

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-03-07U

Т.С.Мисакович, І.В.Стасюк

НАДПРОВІДНІСТЬ В ПСЕВДОСПІН-ЕЛЕКТРОННІЙ
МОДЕЛІ

УДК: 538.945.

PACS: 74.25.Dw, 71.10.Fd

Надпровідність в псевдоспін-електронній моделі

Т.С.Мисакович, І.В.Стасюк

Анотація. Досліджується статична сприйнятливість у надпровідному каналі для випадку псевдоспін-електронної моделі (ПЕМ) з тунельним розщепленням рівнів при слабкій псевдоспін-електронній взаємодії. В режимі $\mu = const$ є можливість фазового переходу до фази з модуляцією періоду ґратки (хімпотенціал знаходиться поблизу центру зони - половинне заповнення), при відмінному від половинного заповненні зони та ненульовій частоті тунелювання Ω виявлено перехід до надпровідної фази. Досліджено вплив тунельного розщеплення на фазові переходи.

Superconductivity in the pseudospin-electron model

T.S.Mysakovych, I.V.Stasyuk

Abstract. The static susceptibility in the superconducting channel is investigated for the case of the pseudospin-electron model with tunneling splitting of levels at weak pseudospin-electron interaction. In the $\mu = const$ regime the system undergoes the phase transition to the phase with modulation of the lattice period (the chemical potential is located near the centre of the band, half filling), the transition to the superconducting state is revealed for non-half filling of the band and for the case of nonzero tunneling frequency Ω . The influence of the tunneling splitting on the phase transitions is investigated.

1. Вступ

В зв'язку з відкриттям високотемпературної надпровідності останнім часом інтенсивно проводяться дослідження цього явища як експериментальними методами, так і за допомогою теоретичних моделей. Крім чисто електронних моделей використовують і "змішані" моделі, де крім електронів є ще й інші ступені вільності (зокрема, це фонони у моделі Голстейна, бозони у бозе-ферміонній моделі та інші). Модель Голстейна описує взаємодію ферміонів з бозонами (це можуть бути фонони). Фонони у цій моделі є ейнштейнівськими (частота однакова для всіх фононів). Для цієї моделі при використанні границі безмежної вимірності простору і наближення Мігдала-Еліашберга (нехтування поправками до вершинної частини при розрахунку сприйнятливості) та ряду інших наближень [1–5] було показано, що при ненульовій частоті фононів у системі може виникнути надпровідний стан (НС) (при відмінному від половинного заповненні). Якщо ж концентрація електронів близька до одиниці, то виникає зарядово впорядкований стан (ЗВС). Було виявлено, що температура переходу до НС досягає максимуму при певному значенні електрон-фононної взаємодії (в режимі фіксованого хімпотенціалу), причому максимальна температура переходу до НС є завжди менша максимальної температури переходу до ЗВС. Також було досліджено [4] вплив ангармонічності у фононному спектрі на переходи до НС та ЗВС. Отримані на основі різних наближень результати [1–5] порівнювалися з точним розв'язком, отриманим методом Монте-Карло; було встановлено, що наближення Мігдала-Еліашберга дає добрі результати для слабкої взаємодії.

Ще одна теоретична модель для опису надпровідності - бозе-ферміонна - описує взаємодію рухомих електронів з локалізованими сильно зв'язаними електронними парами (бозонами). Дослідження [6,7] проводилися з метою виявлення температури переходу у надпровідний стан T_c а також температури T^* , при якій виникає псевдощілина в електронній густині станів; виявилось, що T^* , залежно від концентрації, може бути набагато більшою ніж T_c .

Також для опису високотемпературної надпровідності користуються $t - J$ моделлю, яка для двошпідграткового антиферромагнетика у випадку малих концентрацій дірок зводиться до спін-поляронної моделі [8]. Було показано, що надпровідні спарювання спін-поляронів можуть бути одним з механізмів високотемпературної надпровідності [8].

Крім цього, використовують також ангармонічні моделі висо-

котемпературних надпровідників і досліджують електрон-фононне спарювання, викликане взаємодією носіїв заряду з сильно ангармонічними коливаннями атомів ґратки [9,10]. Для опису таких коливань використовують потенціал з двома мінімумами. У роботі [11] було досліджено залежність температури переходу в надпровідний стан від висоти бар'єру між мінімумами цього потенціалу: зі зростанням висоти бар'єру температура зростає і потім виходить на насичення. Дослідження [12] виявили можливість переходу системи у надпровідний стан для асиметричного двохямного потенціалу, було встановлено, що максимальна температура переходу отримується при певному середньому значенні положення атома у цьому потенціалі.

Специфікою надпровідників типу $YBaCuO$ є те, що електронний перенос відбувається в основному в площинах CuO . Ще однією особливістю таких кристалів є присутність сильно ангармонічних елементів структури. Для $YBaCuO$ це проявляється у локальних ангармонічних вібраціях апексного кисню у напрямку по нормалі до площини CuO . Для опису таких вібрацій у випадку локального потенціалу з двома мінімумами застосовується псевдоспінний формалізм. Таким чином, гамільтоніан псевдоспін-електронної моделі ПЕМ має вигляд:

$$H = \sum_i (U n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} - \mu (n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow}) + g S_i^z (n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow}) - h S_i^z - \Omega S_i^x) + \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} \quad (1)$$

Електронна підсистема у цій моделі описується гамільтоніаном Хаббарда (t_{ij} -доданок описує перескок електрона зі спіном σ з вузла i на вузол j , U -доданок - кулонівське відштовхування), g -доданок описує псевдоспін-електронну взаємодію, Ω -доданок - тунельне розщеплення рівнів, h -доданок - асиметрію локального ангармонічного потенціалу [13–16]. У роботі [15] за допомогою квантового методу Монте-Карло було досліджено можливість переходу в надпровідний стан для ПЕМ. Було встановлено виникнення надпровідного стану для $s-$, $d-$ симетрій при різних співвідношеннях параметрів теорії Ω , g , U для випадку фіксованої електронної концентрації. Зокрема, для випадку слабого псевдоспін-електронного зв'язку виявилось можливим встановлення надпровідного стану з $s-$ симетрією.

Необхідно зазначити, що ПЕМ є схожою до відомої моделі Фалікова-Кімбала (ФК) [17], що описує систему, у якій присутня взаємодія між рухомими та нерухомими частинками. Для цієї моделі в

наближенні динамічного середнього поля виявлено присутність однорідної фази, фаз з подвійною та неспівмірною модуляцією періоду ґратки та можливість фазового розшарування [18–22]. Відмінність між моделями полягає у тому, що модель ФК не містить доданку, який у ПЕМ відповідає за тунельне розщеплення рівнів; крім цього для моделі ФК як правило використовують режим постійної концентрації нерухомих частинок (це відповідає в ПЕМ фіксації середнього числа псевдоспіна), в той час як в ПЕМ використовують режими фіксації хімпотенціалу або фіксації концентрації рухомих частинок.

Попередні дослідження ПЕМ були присвячені аналізу електронного спектру [23], дослідженню поведінки діелектричної сприйнятливості, виявленню фазових переходів та виникненню фазового розшарування [24–30]. Зокрема, у роботі [25] для ПЕМ із прямою взаємодією між псевдоспінами при $\Omega, t = 0$ було встановлено можливість фазового переходу першого роду між однорідними фазами а також можливість фазового розшарування. Схожі результати було отримано для випадку $\Omega, t \neq 0$ при великому g у границі $U \rightarrow \infty$ для двох-підґраткової ПЕМ [26] та у випадку $U = 0$ [27, 28]. У роботі [28] на основі термодинамічно узгодженої схеми узагальненого наближення хаотичних фаз було виявлено можливість появи фази з подвійною модуляцією періоду ґратки для випадку $U = 0, \Omega = 0$.

При слабкому псевдоспін-електронному зв'язку ($g < W, W$ - півширина зони, зона не розщеплюється у випадку слабкої взаємодії) та $U = 0, \Omega \neq 0$ у рамках наближень середнього поля та хаотичних фаз було встановлено можливість появи у системі ЗВС. Було виявлено, що в залежності від значення хімпотенціалу система може перейти у фазу з подвійною модуляцією періоду ґратки (хімпотенціал розташований поблизу центру зони), у однорідну фазу (хімпотенціал поблизу країв зони) та у фазу з неспівмірною модуляцією періоду ґратки (при проміжних значеннях хімпотенціалу). а також можливості появи фазового розшарування. В режимі $n = const$ (n - електронна концентрація) в системі можлива поява фазового розшарування на однорідні фази з різними значеннями середнього значення псевдоспіна і електронної концентрації та розшарування на однорідну та модульовану фази [29–31]. Однак коли частота тунелювання відмінна від нуля, то ефективна взаємодія між електронами стає динамічною і у системі при певному підборі параметрів може наступити перехід до надпровідного стану (теорема Андерсона [32]). Тому за цих умов перехід до ЗВС конкуруватиме із надпровідним впорядкуванням. Ця проблема і буде предметом розгляду даної роботи.

2. Сприйнятливість у надпровідному каналі

У попередніх роботах [30, 31] для слабкої взаємодії було досліджено поведінку діелектричної сприйнятливості

$$\chi^{3BC}(\vec{q}, \omega_n) = \int_0^\beta \langle T_\tau M(0)M(\tau) \rangle_{\vec{q}} e^{i\omega_n \tau} d\tau - \beta \langle M \rangle^2 \delta(\omega_n), \quad (2)$$

тут $M_i = d_e n_i + d_s S_i^z$ - дипольний момент комірки В рамках наближення хаотичних фаз було показано, що розбіжність статичної діелектричної сприйнятливості настає при виконанні умови:

$$\lambda^2 + g^2 \sin^2 \theta \lambda \langle \sigma^z \rangle_0 \Pi_q(0) + \lambda^2 g^2 \beta' \cos^2 \theta \Pi_q(0) = 0, \quad (3)$$

де

$$\begin{aligned} \Pi_q(\omega) &= \frac{2}{N} \sum_k \frac{n(t_k) - n(t_{k-q})}{\omega + t_k - t_{k-q}}, \\ b' &= \left(\frac{1}{4} - \langle \sigma^z \rangle_0^2 \right), \quad \sin \theta = \frac{\Omega}{\lambda}, \\ \lambda &= \sqrt{(gn - h)^2 + \Omega^2}, \quad \langle \sigma^z \rangle_0 = \frac{1}{2} \tanh\left(\frac{\beta \lambda}{2}\right). \end{aligned} \quad (4)$$

Статична сприйнятливість у надпровідному (куперівському) каналі для однорідного впорядкування та у випадку s -симетрії визначається так:

$$\chi^{HC} = \frac{T}{N} \sum_{k,q} \int_0^\beta \langle T_\tau c_{\downarrow k}(\tau) c_{\uparrow -k}(\tau) c_{\uparrow -q}^\dagger c_{\downarrow q}^\dagger \rangle d\tau, \quad (5)$$

де використано представлення Гейзенберга для операторів: $A(\tau) = e^{\tau H} A e^{-\tau H}$. Аналогічно до роботи [30] розглядатимемо випадок $U = 0$ і перепишемо гамільтоніан у вигляді:

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_{int}, \\ H_0 &= -\lambda \sum_i \sigma_i^z - gNn\eta + \sum_{k,\sigma} (g\eta - \mu + t_k) n_{k\sigma}, \\ H_{int} &= g \sum_i \left(\frac{1}{N} \sum_{\sigma k k'} e^{i(k-k')R_i} c_{k\sigma}^+ c_{k'\sigma} - n \right) (S_i^z - \eta). \end{aligned} \quad (6)$$

Тут було здійснено перетворення повороту [30]

$$\begin{aligned} S_i^z &= \sigma_i^z \cos \theta + \sigma_i^x \sin \theta, \\ S_i^x &= \sigma_i^x \cos \theta - \sigma_i^z \sin \theta. \end{aligned} \quad (7)$$

Для побудови гамільтоніану нульового наближення було використано наближення середнього поля (НСП):

$$gn_i S_i^z \rightarrow gn_i \langle S_i^z \rangle + g \langle n_i \rangle S_i^z - g \langle n_i \rangle \langle S_i^z \rangle. \quad (8)$$

Подібна схема застосовується для моделі Хаббарда при слабкій електронній кореляції U ; такий підхід дає змогу описати магнітні властивості моделі Хаббарда для випадку, коли кореляційного розщеплення електронної зони немає. Для ПЕМ в наближенні динамічного середнього поля було показано, що при слабкій псевдоспін-електронній взаємодії g (аналог кулонівського відштовхування U в моделі Хаббарда) зона також не розщеплюється ($g < W$, W - півширина електронної зони). Тому вибір наближення середнього поля в якості нульового є обґрунтованим для слабкої взаємодії.

Використовуючи представлення для $\exp(-\beta H)$ оператора

$$e^{-\beta H} = e^{-\beta H_0} \sigma(\beta), \quad \sigma(\beta) = T \exp\left(-\int_0^\beta H_{int}(\tau) d\tau\right), \quad (9)$$

отримаємо для середнього $\langle T_\tau c_{\downarrow k}(\tau) c_{\uparrow -k}(\tau) c_{\uparrow -q}^\dagger c_{\downarrow q}^\dagger \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle T_\tau c_{\downarrow k}(\tau) c_{\uparrow -k}(\tau) c_{\uparrow -q}^\dagger c_{\downarrow q}^\dagger \rangle &= \frac{1}{\langle \sigma(\beta) \rangle_0} \langle T_\tau c_{\downarrow k}(\tau) c_{\uparrow -k}(\tau) c_{\uparrow -q}^\dagger c_{\downarrow q}^\dagger \sigma(\beta) \rangle_0 \\ &= \langle T_\tau c_{\downarrow k}(\tau) c_{\uparrow -k}(\tau) c_{\uparrow -q}^\dagger c_{\downarrow q}^\dagger \sigma(\beta) \rangle_0^c, \end{aligned} \quad (10)$$

де оператори дані в представленні взаємодії $A(\tau) = e^{\tau H_0} A e^{-\tau H_0}$, символ $\langle \dots \rangle_0^c$ означає врахування зв'язаних діаграм при усередненні по розподілу з H_0 .

Для розрахунку середнього $\langle T_\tau c_{\downarrow k}(\tau) c_{\uparrow -k}(\tau) c_{\uparrow -q}^\dagger c_{\downarrow q}^\dagger \sigma(\beta) \rangle_0^c$ застосуємо теорію збурень:

$$\begin{aligned} \langle T_\tau c_{\downarrow k}(\tau) c_{\uparrow -k}(\tau) c_{\uparrow -q}^\dagger c_{\downarrow q}^\dagger \sigma(\beta) \rangle_0^c &= \langle T_\tau c_{\downarrow k}(\tau) c_{\uparrow -k}(\tau) c_{\uparrow -q}^\dagger c_{\downarrow q}^\dagger \rangle_0^c - \\ &- \int_0^\beta d\tau_1 \langle T_\tau c_{\downarrow k}(\tau) c_{\uparrow -k}(\tau) c_{\uparrow -q}^\dagger c_{\downarrow q}^\dagger H_{int}(\tau_1) \rangle_0^c + \\ &\frac{1}{2!} \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 \langle T_\tau c_{\downarrow k}(\tau) c_{\uparrow -k}(\tau) c_{\uparrow -q}^\dagger c_{\downarrow q}^\dagger H_{int}(\tau_1) H_{int}(\tau_2) \rangle_0^c - \dots \end{aligned} \quad (11)$$

Розраховуючи середні від T - добутків, ми використовуємо діаграмну техніку та теорему Віка для спінових та фермі- операторів. Крім цього ми робимо кумулянтний розклад для розрахунку середніх від добутку σ^z операторів. Введемо наступні позначення для незбурених

функцій Гріна:

$$\begin{aligned} \langle T_\tau \sigma_l^+(\tau) \sigma_{l'}^-(\tau') \rangle_0 &= -2 \langle \sigma^z \rangle_0 K_{ll'}^0(\tau - \tau'), \\ \langle T_\tau c_{k\sigma}(\tau) c_{k'\sigma}^+(\tau') \rangle_0 &= \delta_{kk'} G_{k\sigma}^0(\tau - \tau') \end{aligned} \quad (12)$$

та кумулянтів

$$\begin{aligned} \langle T_\tau \sigma_l^z(\tau) \sigma_{l'}^z(\tau') \rangle_0 &= b^2 + b' \delta_{ll'}, \\ b = b(\beta\lambda) = \langle \sigma_l^z \rangle_0 &= \frac{1}{2} \tanh \frac{\beta\lambda}{2}; \quad b' = \frac{\partial b}{\partial(\beta\lambda)}. \end{aligned} \quad (13)$$

Після переходу до ω, k - представлень

$$\frac{1}{\beta} \sum_n e^{-i\omega_n(\tau_1 - \tau_2)} \frac{1}{N} \sum_k e^{ik(R_l - R_i)} K_k^0(\omega_n) = K_{li}^0(\tau_1 - \tau_2) \quad (14)$$

для незбурених функцій Гріна матимемо:

$$\begin{aligned} G_{k\sigma}^0(\omega_n) &= \frac{1}{i\omega_n - t_k - g\eta + \mu}, \\ K_q^0(\omega_n) &= \frac{1}{i\omega_n - \lambda}. \end{aligned} \quad (15)$$

Слід відзначити, що діаграми, які мають "однохвосткові" включення у функції Гріна та кумулянти скомпенсуються завдяки тому, що у якості нульового наближення вибрано НСП; поправки середнього поля вже є включені у незбурені функції Гріна та у кумулянти.

Введемо наступні діаграмні позначення

$$\Sigma(\omega) : \boxed{\circ \quad \circ} ; \quad G_k^0(\omega) : \longrightarrow,$$

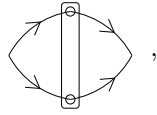
де

$$\Sigma(\omega) = \sin^2 \theta \frac{K^0(\omega) + K^0(-\omega)}{2} - b' \beta \cos^2 \theta \delta(\omega). \quad (16)$$

Для сприйнятливості $\chi^{\text{ЗВС}}$ у нульовому порядку теорії збурень матимемо вираз

$$\frac{1}{N} \sum_{k,n} G_k^0(\omega_n) G_{-k}^0(-\omega_n). \quad (17)$$

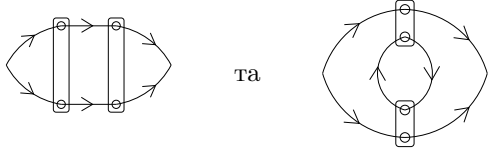
Внески першого порядку взаємоскомпенсуються. В другому порядку розглядаємо діаграми такого типу



в аналітичному вигляді

$$-\frac{g^2 T}{N^2} \sum_{k_1, k_2, n_1, n_2} G_{k_1}^0(\omega_{n_1}) G_{-k_1}^0(-\omega_{n_1}) \Sigma(\omega_{n_1} - \omega_{n_2}) \times G_{k_2}^0(\omega_{n_2}) G_{-k_2}^0(-\omega_{n_2}). \quad (18)$$

В четвертому порядку ми враховуємо діаграми двох типів



та

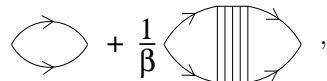
з аналітичними внесками

$$\frac{g^4 T^2}{N^3} \sum_{k_1, k_2, k_3, n_1, n_2, n_3} G_{k_1}^0(\omega_{n_1}) G_{-k_1}^0(-\omega_{n_1}) \Sigma(\omega_{n_1} - \omega_{n_3}) \times G_{k_3}^0(\omega_{n_3}) G_{-k_3}^0(-\omega_{n_3}) \Sigma(\omega_{n_3} - \omega_{n_2}) G_{k_2}^0(\omega_{n_2}) G_{-k_2}^0(-\omega_{n_2}) \quad (19)$$

і

$$\frac{g^4 T}{N^2} \sum_{k_1, k_2, n_1, n_2} G_{k_1}^0(\omega_{n_1}) G_{-k_1}^0(-\omega_{n_1}) \Sigma(\omega_{n_1} - \omega_{n_2}) \times \Pi_{k_2 - k_1}(\omega_{n_1} - \omega_{n_2}) \Sigma(\omega_{n_1} - \omega_{n_2}) G_{k_2}^0(\omega_{n_2}) G_{-k_2}^0(-\omega_{n_2}) \quad (20)$$

відповідно. Таким чином, ми маємо два канали розсіяння: "аномальний" із паралельними напрямками стрілок фермі-функцій (в другому порядку це внесок (19)) та "нормальний" з протилежними напрямками стрілок фермі-функцій (в другому порядку це внесок (20)). Діаграми "нормального" типу формують ряд, аналогічний до того, який виникав при розрахунку діелектричної сприйнятливості ПЕМ зі слабкою взаємодією у наближенні хаотичних фаз (більш детально про це буде сказано далі). Враховуючи ці два канали розсіяння, для сприйнятливості χ^{HC} можемо записати у діаграмному вигляді:



в аналітичному вигляді

$$\chi^{\text{HC}} = \sum_{\omega, k} \chi_{\omega}^0(k) + T \sum_{k_1, k_2, \omega_1, \omega_2} \chi_{\omega_1}^0(k_1) \Gamma_{\omega_1, \omega_2}(k_1, k_2) \chi_{\omega_2}^0(k_2), \quad (21)$$

тут

$$\chi_{\omega_1}^0(k_1) = \frac{1}{N} G_{k_1}^0(\omega_1) G_{-k_1}^0(-\omega_1). \quad (22)$$

Для вершинної частини $\Gamma_{\omega_1, \omega_2}(k_1, k_2)$ (на діаграмі їй відповідає заштрихований прямокутник) матимемо рівняння Бете-Солпітера:

або в аналітичній формі

$$\Gamma_{\omega_1, \omega_2}(k_1, k_2) = \Gamma_{\omega_1, \omega_3}^0(k_1, k_3) + T \sum_{k_3, \omega_3} \Gamma_{\omega_1, \omega_3}^0(k_1, k_3) \chi_{\omega_3}^0(k_3) \Gamma_{\omega_3, \omega_2}(k_3, k_2), \quad (23)$$

тут величина $\Gamma_{\omega_1, \omega_3}^0(k_1, k_3)$ має вигляд:

$$\Gamma_{\omega_1, \omega_2}^0(k_1, k_2) = -\frac{g^2 \Sigma(\omega_1 - \omega_2)}{1 - g^2 \Pi_{k_2 - k_1}(\omega_1 - \omega_2) \Sigma(\omega_1 - \omega_2)}. \quad (24)$$

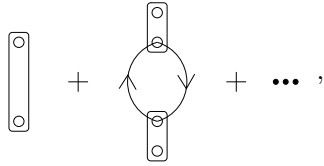
Ввівши величину $\tilde{\chi}_{\omega_1, \omega_2}^{\text{HC}}(k_1, k_2)$, зв'язок якої зі сприйнятливістю χ^{HC} є таким:

$$\chi^{\text{HC}} = \sum_{\omega_1, \omega_2, k_1, k_2} \tilde{\chi}_{\omega_1, \omega_2}^{\text{HC}}(k_1, k_2), \quad (25)$$

можна записати рівняння типу рівняння Ларкіна для систем з прямою взаємодією:

$$\tilde{\chi}_{\omega_1, \omega_2}^{\text{HC}}(k_1, k_2) = \chi_{\omega_1}^0(k_1) \delta_{k_1, k_2} \delta_{\omega_1, \omega_2} + T \chi_{\omega_1}^0(k_1) \sum_{k_3, \omega_3} \Gamma_{\omega_1, \omega_3}^0(k_1, k_3) \tilde{\chi}_{\omega_3, \omega_2}^{\text{HC}}(k_3, k_2). \quad (26)$$

Слід відзначити, що наше рівняння (26) по своїй структурі є схоже на рівняння, отримане для моделі Голстейна [1–4]. При побудові "нульової" вершинної частини $\Gamma_{\omega_1, \omega_2}^0(k_1, k_2)$ ми використали наближення типу наближення хаотичних фаз (НХФ), тобто враховували внески, що мають структуру багатопетлевих з'єднань, в діаграмному представленні їм відповідає ряд



цей ряд є схожим до ряду, отриманого в рамках узагальненого наближення хаотичних фаз для ПЕМ із прямою електрон-електронною взаємодією [24], у нашому випадку з'єднання між петлями здійснюється за допомогою кумулянтів та бозе-функцій Гріна. Такий ряд розглядався у роботі [30, 31] при розрахунку діелектричної сприйнятливості системи у наближенні хаотичних фаз.

Вираз (24) для "нульової" вершинної частини $\Gamma_{\omega_1, \omega_2}^0(k_1, k_2)$ має подібну структуру до виразу, отриманого для моделі Голстейна у наближення Мігдала-Еліашберга, використаного у роботі [1], хоча у цій моделі у границі безмежної вимірності простору не виникає кумулянтних внесків а є присутні лише фононні пропатори (аналог бозонних функцій Гріна $K^0(\omega)$ у нашій моделі).

3. Фазовий перехід у НС та ЗВС

У попередній роботі [30] було побудовано фазові діаграми для випадків $\Omega = 0$, $\Omega = 0.2$. Було показано, що система може перейти в модульовану чи однорідну фазу в залежності від положення хімпотенціалу. Побудуємо фазові діаграми для різних значень Ω з врахуванням можливості переходу у надпровідну фазу, розглядатимемо режим $\mu = const$.

Щоб знайти температуру переходу до НС, необхідно визначити температуру, при якій сприйнятливості у надпровідному каналі розбігатиметься. Цю температуру можна знайти з тієї умови, що матриця розсіяння

$$T_{\omega_1 \omega_2}(k_1, k_2) = -T \chi_{\omega_n}^0(k_1) \Gamma_{\omega_1 \omega_2}^0(k_1, k_2) \quad (27)$$

матиме одиничне власне значення [1, 33]. Специфікою даної процедури є те, що ми працюємо на уявних дискретних мацубарівських частотах $i\omega_n = i(2n + 1)\pi T$, це дозволяє нам мати справу з дискретною по частотам матрицею $T_{\omega_1 \omega_2}(k_1, k_2)$. Для спрощення розрахунків ми знехтуємо відмінністю від одиниці знаменника "нульової" вершинної частини $\Gamma_{\omega_1, \omega_3}^0(k_1, k_3)$ (таке наближення є схожим до неперенормованого наближення Мігдала-Еліашберга для моделі Голстейна [1]). Слід відмітити, що умова рівності нулю знаменника у

формулі (23) для $\Gamma_{\omega_1, \omega_2}^0(k_1, k_2)$ при $\omega_1 = \omega_2$ співпадає із умовою (3), при якій розбігається статична діелектрична сприйнятливості (перехід до ЗВС [29–31]). Тому ми можемо нехтувати відмінністю знаменника від одиниці лише у високотемпературній фазі (коли система ще не перейшла до ЗВС), тобто ми тим самим обмежуємося розглядом можливості переходу у НС із високотемпературної фази. Якщо б ми хотіли дослідити можливість виникнення надпровідного впорядкування коли у системі вже існує ЗВС (перехід від ЗВС до НС), то необхідно враховувати цей знаменник повністю.

В результаті нашого спрощення $\Gamma_{\omega_1 \omega_2}^0(k_1, k_2) = g^2 \Sigma(\omega_1 - \omega_2)$, тобто "нульова" вершинна частина не залежить від хвильового вектора і ми можемо просумувати по хвильових векторах k_1, k_2, k_3 у рівнянні Ларкіна (26). Тому для визначення температури переходу нам треба шукати одиничне власне значення матриці

$$\tilde{T}_{\omega_1 \omega_2} = -T \sum_{k_1} \chi_{\omega_2}^0(k_1) \Gamma_{\omega_1 \omega_2}^0. \quad (28)$$

У якості критичної температури переходу в НС ми беремо найвищу температуру з поміж усіх температур на площині (T, h) , при яких матриця $T_{\omega_1 \omega_2}$ має одиничне власне значення; це можна назвати абсолютною нестійкістю високотемпературної фази по відношенню до надпровідного впорядкування. Щоб знайти критичну температуру для випадку ЗВС, потрібно розв'язати рівняння (3). Для розрахунку середнього числа електронів n та середнього значення псевдоспіна $\eta = \cos \theta \langle \sigma^z \rangle_0$ ми використовуємо рівняння, отримані в наближенні середнього поля [29]:

$$n = \frac{1}{N} \sum_{k\sigma} (e^{\beta(g\eta + t_k - \mu)} + 1)^{-1} \quad (29)$$

$$\eta = \frac{h - gn}{2\lambda} \tanh\left(\frac{\beta\lambda}{2}\right).$$

У наших розрахунках ми проводимо пряму суму по двохвимірній квадратній ґратці та беремо $a = 1$, $W = 1$, де a -постійна ґратки, W -півширина електронної зони ($t_k = \frac{W}{2}(\cos k_x + \cos k_y)$) [29, 30].

На рис.1 показано залежність хвильового вектора модуляції $\vec{q} = (q, q)$ ЗВС, температури переходу до ЗВС (суцільна лінія) та температури переходу до НС (пунктирна лінія) від хімічного потенціалу для випадку $\Omega = 0.06$ (приведено лише додатні значення хімпотенціалу, оскільки картина є симетричною по відношенню до точки $\mu = 0$). Як бачимо, випадок $q = \pi$ реалізується для невеликих значень модуля хімпотенціалу $|\mu|$ (хімпотенціал біля центра зони); при

зростанні $|\mu|$ у системі відбувається перехід до ЗВС з неспівмірною модуляцією періоду ґратки. При ще більшому зростанні $|\mu|$ система переходить до однорідної фази і нарешті при розміщенні хімпотенціалу поблизу країв зони ($|\mu| \sim W + g/2$) відбувається перехід до НС (потовщена пунктирна лінія). Перехід у НС, позначений тонкою пунктирною лінією, насправді не реалізується, оскільки у цій області температура переходу до ЗВС є вищою (як вже було зазначено, насправді у цій області для "нульової" вершинної частини необхідно користуватися формулою (24) і не нехтувати відмінністю знаменника від одиниці). Треба зазначити, що у випадку $\Omega = 0$ перехід у над-

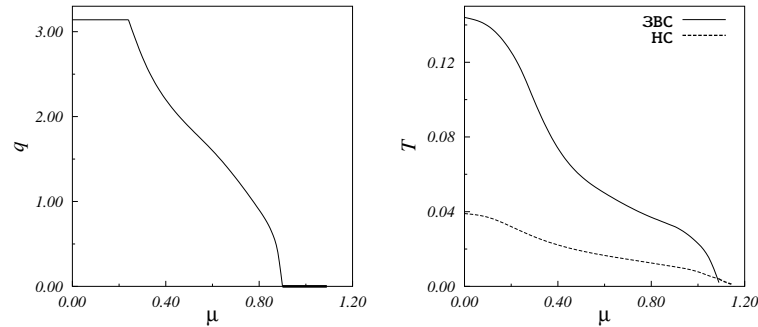


Рис. 1. Залежність хвильового вектора модуляції $\vec{q} = (q, q)$, температури абсолютної нестійкості високотемпературної фази по відношенню до переходу у ЗВС (суцільна лінія) та у НС (пунктирна лінія) від хімічного потенціалу, $\Omega = 0.06$, $g = 0.5$.

провідну фазу не відбувається (оскільки ефективна взаємодія між електронами стає статичною, а тоді надпровідного впорядкування не виникає - теорема Андерсона [32]), а перехід у однорідну фазу відбувається аж до значень хімпотенціалу, що знаходяться на самому краю зони $|\mu| = W + g/2$. При $\Omega \neq 0$ звужується область значень μ , при яких має місце ЗВС, і з'являється можливість переходу до НС. Знайти граничне значення $|\mu|$, до якого ще відбувається перехід до НС є дуже складно, оскільки там дуже низька температура; можливо, що перехід у НС існує аж до значення $|\mu| = W + g/2$ (на краю зони) незалежно від величини Ω (при $\Omega \neq 0$).

На рис. 2 приведено залежність хвильового вектора модуляції ЗВС, температури переходу до ЗВС (суцільна лінія) та температури переходу до НС (пунктирна лінія) від хімічного потенціалу для

випадку $\Omega = 0.2$. Порівнюючи з рис. 1, бачимо, що зростання Ω призвело до зникнення можливості переходу до однорідної фази та пониження температури переходу до ЗВС. Точковою лінією показано залежність температури переходу до фази з $q = \pi$ (так звана chess-board фаза). У роботах [1-4] виникнення неспівмірної фази не було помічено для моделі Голстейна і фазовий перехід міг бути лише до chess-board фази або до надпровідної фази. Як бачимо з рис. 2, існує область фазового простору, де є можливим перехід до фази з неспівмірною модуляцією періоду ґратки (ця область є досить великою для малих значень Ω).

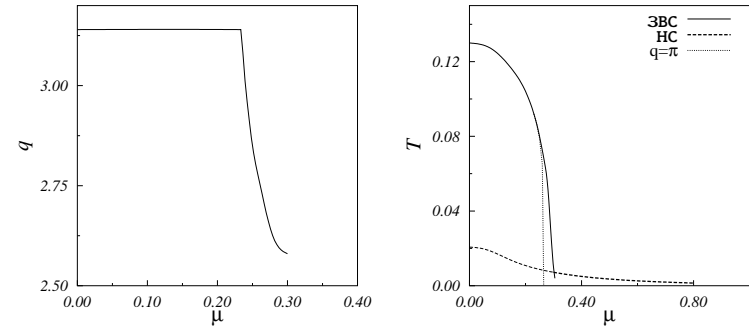


Рис. 2. Залежність хвильового вектора модуляції $\vec{q} = (q, q)$, температури абсолютної нестійкості високотемпературної фази по відношенню до переходу у ЗВС (суцільна лінія) та у НС (пунктирна лінія) від хімічного потенціалу, $\Omega = 0.2$, $g = 0.5$. Точковою лінією показано температуру переходу до фази з хвильовим вектором модуляції $\vec{q} = (\pi, \pi)$.

На рис. 3 приведено залежність температури переходу до ЗВС з хвильовим вектором модуляції $\vec{q} = (\pi, \pi)$ (суцільна лінія) та температури переходу до НС (пунктирна лінія) від хімічного потенціалу для випадку $\Omega = 0.4$. Для таких великих значень Ω вже не існує можливості переходу до однорідної фази чи фази з неспівмірною модуляцією періоду ґратки, тобто система може перейти лише у фазу з подвійною модуляцією періоду ґратки або у надпровідну фазу.

Можна дати грубу числову оцінку для температури переходу у НС. Згідно з використаними у роботі [10] даними, прийемо $W \approx 0.5$ еВ (слід відзначити, що числове значення величини електрон-

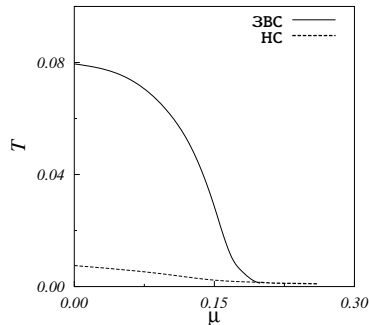


Рис. 3. Залежність температури абсолютної нестійкості високотемпературної фази по відношенню до переходу у ЗВС (суцільна лінія) та у НС (пунктирна лінія) від хімічного потенціалу, $\Omega = 0.4$, $g = 0.5$. Хвильовий вектор модуляції $\vec{q} = (\pi, \pi)$.

псевдоспінової взаємодії у роботі [10] було в 2-3 рази менше ніж у наших розрахунках). З рис. 1,2,3 для максимального значення температури переходу матимемо $T_{\text{макс}}^{\text{НС}} \approx 10 - 40$ К (при оцінці температури ми врахували те, що перехід у НС відбувається при відмінному від половинного заповненні, оскільки при $\mu = 0$ система переходить у ЗВС). З графіків залежності температури від хімпотенціалу видно, що якби не існувало переходу у ЗВС, то температура переходу до НС (при половинному заповненні, $\mu = 0$) була б у кілька разів вищою аніж температура $T_{\text{макс}}^{\text{НС}}$, при якій насправді відбувається перехід до НС. Авторами [10] не було враховано можливості появи ЗВС і у якості $T^{\text{НС}}$ вони приймали температуру при близькому до половинного заповненні, у їхніх розрахунках $T^{\text{НС}} \approx 40$ К.

Цікавим є питання про те, що відбуватиметься у системі при ще більшому зростанні частоти тунельного розщеплення. У роботі [29] було показано, що критична температура $T_c^{\text{ЗВС}}$ переходу до фази з подвійною модуляцією періоду ґратки (при $\mu = 0$) понижується по степеневому закону при зростанні Ω : $T_c^{\text{ЗВС}} \sim \exp(-\frac{\pi\sqrt{\Omega W}}{g\sqrt{2}})$. З аналізу поведінки матричних елементів $\tilde{T}_{\omega_1, \omega_2}$ (формула (28)) можна зробити висновок, що температура переходу $T_c^{\text{НС}}$ до НС при великих значеннях Ω буде такою ж самою (при $\mu = 0$): $T_c^{\text{НС}}(\Omega \rightarrow \infty) \approx T_c^{\text{ЗВС}}(\Omega \rightarrow \infty)$. З рис.1,2,3 видно, що температура переходу до ЗВС зі зростанням $|\mu|$ спадає швидше ніж температура переходу до НС.

Тому можна вважати, що для відмінних від нуля значень хімпотенціалу при великому Ω температура переходу у НС буде вищою ніж температура переходу у ЗВС і тоді у системі буде лише перехід до НС.

4. Висновки

В даній роботі досліджено можливість виникнення надпровідного впорядкування в ПЕМ з тунельним розщепленням рівнів при слабкій псевдоспін-електронній взаємодії. Побудовано фазові діаграми в площинах (T, μ) та (q, μ) . Встановлено, що при розміщенні хімпотенціалу поблизу центра зони (половинне заповнення) відбувається перехід до фази з модуляцією періоду ґратки. При відмінному від половинного заповненні та ненульовій частоті тунелювання Ω може відбуватися перехід до НС.

Отримані нами результати для двохвимірної ґратки є схожі до розрахунків, отриманих для моделі Голстейна у випадку безмежної вимірності простору (хоча в моделі Голстейна фононні координати пробігають ряд неперервних значень, в той час як в ПЕМ псевдоспінова змінна приймає лише два значення). На відміну від досліджень [1-4], нами було виявлено можливість виникнення неспівмірної фази а також можливість переходу у однорідну фазу. У роботі [1] було тільки відзначено, що неспівмірна фаза може існувати лише у дуже вузькій області фазової діаграми, в той же час як у нашому випадку для невеликих значень Ω ця область зовсім не є вузькою. Крім цього, у згаданих роботах не було досліджено вплив зміни величини Ω на зміну вигляду фазових діаграм (лише зазначалося, що при малих Ω температура переходу до НС прямує до нуля). Нами було показано, що для ПЕМ при зменшенні Ω сама область переходу до НС (область можливих значень хімпотенціалу) поступово звужується і пропадає при $\Omega = 0$.

Слід відзначити, що встановлений нами факт присутності надпровідної фази для ПЕМ узгоджуються з результатами, отриманими на основі квантового методу Монте-Карло [15], хоча у роботі [15] було лише встановлено можливість появи НС для низьких температур і не досліджувалася можливість появи ЗВС, а у нашій роботі приведено явну залежність температури переходу до НС від положення хімічного потенціалу та виявлено присутність ЗВС при розміщенні хімпотенціалу поблизу центра зони. Присутність фази із зарядовим впорядкуванням приводить до того, що перехід до НС відбувається при відмінному від половинного заповненні. У роботах [9,10] не було

враховано можливості появи ЗВС і у якості температури переходу до НС приймалася температура для близького до половинного заповнення, хоча справжня температура переходу до НС є нищою від тієї температури переходу в НС, яка була б при $\mu = 0$.

Автори вдячні проф. Дж.Фріріксу за висловлені ним поради щодо проведення числових розрахунків.

Література

1. *Freerics J.K., Jarrell. M., Scalapino D.J.*// Phys. Rev. B.-1993.-**48**, N 9. - P. 6302 - 6313.
2. *Freerics J.K.*// Phys. Rev. B.-1994.-**50**, N 1. - P. 403 - 417.
3. *Freerics J.K., Jarrell. M.*// Phys. Rev. B.-1994.-**50**, N 10. - P. 6939 - 6953.
4. *Freerics J.K., Jarrell. M., Mahan G.D.*// Phys. Rev. Lett.-1996.-**77**, N 22. - P. 4588 - 4591.
5. *Freerics J.K., Zlatič V., Chung W., Jarrell. M.*// Phys. Rev. B.-1998.-**58**, N 17. - P. 11613 - 11623.
6. *Devillard P., Ranninger J.*// cond-mat/0003378
7. *Ranninger J., Tripodi L.*// cond-mat/0212332
8. *Plakida N.M, Horsch P., Liechtenstein A. and Oudovenko V.S.* // IC/95/157
9. *Plakida N.M.*// Physica Scripta.-1989.-**T29**.-P.77-81
10. *Боголюбов Н.Н, Аксенов В.Л., Плакида Н.М.*// ТМФ.-1992.-**93**, N 3.-Ст.371-383
11. *Kurtz K.K, Hardy J.R., Flocken J.W.*// Ferroelectrics.-1992.-**87**.-P.29-40.
12. *Сайко А.П, Гусаков В.Е., Кузьмин В.С.*// Письма в ЖЕТФ.-1992.-**56**, вип. 8.-Ст.425-428.
13. *Müller K.A.* // Z. Phys. B.-1990.- **80**. - P. 193.
14. *Hirsch J.E., Tang S.* // Phys. Rev. B.-1989.- **40**. - P. 2179.
15. *Frick M., von der Linden W., Morgenstern I., de Raedt H.* // Z. Phys. B - Cond. Matt.- 1990.- **81**. - P. 327-335.
16. *Stasyuk I.V., Shvaika A.M.* // Acta Phys. Polon. A.- 1993.- **84**. - P. 293.
17. *L.M. Falicov, J.C. Kimball.*// Phys. Rev. Lett. - 1969.- **22**. - P. 997.
18. *Brandt U., Mielsch C.* // Z. Phys. B.- 1989.- **75**. - P.365; - 1989.- **79**. - P. 295; - 1989.- **82**. - P. 37.
19. *Freerics J.K.* // Phys. Rev. B. - 1993.- **47**. - P. 9263; - 1993.- **48**. - P. 14797.

20. *Letfulov B.M.* // Eur.Phys. J. B. - 1998.- **4**. - P. 447; - 1999.- **11**. - P. 423.
21. *Freericks J.K., Gruber Ch., Macris N.* // Phys. Rev. B.- 1999.- **60**. - P. 1617.
22. *Freericks J.K., Lemanski R.* // Phys. Rev. B. - 2000.- **61**. - P. 13438.
23. *Stasyuk I.V., Shvaika A.M., Schachinger E.* // Physica C. - 1993.- **213**. - P. 7.
24. *Stasyuk I.V., Shvaika A.M.* // Condens. Matter Phys. - 1994.- N 3. - P. 134-175.
25. *Stasyuk I.V., Havrylyuk Yu.*// Cond. Matter Phys.- 1999.- **2**. - P. 487.
26. *Stasyuk I.V., Danyliv O.D.* // Phys.Stat.Sol.B. - 2000.- **219**. - P. 299.
27. *Stasyuk I.V., Shvaika A.M.* // J. Phys. Stud.- 1999.- **3**. - P. 177.
28. *Stasyuk I.V., Shvaika A.M., Tabunshchyyk K.V.* // Cond. Matter Phys.- 1999.- **2**, P. 109; // Ukrainian Journal of Physics. - 2000.- **45**. - P. 520.
29. *Stasyuk I.V., Mysakovych T.S.* // J. Phys. Studies. - 2001.- **5**. - P. 268.
30. *Stasyuk I.V., Mysakovych T.S.* // Cond. Matter Phys. -2002.- **5**, N 3. - P. 473 - 491.
31. *Stasyuk I.V., Mysakovych T.S.* // Acta Phys. Pol. B. -2003.- **34**, N 2. - P. 765 - 769.
32. *Anderson P.W.*// J. Phys. Chem. Solids -1959.-**11**. - P. 26.
33. *Owen C.S., Scalapino D.J.*// Physica -1971.-**55**. - P. 691 - 695.

Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (<http://www.icmp.lviv.ua/>)

Тарас Степанович Мисакович
Ігор Васильович Стасюк

НАДПРОВІДНІСТЬ В ПСЕВДСПІН-ЕЛЕКТРОННІЙ МОДЕЛІ

Роботу отримано 22 травня 2003 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу квантової статистики

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені