператора, то при расчете конкретных значений критических температур существенными оказались и нормальные компоненты этого оператора. Таким образом, в однопетлевом приближении спин-флуктуационные процессы в теории сверхпроводящей фазы отражаются посредством аномальных и нормальных компонент силового оператора. При этом существенное значение приобретает задача о вычислении магнитной восприимчивости. В данной работе существенные особенности этой функции находились из сопоставления с восприимчивостью, вычисленной ранее [10] в GRPA-приближении.

Авторы выражают глубокую благодарность Ю. В. Копаеву и участникам его семинара за полезное обсуждение данной работы, а также Н. М. Плакиде за ряд полезных замечаний, учет которых способствовал улучшению содержания работы. Один из авторов (В. В.) признателен Р. О. Зайцеву за конкретные советы по расчету спин-флуктуационных вкладов.

Работа выполнена в рамках Программы Президиума РАН «Квантовая макрофизика», РФФИ (грант № 06-02-16100) и Интеграционного проекта СО РАН № 3.4.

ЛИТЕРАТУРА

1. J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. **A276**, 238 (1963).

2. V. J. Emery, Phys. Rev. Lett. **58**, 2794 (1987); C. M. Varma, S. Schmitt-Rink, and E. Abrahams, Sol. St. Comm. **62**, 681 (1987).
3. Ya. B. Gaididei and V. M. Loktev, Phys. Stat. Sol. B **147**, 307 (1988).
4. P. W. Anderson, Science **235**, 1196 (1987).
5. N. M. Plakida, V. Yu. Yushankhay, and I. V. Stasyuk, Physica **C162-164**, 787 (1989).
6. Yu. A. Izyumov and B. M. Letfulov, J. Phys.: Condens. Matter **2**, 8905 (1990).
7. V. Yu. Yushankhay, N. M. Plakida, and P. Kalinay, Physica **C174**, 401 (1991).
8. M. A. Baranov and M. Yu. Kagan, Z. Phys. B: Condens. Matter **86**, 237 (1992).
9. M. Yu. Kagan and T. M. Rice, J. Phys.: Condens. Matter **6**, 3771 (1994).
10. Ю. А. Изюмов, М. И. Кацнельсон, Ю. Н. Скрябин, *Магнетизм коллективизированных электронов*, Наука, Москва (1994).
11. N. M. Plakida, *High-Temperature Superconductivity*, Springer, Berlin (1995).
12. Ю. А. Изюмов, УФН **167**, 465 (1997).
13. В. И. Белявский, В. В. Капаев, Ю. В. Копаев, ЖЭТФ **118**, 941 (2000).
14. В. И. Белявский, Ю. В. Копаев, УФН **176**, 457 (2006).
15. М. Ю. Каган, А. В. Клапцов, И. В. Бродский и др., УФН **176**, 1105 (2006).
16. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **68**, 207 (1975); **70**, 1100 (1976).
17. В. В. Вальков, С. Г. Овчинников, *Квазичастицы в сильно коррелированных системах*, ИФ СО РАН, Новосибирск (2001).
18. Ю. А. Изюмов, Ю. Н. Скрябин, *Базовые модели в квантовой теории магнетизма*, УрО РАН, Екатеринбург (2002).
19. Р. О. Зайцев, *Диаграммные методы в теории сверхпроводимости и ферромагнетизма*, УРСС, Москва (2004).
20. В. Г. Барьяхтар, В. Е. Криворучко, Д. А. Яблонский, *Функции Грина в теории магнетизма*, Наукова думка, Киев (1984).
21. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, Физматгиз, Москва (1962).
22. В. В. Вальков, Т. А. Валькова, Д. М. Дзедзисашвили, С. Г. Овчинников, Письма в ЖЭТФ **75**, 450 (2002).
23. B. Edegger, V. N. Muthukumar, C. Gros, and P. W. Anderson, Phys. Rev. Lett. **96**, 207002 (2006).
24. N. M. Plakida and V. S. Oudovenko, Phys. Rev. B **59**, 11949 (1999).
25. Н. М. Плакида, Л. Антон, С. Адам, Г. Адам, ЖЭТФ **124**, 367 (2003).
26. Р. О. Зайцев, Письма в ЖЭТФ **79**, 143 (2004).
27. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **98**, 780 (2004).
28. Yu. A. Izyumov and B. M. Letfulov, J. Phys.: Condens. Matter **3**, 5373 (1991).
29. P. Monthoux and D. Pines, Phys. Rev. B **47**, 6069 (1993).
30. A. V. Chubukov, D. Pines, and J. Schmalian, arXiv:cond-mat/0201140.
31. В. В. Вальков, Д. М. Дзедзисашвили, Письма в ЖЭТФ **77**, 450 (2003).