УДК 53.01, 538.955, 538.915

Роль четырехспинового обмена в магнитном механизме сверхпроводимости в купратах

Александр В. Шнуренко*
Институт инженерной физики и радиоэлектроники,
Сибирский федеральный университет,
Свободный, 79, Красноярск, 660041,
Россия

Сергей Г. Овчинников†
Институт физики им. Л.В.Киренского СО РАН,
Академгородок, 50/38, Красноярск, 660036,
Россия

Елена И. Шнейдер‡
Сибирский государственный аэрокосмический университет,
им. ак. М.Ф.Решетнева,
Красноярский рабочий, 31, Красноярск, 660014,
Россия

Получена 18.09.2010, окончательный вариант 25.11.2010, принята к печати 10.12.2010

Поправки к обменному взаимодействию могут изменять температуру сверхпроводящего перехода, поэтому на основе численного самосогласованного решения системы двух уравнений в рамках t–J-модели мы исследуем влияние четырехспинового обмена на концентрационную зависимость температуры перехода в сверхпроводящую фазу с $d_{x^2-y^2}$ *— типом симметрии параметра порядка.*

Ключевые слова: сильные электронные корреляции, модель Хаббарда, t–J-модель.

Принято считать [1–3], что сильные электронные корреляции (СЭК) играют существенную роль в механизме высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП). Одной из центральных моделей, отражающих СЭК, является модель Хаббарда [4], содержащая в простейшем случае два энергетических параметра: интеграл электронного перескока t между ближайшими узлами и энергию кулоновского отталкивания U двух электронов, находящихся на одном узле с противоположными проекциями спиновых моментов (двойки). В режиме СЭК выполняется неравенство $U \gg |t|$. При электронных концентрациях $n<1$ переходят к описанию модели Хаббарда в усеченном гильбертовом пространстве, не содержащем двоек.

При построении эффективного гамильтониана из модели Хаббарда, помимо обычного гейзенберговского обменного слагаемого с $J = {}^{2t^2}/_{U}$, который получается при выводе t–J-модели, делаем унитарное преобразование, где учитываем поправки в четвертом порядке теории возмущений, порождающие четырехспиновый кольцевой обмен. Необходимость учета четырехспинового обмена видна в экспериментах по нейтронному рассеиванию [5], т.к. это слагаемое дает правильное описание закона дисперсии магнонов в недопированном антиферромагнетике.

Гамильтониан в представлении Гейзенберга для четырехспинового обменного взаимодействия выглядит согласно рис.1.

*hunting@inbox.ru
†sgo@iph.krasn.ru
‡shneyder@iph.krasn.ru

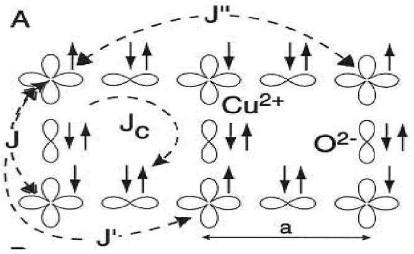

Рис. 1. Медно-кислородная плоскость атомных орбиталей (с симметрией для Cu–$d_{x^2-y^2}$ и для O–$2p_{x,y}$), вовлеченных в магнитные взаимодействия. Jc — 4-спиновый кольцевой обмен. Стрелочки показывают спины валентных электронов, вовлеченных в обмен [5]

$$H_4 = J_c \sum_{\langle i,j,k,l\rangle} \Big\{ \left(\tilde S_i \tilde S_j\right)\left(\tilde S_k \tilde S_l\right) + \left(\tilde S_i \tilde S_l\right)\left(\tilde S_k \tilde S_j\right) - \left(\tilde S_i \tilde S_k\right)\left(\tilde S_j \tilde S_l\right)\Big\}, \tag{1}$$

где $\tilde S_i$ — это перенормированный вектор S на узлах i, j.

Эффективный гамильтониан t-J-модели [6, 7], проецируя на пространство состояний, описывающих нижнюю хаббардовскую подзону, записываем в виде суммы гамильтонианов, описывающих собственное значение энергии. Кинетический член описывает перескоки электронов по узлам решетки с матричным элементом t при условии, что на одном узле не может быть больше одного электрона. Гейзенберговский обменный член описывает эффективное обменное взаимодействие электронов на соседних узлах с обменным интегралом $J = \dfrac{2\cdot t^2}{U}$. И добавляем гамильтониан с четырехспиновым обменным взаимодействием.

Эффективный гамильтониан в представлении X-операторов:

$$\begin{aligned} H = &\sum_{f,\sigma} (\varepsilon-\mu) x_f^{\sigma\sigma} + \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} x_i^{\sigma 0} x_j^{0\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{i,j,\sigma,\bar\sigma} J_{ij} (x_i^{\sigma\bar\sigma} x_j^{\bar\sigma\sigma} - x_i^{\sigma\sigma} x_j^{\bar\sigma\bar\sigma}) + \\ &+ \frac{1}{2}\{ \sum_{\substack{<i,j,k,l> \\ \sigma,\bar\sigma}} J_c [(x_i^{\sigma\bar\sigma} x_j^{\bar\sigma\sigma} - x_i^{\sigma\sigma} x_j^{\bar\sigma\bar\sigma}) < \tilde S_k \tilde S_l > + (x_i^{\sigma\bar\sigma} x_l^{\bar\sigma\sigma} - x_i^{\sigma\sigma} x_l^{\bar\sigma\bar\sigma}) < \tilde S_k \tilde S_j > - \\ &- (x_i^{\sigma\bar\sigma} x_k^{\bar\sigma\sigma} - x_i^{\sigma\sigma} x_k^{\bar\sigma\bar\sigma}) < \tilde S_l \tilde S_j > \;]\}\,, \end{aligned} \tag{2}$$

где $< \tilde S_l \tilde S_j >$ и $< \tilde S_k \tilde S_j >$ — спиновые перенормированные корреляторы.

Для исследования одновременного влияния магнитных корреляций и четырехспиновых взаимодействий на условия реализации $d_{x^2-y^2}$-сверхпроводимости воспользуемся методом неприводимых функций Грина, построенных на операторах Хаббарда. Схема расчета обычна для метода неприводимых функций Грина [8, 9], где проводится линеаризация уравнения с введением аномальной и нормальной функций. В функции Грина $\langle\langle X_f^{0\sigma} | X_g^{\sigma 0}\rangle\rangle$ выделяем нормальные средние в приближении Хаббард-1 и аномальные средние с $d_{x^2-y^2}$ симметрией, составляем уравнение движения в узельном представлении. После перехода в квазиимпульсное представление получается замкнутая система уравнений, аналогичная уравнениям Горькова. Разрешаем эти уравнения и применяем спектральную теорему, обычным образом приходим к перенормированному уравнению самосогласования для сверхпроводящего параметра порядка Δ_k с учетом четырехспинового обмена:

$$\Delta_k = \frac{1}{N} \sum_p \tilde J(\gamma_1(k+p) + \gamma_1(k-p) \frac{\Delta_p}{2E_p} \operatorname{th} \frac{E_p}{2kT}, \tag{3}$$

где ренормированное обменное взаимодействие

$$\tilde{J} = \left(\frac{1-x}{2} J + (1-x) J_c \tilde{S}_{01} \right). \tag{4}$$

Здесь зависимость от волнового вектора описывается функцией $\gamma_1(p) = \sum\limits_{h_1} e^{i\vec{h}_1 p}$, вектор $\overrightarrow{h_1}$ соединяет ближайших соседей.

Для сравнения приведем уравнение на энергетическую щель для t-J модели:

$$\Delta_k = \frac{1}{N} \sum_p \left(J(k+p) + J(k-p) \right) \frac{\Delta_p}{2E_p} \operatorname{th} \frac{E_p}{2kT}. \tag{5}$$

В итоге получено уравнение на температуру сверхпроводящего перехода:

$$1 = \tilde{J} \frac{1}{N} \sum_p (\frac{(\cos p_x - \cos p_y)^2}{E_p} \operatorname{th} \frac{E_p}{2kT_c} \tag{6}$$

Запишем также уравнение на химический потенциал:

$$\frac{1-x}{2} = \frac{1}{N} \sum_k F_{o\sigma} f_F(\xi_k). \tag{7}$$

Численное решений этих уравнений позволяет вычислить значения зависимости температуры сверхпроводящего перехода от допирования, используя конкретные значения корреляторов [10]. Тем самым определяются ренормировки энергетического спектра за счет магнитных флуктуаций и их влияние на температуру сверхпроводящего перехода.

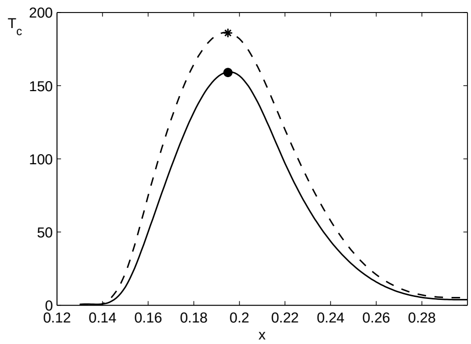

Рис. 2. Зависимость критической температуры от концентрации для t–J-модели (график пунктир) и для t–J-модели с учетом четырехспинового слагаемого (график сплошная)

Как видно из графиков зависимости (рис. 2), четырехспиновое обменное слагаемое влияет на перенормировку значения критической температуры примерно на 15 %. Без учета четырехцентрового слагаемого максимум температуры имел значение, равное 182 K. А с учетом четырехцентрового слагаемого критическая температура равняется 156 K.

Итоги

Получена система самосогласованных уравнений, определяющих температуру сверхпроводящего перехода и химический потенциал.

Показано, что учет четырехспинового кольцевого слагаемого приводит к перенормировке константы связи, уменьшая ее, что вызывает существенное уменьшение области реализации сверхпроводящей фазы с типом симметрии параметра порядка.

Критическая температура при учете кольцевого обмена понижается по сравнению с температурой, которая определяется обычным гейзенберговским обменом.

Список литературы

[1] P.W.Anderson, *Science*, **235**(1987), 1196.

[2] N.M.Plakida, High-Temperature Superconductivity, Springer, Berlin, 1995.

[3] С.Г.Овчинников, *УФН*, **167**(1997), 1043.

[4] J.Hubbard, *Proc. Roy. Soc. A*, **276**(1963), 238.

[5] R.Coldea et al., *Physical Review Letters*, **86**(2001), №23.

[6] N.M.Plakida, V.S.Oudovenko, *Phys. Rev. B*, **59**(1999).

[7] Yu.A.Izuymov, B.M.Letfullov, *J. Phys: condens. Matter.*, **3**(1991), 5373.

[8] N.M.Plakida, V.Yu.Yushankhay, I.V.Stasyuk, *Physica C*, **787**(1989), 162–164.

[9] V.Yu.Yushankhay, N.M.Plakida, P.Kalinay, *Physica C*, **174**(1991), 401.

[10] M.M.Korshunov, S.G.Ovchinnikov, *The European Physical Journal B*, **57**(2007).

Role of Four-spin Exchange in a Magnetic Mechanism of Superconductivity in Cuprates

Alexander V. Shnurenko
Sergey G. Ovchinnikov
Elena I. Shneyder

Amendments to the exchange interaction can alter the superconducting transition temperature, so on the basis of numerical self-consistent solution of two equations in the framework of the tJ model, we investigate the influence of the four spin exchange on the concentration dependence of the transition temperature to the superconducting phase with $d_(x^2-y^2)$ *— the type of symmetry of the order.*

Keywords: strong electron correlation, Hubbard model, t-J model.