

**СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ СИЛЬНОКОРРЕЛИРОВАННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ  
ОКСИДОВ МЕДИ И РУТЕНИЯ В РАМКАХ  $t - J - I$ -МОДЕЛИ***Е. В. Кузьмин**Красноярский государственный университет  
660075, Красноярск, Россия**С. Г. Овчинников\*, И. О. Бакланов**Институт физики им. Л. В. Киренского  
Сибирского отделения Российской академии наук  
660036, Красноярск, Россия*

Поступила в редакцию 15 января 1999 г.

На основе анализа электронной структуры квазидвумерных оксидов меди и рутената  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  для их описания предложена  $t - J - I$ -модель с прямым ферромагнитным обменом  $I$ . Проанализированы возможные сверхпроводящие решения  $s$ -,  $p$ - и  $d$ -типов. Решения  $s$ -типа с синглетными спариваниями невозможны в режиме сильных электронных корреляций, решение  $p$ -типа соответствует триплетной сверхпроводимости и формируется вблизи ферромагнитной неустойчивости в рутенатах. Решение с  $d_{x^2-y^2}$ -симметрией вблизи антиферромагнитной неустойчивости соответствует оксидам меди. Обсуждается причина появления больших  $T_c \sim 100$  К в оксидах меди и малых  $T_c \sim 1$  К в рутенатах.

PACS: 74.72.-h

**1. ВВЕДЕНИЕ**

Уже в первых работах по исследованию сверхпроводимости в  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  [1] делались попытки сравнения с оксидами меди, основанные на общности структуры с  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ . В то же время величины  $T_c$  резко отличаются:  $T_c \sim 1$  К для рутенатов и  $T_c \sim 100$  К для купратов. Позже выявилось заметное различие магнитных и сверхпроводящих свойств. В то время как в купратах сверхпроводимость имеет место на фоне сильных антиферромагнитных флуктуаций, рутенаты близки к ферромагнитной неустойчивости [2]. Сверхпроводящее состояние в  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  имеет  $p$ -тип куперовских пар [3] в отличие от  $d$ -типа спаривания в купратах. Решения  $p$ -типа получены в рамках зонной теории для  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  [4]. Описанию сверхпроводимости в режиме сильных электронных корреляций в рамках модели Хаббарда и  $t - J$ -модели посвящено большое число работ, что отражено в [5, 6].

В настоящей работе предложена  $t - J - I$ -модель, позволяющая учитывать одновременно антиферромагнитные ( $J$ ) и ферромагнитные ( $I$ ) обменные взаимодействия. Исследуются три возможных типа сверхпроводящего состояния в рамках  $t - J - I$ -модели: синглетные  $s$ - и  $d$ -типа и триплетные  $p$ -типа. Помимо обычных уравнений са-

\*E-mail: sgo@post.krascience.rssi.ru

мосогласования для щели и химического потенциала, в режиме сильных электронных корреляций имеется дополнительное условие самосогласования (констрейн), исключающее двухчастичные состояния на одном узле. Этому условию не удовлетворяет решение  $s$ -типа, но удовлетворяют решения  $d_{x^2-y^2}$ - и  $p$ -типов. Константа связи состояний  $d$ -типа определяется в основном антиферромагнитным обменным взаимодействием, а для состояний  $p$ -типа — ферромагнитным обменным взаимодействием. Специфика зависимости щели от импульса в уравнениях для  $T_c$  приводит к  $T_c \sim 100$  К для спариваний  $d$ -типа и к  $T_c \sim 1$  К для спариваний  $p$ -типа при одинаковых по величине константах связи.

## 2. ГАМИЛЬТОНИАН $t - J - I$ -МОДЕЛИ

Гамильтониан  $t - J - I$ -модели записывается в виде

$$H = \sum_{f\sigma} (\varepsilon - \mu) X_f^{\sigma\sigma} - t \sum_{f\delta\sigma} X_f^{\sigma 0} X_{f+\delta}^{0\sigma} + J \sum_{f\delta} K_{f,f+\delta}^{(-)} - I \sum_{f\delta} K_{f,f+\delta}^{(+)} \quad (1)$$

$$K_{fm}^{(\pm)} = S_f S_m \pm \frac{1}{4} n_f n_m, \quad X_f^{\uparrow\uparrow} + X_f^{\downarrow\downarrow} + X_f^{00} = 1. \quad (2)$$

Гамильтониан (1) задан на решетке из  $N$  узлов ( $f, m$  — узлы решетки) с периодическими граничными условиями и с числом ближайших соседей  $z$ ,  $\delta$  — вектор, соединяющий ближайших соседей. Он описывает систему  $N_e$  электронов в подпространстве локальных состояний  $|0\rangle$  — дырки или пустые узлы решетки и  $|\sigma\rangle$  — одноэлектронные состояния с проекцией спина  $\sigma = \uparrow$  или  $\sigma = \downarrow$ , так что  $0 \leq N_e \leq N$ . В этом базисе состояния и переходы между ними описываются  $X$ -операторами Хаббарда  $X_f^{pq} = |p\rangle \langle q|$ , действующими на состояния  $|0\rangle$  и  $|\sigma\rangle$  (двойки автоматически исключены),  $S_f$  и  $n_f$  — операторы спина и числа частиц на узле  $f$ . Знаки в (1) выбраны так, что все параметры ( $t, J, I$ ) положительны. Энергия одноэлектронного уровня  $\varepsilon$  далее полагается равной нулю.

Антиферромагнитный обмен, как и в  $t - J$ -модели, есть косвенный катион-анион-катионный сверхобмен. Ферромагнитный обмен  $I$  имеет обычный для модели Гейзенберга вид и формируется прямым перекрытием катионных  $d$ -орбиталей соседних узлов. В купратах, где электронные состояния вблизи уровня Ферми образуются в основном  $(d_{x^2-y^2} - p) - \sigma$ -связью, прямым перекрытием можно пренебречь,  $J \gg I$ . Особенность электронной структуры  $Sr_2RuO_4$  в том, что вблизи поверхности Ферми состояния формируются  $(t_{2g} - p) - \pi$ -связью. В этом случае есть и косвенное 180-градусное катион-анион-катионное взаимодействие  $J$  и прямое перекрытие  $t_{2g}$ -орбиталей соседних катионов (рис. 1). Согласно правилам Гуденафа [7], антиферромагнитный обмен для  $Ru^{4+}$

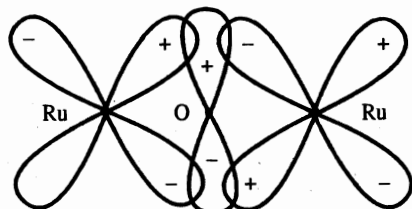


Рис. 1. Схема  $(d_{xy} - p) - \pi$ -связи в  $Sr_2RuO_4$

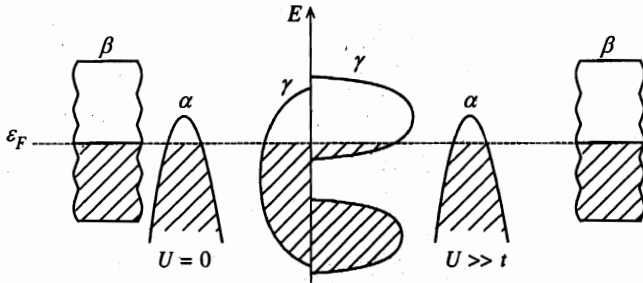


Рис. 2. Схема зонной структуры  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  в пределе свободных электронов ( $U = 0$ ) и в режиме сильных корреляций ( $U \gg t$ )

мал, так что модель с  $I > J$  соответствует  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ . Важность сильных электронных корреляций для купратов широко известна, а для рутената необходимость их учета видна из большой эффективной массы электронов  $\gamma$ -зоны, образованной  $d_{xy}$ -орбиталями,  $m \approx 12m_e$ , что получено в экспериментах по квантовым осцилляциям [8]. Согласно [9], именно  $\gamma$ -зона формирует сверхпроводящее состояние. Остальные  $d$ -орбитали рутената формируют дырочную  $\alpha$ - и электронную  $\beta$ -зоны, играющие в нашей модели роль резервуара электронов. Согласно зонным расчетам [10], число электронов в  $\gamma$ -зоне  $n_\gamma = 1.28$ . После расщепления  $\gamma$ -зоны на две хаббардовские подзоны вследствие учета сильных электронных корреляций нижняя подзона заполняется полностью одним электроном на атом, а верхняя будет частично заполнена «дополнительными» электронами (т. е. двойками) с концентрацией  $n_2 = 0.28$  (рис. 2). В силу симметрии дырка-двойка удобно перейти в дырочное представление: верхняя хаббардовская подзона с концентрацией двоек  $n_2$  эквивалентна нижней подзоне с той же концентрацией дырок  $n_0 = n_2$  или электронной концентрацией  $n = 1 - n_0$ .

Гамильтониан (1) описывает состояния в нижней хаббардовской подзоне. Он дает возможность рассмотреть два принципиально разных сценария поведения системы.

1. Если  $J > I$ , что имеет место для купратов, то при  $n = 1$  ( $n_0 = 0$ ) основное состояние обладает дальним антиферромагнитным (AF) порядком. Известно, что AF-состояние разрушается при достаточно малой концентрации дырок  $(n_0)_{AF} \sim 0.05$ . В области  $n_0 > (n_0)_{AF}$  возможно возникновение сверхпроводимости за счет антиферромагнитных ( $J$ ) обменных взаимодействий.

2. Если  $I > J$ , что имеет место для  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ , то при  $n = 1$  основное диэлектрическое состояние ферромагнитно ( $F$ ). При наличии дырок возникает конкуренция между насыщенным  $F$ -состоянием и нормальным (немагнитным)  $N$ -состоянием, химический потенциал которого ниже. В результате такой конкуренции при концентрациях электронов  $n < n_F$ , что эквивалентно концентрации дырок  $n_0 > (n_0)_F$ , система переходит в  $N$ -состояние, и в этой области также возможно возникновение сверхпроводимости за счет ферромагнитных ( $I$ ) обменных взаимодействий.

Гамильтониан (1) удобно отнормировать на полуширину исходной электронной зоны  $w = zt$ . После фурье-преобразования операторов Хаббарда

$$X_{k\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} X_{\mathbf{r}}^{0\sigma}, \quad X_{\mathbf{q}}^{\sigma\sigma'} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} X_{\mathbf{r}}^{\sigma\sigma'}, \quad (3)$$

где векторы  $\mathbf{k}, \mathbf{q}$  принадлежат первой зоне Бриллюэна, получаем гамильтониан модели

В ВИДЕ

$$H/zt \equiv h = h_{kin} + h_{int}, \quad (4)$$

$$h_{kin} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\omega_{\mathbf{k}} - \tilde{\mu}) X_{\mathbf{k}\sigma}^+ X_{\mathbf{k}\sigma}, \quad \omega_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{z} \sum_{\delta} e^{i\mathbf{k}\delta} = -\gamma_{\mathbf{k}}, \quad (5)$$

$$h_{int} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}\sigma} \gamma_{\mathbf{q}} \{g (X_{\mathbf{q}}^{\sigma\bar{\sigma}} X_{-\mathbf{q}}^{\bar{\sigma}\sigma} - X_{\mathbf{q}}^{\sigma\sigma} X_{-\mathbf{q}}^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}) - \lambda (X_{\mathbf{q}}^{\sigma\bar{\sigma}} X_{-\mathbf{q}}^{\bar{\sigma}\sigma} + X_{\mathbf{q}}^{\sigma\sigma} X_{-\mathbf{q}}^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}})\}, \quad (6)$$

где  $\bar{\sigma} = -\sigma$ ,  $g = J/t$ ,  $\lambda = I/t$  и  $\mu/zt = \tilde{\mu}$  — безразмерный химический потенциал. Гамильтониан  $h_{kin}$  (5) описывает кинетическую энергию электронов и составляет содержание модели Хаббарда при  $U = \infty$ .

### 3. УРАВНЕНИЯ ДВИЖЕНИЯ

Используя алгебру  $X$ -операторов, получаем уравнение движения для квазифермиевского оператора ( $\hbar = 1$ ):

$$i\dot{X}_{\mathbf{k}\sigma} = [X_{\mathbf{k}\sigma}, h] = (\omega_{\mathbf{k}} - \mu) X_{\mathbf{k}\sigma} + L_{\mathbf{k}\sigma}, \quad L_{\mathbf{k}\sigma} = L_{\mathbf{k}\sigma}^{(kin)} + L_{\mathbf{k}\sigma}^{(int)}, \quad (7)$$

$$L_{\mathbf{k}\sigma}^{(kin)} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{p}} \omega_{\mathbf{p}} (X_{\mathbf{k}-\mathbf{p}}^{\bar{\sigma}\sigma} X_{\mathbf{p}\bar{\sigma}} - X_{\mathbf{k}-\mathbf{p}}^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} X_{\mathbf{p}\sigma}), \quad (8)$$

$$L_{\mathbf{k}\sigma}^{(int)} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{p}} \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{p}} \{(\lambda - g) X_{\mathbf{k}-\mathbf{p}}^{\bar{\sigma}\sigma} X_{\mathbf{p}\bar{\sigma}} + g X_{\mathbf{k}-\mathbf{p}}^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} X_{\mathbf{p}\sigma} + \lambda X_{\mathbf{k}-\mathbf{p}}^{\sigma\sigma} X_{\mathbf{p}\sigma}\}, \quad (9)$$

где нелинейный оператор  $L_{\mathbf{k}\sigma}$  описывает корреляции электронов как с противоположными, так и с одинаковыми спиновыми проекциями.

Введем неприводимый оператор (см. [11])

$$\bar{L}_{\mathbf{k}\sigma} = L_{\mathbf{k}\sigma} - \frac{\langle\{L_{\mathbf{k}\sigma}, X_{\mathbf{k}\sigma}^+\}\rangle}{\langle\{X_{\mathbf{k}\sigma}, X_{\mathbf{k}\sigma}^+\}\rangle} X_{\mathbf{k}\sigma} - \frac{\langle\{L_{\mathbf{k}\sigma}, X_{-\mathbf{k}\bar{\sigma}}\}\rangle}{\langle\{X_{-\mathbf{k}\bar{\sigma}}^+, X_{-\mathbf{k}\bar{\sigma}}\}\rangle} X_{-\mathbf{k}\bar{\sigma}}^+, \quad (10)$$

обладающий свойством «ортогональности в среднем»:  $\langle\{\bar{L}_{\mathbf{k}\sigma}, X_{\mathbf{k}\sigma}^+\}\rangle = \langle\{\bar{L}_{\mathbf{k}\sigma}, X_{-\mathbf{k}\bar{\sigma}}\}\rangle = 0$ . Тогда уравнение (7) принимает вид

$$i\dot{X}_{\mathbf{k}\sigma} = \left(\omega_{\mathbf{k}} - \tilde{\mu} + \frac{C_{\mathbf{k}\sigma}}{1 - n_{\bar{\sigma}}}\right) X_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{\Delta_{\mathbf{k}\sigma}}{1 - n_{\bar{\sigma}}} X_{-\mathbf{k}\bar{\sigma}}^+ + \bar{L}_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (11)$$

где  $C_{\mathbf{k}\sigma} = \langle\{L_{\mathbf{k}\sigma}, X_{\mathbf{k}\sigma}^+\}\rangle$ ,  $\Delta_{\mathbf{k}\sigma} = \langle\{L_{\mathbf{k}\sigma}, X_{-\mathbf{k}\bar{\sigma}}\}\rangle$ .

Обобщенное приближение Хартри—Фока или приближение среднего поля соответствует линейной части уравнения (11), т. е. пренебрежению неприводимым оператором  $\bar{L}_{\mathbf{k}\sigma}$ . Именно в этом приближении мы будем исследовать вопрос о возможности появления сверхпроводимости. В уравнении (11)  $C_{\mathbf{k}\sigma}/(1 - n_{\bar{\sigma}})$  описывает перенормировку спектра, а  $\Delta_{\mathbf{k}\sigma}$  — возможную сверхпроводящую щель. Перенормировка спектра может

быть вычислена в общем виде, однако достаточно ограничиться приближением типа Хаббард I:

$$\xi_{k\sigma} = \omega_k - \tilde{\mu} + \frac{C_{k\sigma}}{1 - n_{\bar{\sigma}}} \approx (1 - n_{\bar{\sigma}})\omega_k - g n_{\bar{\sigma}} - \lambda n_{\sigma} - \tilde{\mu}.$$

В немагнитном основном состоянии,  $n_{\uparrow} = n_{\downarrow} = n/2$ , зависимость от проекции спина исчезает и модифицированный спектр представим в виде

$$\xi_k = c(n) (\omega_k - m), \quad m = \left[ (g + \lambda) \frac{n}{2} + \tilde{\mu} \right] / c(n), \quad c(n) = 1 - \frac{n}{2}, \quad (12)$$

где  $m$  — эффективный химический потенциал.

Выражение для щели  $\Delta_{k\sigma}$  имеет вид

$$\begin{aligned} \Delta_{k\sigma} = & \frac{1}{N} \sum_p \omega_p (\langle X_{-p\sigma} X_{p\bar{\sigma}} \rangle - \langle X_{-p\bar{\sigma}} X_{p\sigma} \rangle) + \\ & + \frac{1}{N} \sum_p \omega_{k-p} \{ (\lambda - g) \langle X_{-p\sigma} X_{p\bar{\sigma}} \rangle + g \langle X_{-p\bar{\sigma}} X_{p\sigma} \rangle \}. \end{aligned} \quad (13)$$

Введем аномальные средние

$$B_p = \langle X_{-p\downarrow} X_{p\uparrow} \rangle \quad (14)$$

и тогда, используя свойство симметрии  $\omega_p = \omega_{-p}$ , получаем

$$\Delta_{-k\downarrow} = -\Delta_{k\uparrow} = \Delta_k, \quad \Delta_k = \frac{1}{N} \sum_p [2\omega_p - g(\omega_{k+p} + \omega_{k-p}) + \lambda\omega_{k+p}] B_p. \quad (15)$$

Первый член в (15) обусловлен кинематическими корреляциями электронов и происходит от кинетического члена в гамильтониане (так называемый кинематический механизм спаривания [12]), остальные — следствие обменных взаимодействий<sup>1)</sup>.

На основании уравнения (11) (с отброшенным неприводимым оператором  $\bar{L}_{k\sigma}$ ) и соотношений (12), (15) получаем в приближении среднего поля систему уравнений

$$\begin{cases} i\dot{X}_{k\uparrow} = \xi_k X_{k\uparrow} - \frac{\Delta_k}{c(n)} X_{-k\downarrow}^+, \\ i\dot{X}_{-k\downarrow}^+ = -\xi_k X_{-k\downarrow}^+ - \frac{\Delta_k^*}{c(n)} X_{k\uparrow}. \end{cases} \quad (16)$$

<sup>1)</sup> Следует отметить, что в книге [5] для  $t$ - $J$ -модели диаграммным методом получено аналогичное выражение для щели, в котором, однако, под знаком суммы фигурирует (в наших обозначениях)  $-g\omega_{k-p}$  вместо симметричной по импульсу  $p$  комбинации  $-g(\omega_{k+p} + \omega_{k-p})$  в формуле (15). Это расхождение имеет свои следствия, обсуждение которых мы проведем несколько позже (в разд. 6).

#### 4. СРЕДНИЕ И УРАВНЕНИЯ САМОСОГЛАСОВАНИЯ

Для двухвременных запаздывающих антикоммутирующих функций Грина [11] на основании (16) получаем систему уравнений и ее решение :

$$\langle\langle X_{k\uparrow} | X_{k\uparrow}^+ \rangle\rangle_E = c(n) \frac{E + \xi_k}{E^2 - E_k^2}, \quad \langle\langle X_{-k\downarrow}^+ | X_{k\uparrow}^+ \rangle\rangle_E = -\frac{\Delta_k^*}{E^2 - E_k^2}, \quad (17)$$

где

$$E_k^2 = \xi_k^2 + \frac{|\Delta_k|^2}{c^2(n)}. \quad (18)$$

По спектральной теореме [11] находим средние:

$$n_k = \langle X_{k\uparrow}^+ X_{k\uparrow} \rangle = \langle X_{k\downarrow}^+ X_{k\downarrow} \rangle = \frac{1}{2} c(n) \left[ 1 - \frac{\xi_k}{E_k} \operatorname{th} \frac{E_k}{2\tau} \right] \equiv c(n) f_k, \quad (19)$$

$$B_k^* = \langle X_{k\uparrow}^+ X_{-k\downarrow}^+ \rangle = \frac{\Delta_k^*}{2E_k} \operatorname{th} \frac{E_k}{2\tau}, \quad (20)$$

где  $E_k > 0$ ,  $\tau = k_B T / zt$  — безразмерная температура.

В сверхпроводящей фазе имеем три уравнения самосогласования.

1. Взаимосвязь концентрации электронов  $n$  с эффективным химическим потенциалом  $m$

$$n = \frac{1}{N} \sum_{k\sigma} n_{k\sigma} = 2c(n) \frac{1}{N} \sum_k f_k, \quad f_k = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\xi_k}{E_k} \right), \quad (21)$$

где  $f_k$  — функция распределения (19) при  $T = 0$ .

2. Условие констрейна или правило сумм для аномальных средних (запрет на появление «двоек» как следствие алгебры  $X$ -операторов)

$$\frac{1}{N} \sum_k B_k = \frac{1}{N} \sum_k B_k^* = 0. \quad (22)$$

3. Уравнение для энергетической щели  $\Delta_k$  (см. далее), которое имеет смысл только при выполнении условия (22).

Предварительно необходимо рассмотреть возможные несверхпроводящие состояния системы.

*N-состояние.* Рассмотрим вначале нормальную (немагнитную) фазу или  $N$ -состояние ( $\Delta_k \equiv 0$ ). Функция распределения  $f_k$  превращается в ферми-ступеньку  $f_k^0 = \theta(m - \omega_k)$ , а уравнение (21) приводится к виду

$$\frac{n}{2-n} = \frac{1}{N} \sum_k \theta(m - \omega_k) = \int_{-1}^m \rho(\omega) d\omega \equiv g(m), \quad (23)$$

где  $\rho(\omega) = \rho(-\omega)$  — плотность состояний, соответствующая закону дисперсии  $\omega_k$ . Энергия системы (на узел решетки) равна

$$\epsilon_0 = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \omega_{\mathbf{k}} \left(1 - \frac{n}{2}\right) f_{\mathbf{k}}^0 - \frac{1}{4}(g + \lambda) n^2 = (2 - n) \int_{-1}^m \omega \rho(\omega) d\omega - \frac{1}{4}(g + \lambda) n^2. \quad (24)$$

*F-состояние.* В модели  $U = \infty$  ( $J = 0$ ) в области достаточно высоких концентраций  $n > n_F(\lambda)$  устанавливается дальний ферромагнитный ( $F$ ) порядок. Эта критическая концентрация легко находится в результате сравнения энергий насыщенного ферромагнитного  $\epsilon_F(n, \lambda)$ - и нормального  $\epsilon_0(n, \lambda)$ -состояний. Энергия  $F$ -состояния (на узел решетки) равна

$$\epsilon_F(n, \lambda) = v(m_F) - \frac{1}{2}\lambda n^2, \quad n = g(m_F) = \int_{-1}^{m_F} \rho(\omega) d\omega, \quad v(m_F) = \int_{-1}^{m_F} \omega \rho(\omega) d\omega, \quad (25)$$

где  $m_F$  — химический потенциал в  $F$ -состоянии,  $n$  — концентрация электронов. Из сопоставления энергий  $N$ - и  $F$ -состояний находим  $n_F(\lambda)$ . Например, для квадратной решетки  $n_F \approx 0.91$  при  $\lambda = 0.3$  и с ростом  $\lambda$  область существования основного  $F$ -состояния расширяется: при  $\lambda = 1$  имеем  $n_F \approx 0.6$ . Аналогичная ситуация имеет место и в трехмерном случае.

*AF-состояние.* При  $J \gg I$  и  $n \rightarrow 1$  система обладает дальним антиферромагнитным ( $AF$ ) порядком. Как уже указывалось в разд. 2,  $AF$ -состояние разрушается при достаточно малой концентрации дырок  $n_0 \sim 0.05$  [5, 6] и более детально мы его здесь не обсуждаем.

## 5. СИММЕТРИЙНЫЕ СВОЙСТВА АНОМАЛЬНЫХ СРЕДНИХ И РЕШЕНИЙ ДЛЯ ЩЕЛИ

Проанализируем структуру и симметричные свойства аномальных средних  $B_{\mathbf{k}}$  и щели  $\Delta_{\mathbf{k}}$ . Аномальные средние  $B_{\mathbf{p}} \equiv \langle X_{-\mathbf{p}\downarrow} X_{\mathbf{p}\uparrow} \rangle$  представим в виде

$$B_{\mathbf{k}} = B_{\mathbf{k}}^{(s)} + B_{\mathbf{k}}^{(a)}, \quad B_{\mathbf{k}}^{(s)} = \frac{1}{2}(B_{\mathbf{k}} + B_{-\mathbf{k}}) = B_{-\mathbf{k}}^{(s)}, \quad B_{\mathbf{k}}^{(a)} = \frac{1}{2}(B_{\mathbf{k}} - B_{-\mathbf{k}}) = -B_{-\mathbf{k}}^{(a)}, \quad (26)$$

т.е. как сумму симметричной ( $s$ ) и антисимметричной ( $a$ ) частей. Сразу отметим, что правило сумм (22) для антисимметричной части  $B_{\mathbf{k}}^{(a)}$  выполняется автоматически. После обратного фурье-преобразования для симметричной части получаем

$$(B_{\mathbf{k}}^{(s)})^* = \frac{1}{2} \langle X_{\mathbf{k}\uparrow}^+ X_{-\mathbf{k}\downarrow}^+ + X_{-\mathbf{k}\downarrow}^+ X_{\mathbf{k}\uparrow}^+ \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{f}} \langle Z_{\mathbf{f},\mathbf{f}+\mathbf{r}}^+ \rangle, \quad (27)$$

$$Z_{\mathbf{m}}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( X_{\mathbf{f}}^{\uparrow 0} X_{\mathbf{m}}^{\downarrow 0} + X_{\mathbf{m}}^{\uparrow 0} X_{\mathbf{f}}^{\downarrow 0} \right) = Z_{\mathbf{m}\mathbf{f}}^+, \quad (28)$$

где  $Z_{\mathbf{m}}^+$  — оператор рождения синглетной пары на произвольной паре узлов  $\mathbf{f}$  и  $\mathbf{m}$ . Таким образом, симметричная часть аномального среднего соответствует синглетным спариваниям.

Аналогично для антисимметричной части получаем

$$(B_{\mathbf{k}}^{(a)})^* = \frac{1}{2} \langle X_{\mathbf{k}\uparrow}^+ X_{-\mathbf{k}\downarrow}^+ - X_{-\mathbf{k}\downarrow}^+ X_{\mathbf{k}\uparrow}^+ \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{f}} \langle T_{\mathbf{f},\mathbf{f}+\mathbf{r}}^+ \rangle, \quad (29)$$

$$T_{fm}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( X_f^{\uparrow 0} X_m^{\downarrow 0} - X_m^{\uparrow 0} X_f^{\downarrow 0} \right) = -T_{mf}^+, \quad (30)$$

где  $T_{fm}^+$  — оператор рождения триплетной пары с  $S^z = 0$  на произвольной паре узлов  $f$  и  $m$ . Таким образом, антисимметричная часть аномального среднего соответствует триплетным спариваниям.

Рассмотрим две альтернативные решетки — квадратную ( $d = 2$ ) и простую кубическую ( $d = 3$ ), для которых

$$\gamma_k = \frac{1}{d} \sum_j^d \cos k_j, \quad \omega_k = -\gamma_k \quad (31)$$

(параметр решетки  $a = 1$ ). Введем функции

$$C_j = \frac{1}{N} \sum_p \cos p_j B_p^{(s)}, \quad S_j = \frac{1}{N} \sum_p \sin p_j B_p^{(a)}. \quad (32)$$

Поскольку

$$\gamma_{k \pm p} = \frac{1}{d} \sum_j^d (\cos k_j \cos p_j \mp \sin k_j \sin p_j),$$

щель (15) представима в виде

$$\begin{aligned} \Delta_k &= \Delta_k^{(s)} + \Delta_k^{(a)}, \\ \Delta_k^{(s)} &= 2\Delta_0 + (2g - \lambda) \frac{1}{d} \sum_j^d \cos k_j C_j, \quad \Delta_0 = \frac{1}{N} \sum_p \omega_p B_p^{(s)}, \\ \Delta_k^{(a)} &= \lambda \frac{1}{d} \sum_j^d \sin k_j S_j \end{aligned} \quad (33)$$

и содержит симметричную ( $s$ ) и антисимметричную ( $a$ ) по импульсам части. В выражение для спектра  $E_k$  (18) входит  $|\Delta_k|^2$  также со смешанной симметрией. Из общего физического требования к спектру  $E_k = E_{-k}$  следует  $|\Delta_k|^2 = |\Delta_{-k}|^2$ , что приводит либо к классу симметричных решений  $\Delta_k^{(s)} = \Delta_{-k}^{(s)}$  (синглетные спаривания), либо к классу антисимметричных  $\Delta_k^{(a)} = -\Delta_{-k}^{(a)}$  решений (триплетные спаривания).

В пределах каждого класса в принципе возможно несколько решений, каждое из которых соответствует определенной линейной комбинации косинусов (для симметричных решений) либо синусов (для антисимметричных решений). В общем случае будем нумеровать решения символом  $l$ , щель  $l$ -го типа обозначим как  $\Delta_{kl}$ , спектр (18) с такой щелью — через  $E_{kl}$ . Тогда выражение для аномальных средних принимает вид

$$B_{kl} = \frac{\Delta_{kl}}{2E_{kl}} \operatorname{th} \left( \frac{E_{kl}}{2\tau} \right), \quad E_{kl} = \sqrt{\xi_p^2 + \frac{|\Delta_{kl}|^2}{c^2(n)}}. \quad (34)$$

Обозначив соответствующую линейную комбинацию тригонометрических функций через  $\psi_l(\mathbf{k})$ , а безразмерный параметр взаимодействия, формирующий щель  $l$ -го типа, через  $\alpha_l$ , получаем следующие решения.



Симметричные решения  $s$ -типа (синглетные спаривания),  $l = 0$ :

$$\Delta_{k0} = (2 + \alpha\omega_k)\Delta_0, \quad \Delta_0 = \frac{1}{N} \sum_p \omega_p B_p^{(s)}, \quad \psi_0(\mathbf{k}) = \omega_k, \quad \alpha = 2g - \lambda. \quad (35)$$

Условие констрейна (22) для аномальных средних  $B_{k0}$  с щелью  $\Delta_{k0}$  не выполняется, и по этой причине решения  $s$ -типа отсутствуют. Отметим, что ранее неоднократно приводились уравнения для щели  $s$ -типа (см., например, [5]), однако условие констрейна не учитывалось.

Антисимметричные решения  $p$ -типа ( $l = 1$ ) и симметричные решения  $d$ -типа ( $l = 2$ ) можно представить в единой форме

$$\Delta_{kl} = \alpha_l \psi_l(\mathbf{k}) \Delta_l, \quad \Delta_l = \frac{1}{N} \sum_p \psi_l(\mathbf{p}) B_{pl}. \quad (36)$$

Из соотношений (34), (36) получаем уравнение для щели

$$\frac{1}{\alpha_l} = \frac{1}{N} \sum_p \frac{\psi_l^2(\mathbf{p})}{2E_{pl}} \operatorname{th} \left( \frac{E_{pl}}{2\tau} \right). \quad (37)$$

Решения имеют смысл только при выполнении правила сумм (22), которое при  $T = 0$  записывается в виде

$$\frac{1}{N} \sum_p \frac{\psi_l(\mathbf{p})}{E_{pl}} = 0. \quad (38)$$

В явном виде имеем следующие типы решений.

1. Антисимметричные решения  $p$ -типа (триплетные спаривания),  $l = 1$ :

$$\psi_p(\mathbf{k}) = \frac{1}{d} \sum_j \sin k_j, \quad \alpha_p = \lambda. \quad (39)$$

2. Симметричные решения  $d$ -типа (синглетные спаривания),  $l = 2$ :

$$\psi_d(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} (\cos k_x - \cos k_y), \quad \alpha_d \equiv \alpha = 2g - \lambda \quad (40)$$

для квадратной решетки.

Для решений  $p$ -типа правило сумм выполняется автоматически, а его выполнение для решений  $d$ -типа (40) легко доказывается из симметричных свойств.

В заключение этого раздела рассмотрим симметричные свойства решений с общих позиций. Гамильтониан системы (1) записан через обменные операторы (2). Оператор  $K_{\mathbf{m}}^{(-)}$  имеет собственное значение  $(-1)$  при действии на синглетную пару и нулевое собственное значение на триплетной паре. Антиферромагнитный обмен ( $J > 0$ ,  $J/t = g > 0$ ) обеспечивает притяжение между электронами в синглетной паре и «не замечает» триплетные пары. По этой причине  $J$ -обмен вообще не принимает участия в формировании триплетной сверхпроводимости  $p$ -типа. Это обстоятельство в выражении для щели (15) отражает симметричный по импульсам вклад  $g(\gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{p}} + \gamma_{\mathbf{k}-\mathbf{p}})$ , что дает только симметричные решения, соответствующие синглетным спариваниям. В противоположность  $J$ -обмену ферромагнитный прямой обмен ( $I > 0$ ,  $I/t = \lambda > 0$ ) действует

на любые пары: оператор  $K_{\text{fm}}^{(+)}$  имеет собственное значение  $(+1/2)$  на триплетной паре и  $(-1/2)$  — на синглетной. С учетом знака в гамильтониане  $I$ -обмен приводит к притяжению между электронами в триплетной паре и только он ответствен за формирование триплетной сверхпроводимости  $p$ -типа. С другой стороны, поскольку в синглетном состоянии пары он приводит к отталкиванию, в этом случае возникает конкуренция обменных взаимодействий, что и отражено параметром  $\alpha = 2g - \lambda$ .

Наши уравнения для щели и  $T_c$  в приближении среднего поля совпадают по структуре с аналогичными уравнениями, полученными диаграммной техникой для  $X$ -операторов в  $t - J$ -модели [5, 6] при рассмотрении куперовской неустойчивости нормальной фазы.

### 6. СОПОСТАВЛЕНИЕ РЕШЕНИЙ $p$ - И $d$ -ТИПОВ

Запишем спектр  $E_{kl}$  в виде ( $l = p, d$ )

$$E_{kl} = c(n) \sqrt{(\omega_k - m)^2 + \psi_l^2(\mathbf{k})} D_l^2, \quad D_l^2 = \alpha_l^2 |\Delta_l|^2 / c^4(n) \quad (41)$$

и тогда из (37) получаем в явном виде уравнения для эффективной щели  $D_l$  как функции концентрации (химического потенциала) и безразмерной температуры  $\tau$ :

$$\frac{2c(n)}{\alpha_l} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}} \frac{\psi_l^2(\mathbf{p})}{\sqrt{(\omega_p - m)^2 + \psi_l^2(\mathbf{p})} D_l^2} \text{th} \left( \frac{c(n) \sqrt{(\omega_p - m)^2 + \psi_l^2(\mathbf{p})} D_l^2}{2\tau} \right) \quad (42)$$

и уравнения для критической температуры  $\tau_c^{(l)}$  (при  $\tau \rightarrow \tau_c^{(l)}$  щель  $D_l^2 \rightarrow 0$ ):

$$\frac{2c(n)}{\alpha_l} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}} \frac{\psi_l^2(\mathbf{p})}{|\omega_p - m|} \text{th} \left( \frac{c(n) |\omega_p - m|}{2\tau_c^{(l)}} \right) \quad (43)$$

По постановке задачи эти уравнения при  $l = d$  применимы для описания купратов, которые при соответствующей концентрации дырок (электронов) переходят из  $AF$ -состояния в сверхпроводящее ( $SC$ ) состояние с синглетными спариваниями  $d$ -типа, а при  $l = p$  они должны описать сверхпроводимость с триплетными спариваниями  $p$ -типа в  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ , который находится выше порога ферромагнитной устойчивости. Хотя безразмерные параметры взаимодействия  $\alpha_d = \alpha$  и  $\alpha_p = \lambda$  могут различаться по величине, тем не менее при их равенстве значения критических температур  $\tau_c^{(d)}$  и  $\tau_c^{(p)}$  существенным образом зависят от свойств функций  $\psi_d^2(\mathbf{k})$  (40) и  $\psi_p^2(\mathbf{k})$  (39).

**Результаты расчета.** Уравнения для эффективной щели (42) при  $\tau = 0$  и для критической температуры (43) были решены численно путем суммирования по импульсам  $\mathbf{p}$  в первой зоне Бриллюэна квадратной решетки (она содержала  $10^6$  значений  $\mathbf{p}$  и около 100 значений  $m$  в интервале от  $-1$  до  $+1$ ). Использовалась взаимосвязь между концентрацией  $n$  и эффективным химическим потенциалом  $m$  в нормальной фазе (23), т. е.

$$n = \frac{2g(m)}{1 + g(m)}, \quad g(m) = \int_{-1}^m \rho(\omega) d\omega, \quad (44)$$

где  $\rho(\omega)$  — плотность состояний. Для квадратной решетки:

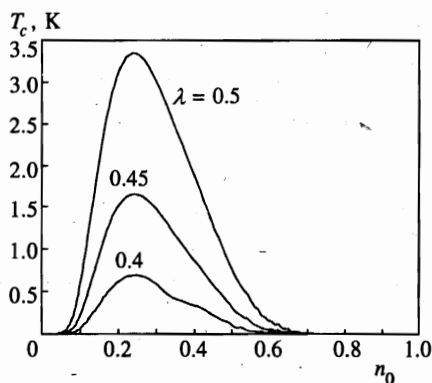


Рис. 3

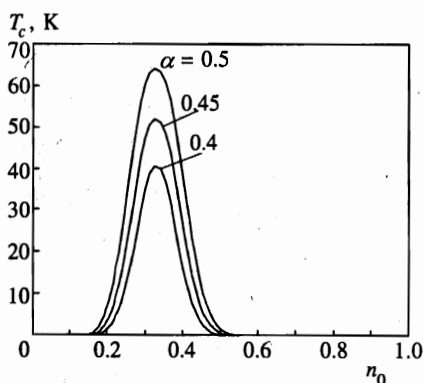


Рис. 4

Рис. 3. Концентрационная зависимость критической температуры  $T_c$  в  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  с триплетным спариванием  $p$ -типа,  $\lambda = I/t$ ,  $I$  — ферромагнитный обмен

Рис. 4. Концентрационная зависимость критической температуры  $T_c$  в оксидах меди с синглетным спариванием  $d$ -типа,  $\alpha = 2g - \lambda$ ,  $g = J/t$ ,  $J$  — антиферромагнитный обмен ( $J > I$ )

$$\rho(\omega) = \frac{2}{\pi^2} K \left( \sqrt{1 - \omega^2} \right) \approx \frac{1}{\pi} - \left( \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \right) \ln(|\omega|), \quad \int_{-1}^{+1} \rho(\omega) d\omega = 1, \quad (45)$$

где  $K$  — полный эллиптический интеграл первого рода. Результаты вычислений  $T_c = zt\tau_c$  представлены на рис. 3 и 4 для типичных величин параметров взаимодействия  $\lambda$  и  $\alpha$  как функции концентрации дырок. Мы осуществили «привязку» к экспериментальным данным по  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ . При малой концентрации доек в верхней хаббардовской подзоне  $n_2 = 0.28$  (они эквивалентны дыркам в нижней хаббардовской подзоне) закон дисперсии хорошо описывается квадратичным выражением  $\varepsilon(\mathbf{k}) = -ztc(n)\omega_{\mathbf{k}} \approx \varepsilon(0) + p^2/2m^*$ , где  $1/m^* = (4/3)ta^2/\hbar^2$  для концентрации  $n_2 \sim 1/3$ . Подставляя значение эффективной массы  $m^* \approx 12m_e$  и межатомного расстояния  $a = 1.93 \text{ \AA}$ , получаем  $t \sim 0.1 \text{ эВ}$  и  $zt \sim 0.4 \text{ эВ}$ . Максимальное значение  $\tau_c(n_0)$  в рамках нашей теории соответствует  $n_0 \sim 1/3$  и эффективному химическому потенциалу  $m = 0$ . Отметим, что рутенат в этом смысле является «самодопированным», так как концентрация  $n_2 = n_0 = 0.28$  близка к оптимальной по реализации максимума  $T_c$ . В купратах значение  $T_c$  зависит от степени допирования, которой соответствует дырочная концентрация  $n_0$ . Показателен тот факт, что при равенстве всех параметров (в том числе  $\alpha = \lambda$ ) критические температуры существенно различаются:  $T_c^{(d)} \gg T_c^{(p)}$ . Проанализируем причину этого различия.

**Анизотропия щели.** Функции  $\psi_p^2(\mathbf{k})$  и  $\psi_d^2(\mathbf{k})$  описывают анизотропию сверхпроводящей щели соответственно при спариваниях  $p$ - и  $d$ -типа. На рис. 5а изображена зона Бриллюэна квадратной решетки и изоэнергетическая поверхность  $\omega_{\mathbf{k}} = 0$  (квадрат ABCD). Если она соответствует химическому потенциалу  $m = 0$ , то состояния внутри нее в несверхпроводящей фазе при  $T = 0$  заполнены, что обозначено штриховкой. От-

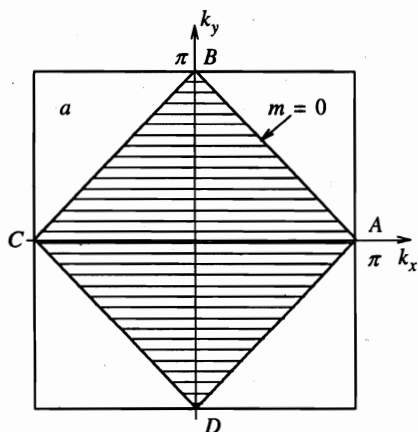
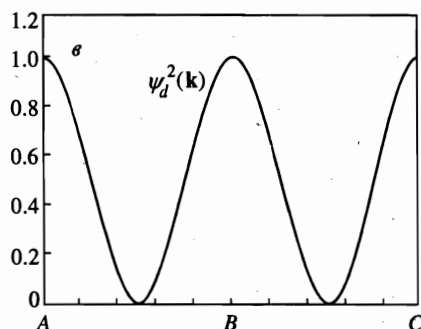
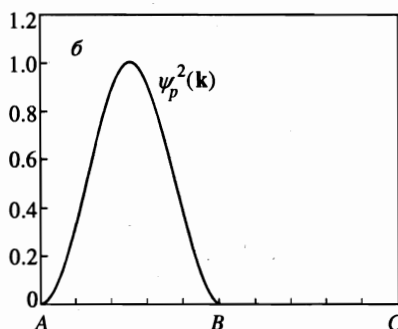


Рис. 5. Анизотропия щели на изоэнергетической поверхности  $\omega_{\mathbf{k}} = 0$  (квадрат  $ABCD$ ). а) Зона Бриллюэна квадратной решетки и заполненные состояния при химическом потенциале  $m = \omega_{\mathbf{k}} = 0$ . б) Анизотропия  $p$ -типа. в) Анизотропия  $d$ -типа (в обоих случаях поведение функций вдоль линий  $AB, CD$  и  $BC, DA$  одинаково)



метим, что для свободных электронов такое заполнение соответствует концентрации  $n = 1$ , для насыщенного  $F$ -состояния  $n = 1/2$ , а для рассматриваемого случая сильно-коррелированных электронов  $n = 2/3$  в соответствии с (44) и (45). Поведение функций  $\psi_p^2(\mathbf{k})$  и  $\psi_d^2(\mathbf{k})$  при  $\omega_{\mathbf{k}} = 0$  показано на рис. 5б и в. Щель «схлопывается» (обращается в нуль) не только в отдельных точках изоэнергетической поверхности ( $d$ -тип), но и на ее фрагментах  $BC$  и  $DA$  ( $p$ -тип). Аналогично можно исследовать анизотропные свойства щели для произвольной изоэнергетической поверхности.

**Средние значения функций  $p$ -и  $d$ -типа на изоэнергетических поверхностях.** Перейдем от суммирования по импульсам к интегрированию по изоэнергетическим поверхностям, соответствующим закону дисперсии  $\omega_{\mathbf{k}}$ . Пусть  $\omega_{\mathbf{k}} = \omega$  — уравнение изоэнергетической поверхности ( $-1 \leq \omega_{\mathbf{k}} \leq +1$ ). Тогда для функции  $A_{\mathbf{k}}$ , которая явно выражается через закон дисперсии  $\omega_{\mathbf{k}}$ , т. е. для  $A_{\mathbf{k}} = A(\omega_{\mathbf{k}})$ , имеем:

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} A(\omega_{\mathbf{k}}) = \int_{-1}^{+1} \rho(\omega) A(\omega) d\omega, \quad (46)$$

$$\rho(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \delta(\omega - \omega_{\mathbf{k}}) = \frac{1}{(2\pi)^d} \oint_{(\sigma_{\omega})} \frac{d\sigma_{\omega}}{|\nabla_{\mathbf{k}}\omega_{\mathbf{k}}|} = \frac{d}{d\omega} \left( \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{v_{\omega}} d^d\mathbf{k} \right). \quad (47)$$

Здесь  $\rho(\omega)$  — плотность состояний, соответствующая закону дисперсии  $\omega_{\mathbf{k}}$ ,  $\sigma_{\omega}$  — площадь  $(d-1)$ -мерной изоэнергетической поверхности,  $v_{\omega}$  —  $d$ -мерный объем  $\mathbf{k}$ -пространства, ограниченный изоэнергетической поверхностью  $\omega$  (объем элементарной ячейки  $a^d = 1$ ). В рассматриваемом двумерном случае (квадратная решетка)

$$\omega_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{2}(\cos k_x + \cos k_y), \quad |\nabla_{\mathbf{k}}\omega_{\mathbf{k}}| = \frac{1}{2}\sqrt{\sin^2 k_x + \sin^2 k_y}, \quad (48)$$

а плотность состояний (45) имеет логарифмическую особенность. К сожалению, фигурирующие в теории функции  $\psi_i^2(\mathbf{k})$  не выражаются в явном виде через  $\omega_{\mathbf{k}}$ , и по этой причине мы введем средние значения этих функций на изоэнергетической поверхности  $\omega_{\mathbf{k}} = \omega$ :

$$\langle \psi_i^2(\mathbf{k}) \rangle_{\omega_{\mathbf{k}}=\omega} \equiv \psi_i^2(\omega) = \frac{1}{(2\pi)^2} \oint_{(\sigma_{\omega})} \frac{\psi_i^2(\mathbf{k})}{|\nabla_{\mathbf{k}}\omega_{\mathbf{k}}|} d\sigma_{\omega}. \quad (49)$$

Следует отметить, что прямое суммирование по зоне Бриллюэна функций  $\psi_i^2(\mathbf{k})$  дает очевидный и одинаковый результат  $1/2d = 1/4$  и поэтому они должны удовлетворять интегральному условию

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \psi_i^2(\mathbf{k}) = \int_{-1}^{+1} \psi_i^2(\omega) d\omega = \frac{1}{4}. \quad (50)$$

Проанализируем свойства этих функций. Подынтегральное выражение для функции  $p$ -типа в (49)

$$\frac{\psi_p^2(\mathbf{k})}{|\nabla_{\mathbf{k}}\omega_{\mathbf{k}}|} = |\nabla_{\mathbf{k}}\omega_{\mathbf{k}}| + \frac{\sin k_x \sin k_y}{\sqrt{\sin^2 k_x + \sin^2 k_y}} \quad (51)$$

особенности не имеет и тогда

$$\psi_p^2(\omega) = \frac{1}{(2\pi)^2} \oint_{(\sigma_{\omega})} |\nabla_{\mathbf{k}}\omega_{\mathbf{k}}| d\sigma_{\omega} = \frac{2}{\pi^2} \left( E(\sqrt{1-\omega^2}) - \omega^2 K(\sqrt{1-\omega^2}) \right), \quad (52)$$

где  $E$  — полный эллиптический интеграл второго рода. Мы воспользовались симметричными свойствами, в силу которых второе слагаемое в (51) при интегрировании дает нуль. Функция (52) является гладкой и очень хорошо аппроксимируется выражением

$$\psi_p^2(\omega) = \frac{2}{\pi^2}(1 - |\omega|^{\nu}), \quad \nu = \frac{\pi^2}{16 - \pi^2} \approx 1.61. \quad (53)$$

Подынтегральное выражение для функции  $d$ -типа в (49)

$$\frac{\psi_d^2(\mathbf{k})}{|\nabla_{\mathbf{k}}\omega_{\mathbf{k}}|} = \frac{1}{2} \frac{(\cos k_x - \cos k_y)^2}{\sqrt{\sin^2 k_x + \sin^2 k_y}} \quad (54)$$

имеет особенности того же типа, что и плотность состояний (45). Вычисления приводят к следующему результату:

$$\psi_d^2(\omega) = (1 - \omega^2) \rho(\omega) - 2\psi_p^2(\omega). \quad (55)$$

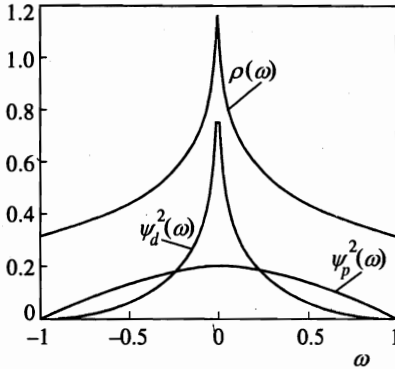


Рис. 6. Плотность электронных состояний в квадратной решетке  $\rho(\omega)$  и средние значения функций  $p$ - и  $d$ -типа на изоэнергетических поверхностях  $\omega$

Для сравнения функции  $\psi_p^2(\omega)$  и  $\psi_d^2(\omega)$  изображены на рис. 6, каждая нормирована интегральным условием на  $1/4$ .

**Критическая температура.** Обратимся теперь к уравнениям (43) для критической температуры. Переходим от суммирования по зоне Бриллюэна к интегрированию по изоэнергетическим поверхностям. Интеграл удобно разбить на две части: по достаточно узкому слою шириной  $2\delta$  в окрестности химического потенциала  $m$  и по остальной части зоны. Величину  $\delta$  всегда можно выбрать такой, чтобы аргумент гиперболического тангенса был больше 2.0, а сам тангенс с большой степенью точности был бы равен единице, т. е.  $c(n)\delta/2\tau_c \geq 2$ . Итак, имеем интегралы

$$\begin{aligned}
 I(m, \tau_c^{(l)}) &\approx \int_{-1}^{+1} \frac{\psi_l^2(\omega)}{|\omega - m|} \operatorname{th} \left( \frac{c(n)|\omega - m|}{2\tau_c^{(l)}} \right) d\omega = \\
 &= \int_{m-\delta}^{m+\delta} \frac{\psi_l^2(\omega)}{|\omega - m|} \operatorname{th} \left( \frac{c(n)|\omega - m|}{2\tau_c^{(l)}} \right) d\omega + \int_{-1}^{m-\delta} \frac{\psi_l^2(\omega)}{|\omega - m|} d\omega + \int_{m+\delta}^{+1} \frac{\psi_l^2(\omega)}{|\omega - m|} d\omega \equiv I_S^{(l)} + I_B^{(l)} \quad (56)
 \end{aligned}$$

с разбиением по слою ( $S$ ) и по внешней части зоны ( $B$ ).

**Триpletные спаривания  $p$ -типа.** Поскольку  $\psi_p^2(\omega)$  является гладкой и медленноменяющейся функцией, интеграл по слою в логарифмическом приближении равен

$$I_S^{(p)} = 2\psi_p^2(m) \ln(1.14 c(n) \delta / \tau_c^{(p)}), \quad (57)$$

где  $2\gamma/\pi = 1.14$ ,  $\gamma$  — постоянная Эйлера. Вычисляя интеграл по оставшейся части зоны  $I_B^{(p)}$ , решение уравнения (43) можно представить в виде

$$\tau_c^{(p)} \approx 1,14 c(n) \delta \exp \left[ - \frac{c(n)/\lambda - I_B^{(p)}/2}{\psi_p^2(m)} \right] = 1.14 c(n) \delta \exp \left[ - \frac{c(n)}{(\lambda + \lambda_B) \psi_p^2(m)} \right] \quad (58)$$

с условием  $\delta \gtrsim 2\tau_c^{(p)}/c(n)$ . Во второй форме записи решения по определению введено

$$\frac{c(n)}{\lambda} - \frac{I_B^{(p)}}{2} \equiv \frac{c(n)}{\lambda + \lambda_B}, \quad \lambda_B = \lambda^2 \frac{I_B^{(p)}}{2c(n) - \lambda I_B^{(p)}}, \quad (59)$$

где функция  $\lambda_B$  описывает эффект «зонного усиления» параметра  $\lambda$ . Так как  $\psi_p^2(m) \leq 0.2$ , то экспоненциальный множитель оказывается достаточно малым, что и приводит к низким значениям  $\tau_c^{(p)}$  для триплетной сверхпроводимости.

*Синглетные спаривания d-типа.* Как следует из (55) и рис. 6, функция  $\psi_d^2(\omega)$  резко меняется в окрестности  $\omega = 0$ . Поэтому в этой области интеграл по слою должен вычисляться с учетом логарифмической особенности  $\rho(\omega)$  при  $\omega \rightarrow 0$ . Ниже мы приводим оценку интеграла по слою, заменив плотность состояний  $\rho(\omega)$  ее средним значением  $\langle \rho(\omega, \delta) \rangle$  на интервале  $[\omega - \delta, \omega + \delta]$ . Тогда  $\psi_d^2(\omega) \rightarrow \langle \psi_d^2(\omega, \delta) \rangle$  и аналогично предыдущему случаю получаем

$$\tau_c^{(d)} \approx 1.14 c(n) \delta \exp \left[ -\frac{c(n)}{(\alpha + \alpha_B) \langle \psi_d^2(m, \delta) \rangle} \right], \quad (60)$$

с условием  $\delta \gtrsim 2\tau_c^{(d)}/c(n)$ . Здесь также введена по определению функция  $\alpha_B$ :

$$\frac{c(n)}{\alpha} - \frac{I_B^{(d)}}{2} \equiv \frac{c(n)}{\alpha + \alpha_B}, \quad \alpha_B = \alpha^2 \frac{I_B^{(d)}}{2c(n) - \alpha I_B^{(d)}}, \quad (61)$$

описывающая эффект зонного усиления параметра  $\alpha$ .

Представление решений в виде (58) и (60) удобно для сравнения с теорией сверхпроводимости БКШ, в которой

$$T_c \propto \exp(-1/N(\varepsilon_F)V),$$

где  $N(\varepsilon_F)$  — плотность состояний на фермиевском уровне,  $V$  — эффективное притяжение. Безразмерный параметр  $N(\varepsilon_F)V$  аналогичен выражениям нашей теории  $(\alpha + \alpha_B) \langle \psi_d^2(m, \delta) \rangle$  и  $(\lambda + \lambda_B)\psi_p^2(m)$ . По сравнению с триплетной сверхпроводимостью фигурирующая в экспоненте функция  $\langle \psi_d^2(m, \delta) \rangle$  велика по сравнению с  $\psi_p^2(m)$  в окрестности  $m = 0$ , что и обеспечивает при прочих равных условиях значительно большие значения  $\tau_c^{(d)}$ .

## 7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложенная  $t - J - I$ -модель позволяет исследовать сверхпроводимость сильнокоррелированных электронов с разной симметрией ( $s, p, d$ ) параметра порядка, что дает возможность сравнить ВТСП оксидов меди и сверхпроводимость рутената  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  с низкими  $T_c$  в рамках единого подхода. Приведенное выше сравнение дает ответ на вопрос, почему именно в слоистых оксидах меди наблюдается высокотемпературная сверхпроводимость с  $T_c \sim 100$  К. Специфика оксидов меди в свете наших результатов следующая: в двумерных  $\text{CuO}_2$  слоях за счет  $(d_{x^2-y^2} - p) - \sigma$ -связи и сильных электронных корреляций формируются квазичастицы, межатомные перескоки которых происходят на фоне сильных антиферромагнитных флуктуаций. Эти флуктуации приводят к спариванию  $d_{x^2-y^2}$ -типа, причем анизотропия щели такова, что в полной мере проявляется сингулярность ван Хофа, усиливающая обычный логарифмический вклад в уравнениях для  $T_c$  и параметра порядка.

Авторы благодарят Н. М. Плакиду за обсуждение результатов. Работа выполнялась при финансовой поддержке Федеральной целевой программы «Государственная

поддержка интеграции фундаментальной науки и высшего образования» (грант № 69) и Красноярского краевого фонда науки (грант 8F0032).

## Литература

1. Y. Maeno, H. Hasimoto, K. Yoshida, S. Nishizaki, T. Fujita, and F. Lichtenberg, *Nature* **372**, 532 (1994).
2. T. Oguchi, *Phys. Rev. B* **51**, 1385 (1995).
3. T. M. Rice and H. Sigrist, *J. Phys. Cond. Matter* **7**, L643 (1995).
4. I. I. Mazin and D. J. Singh, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 733 (1997).
5. Ю. А. Изюмов, М. И. Капнельсон, Ю. Н. Скрябин, *Магнетизм коллективизированных электронов*, Наука, Москва (1994).
6. Ю. А. Изюмов, *УФН* **167**, 465 (1997).
7. Д. Гуденаф, *Магнетизм и химическая связь*. Металлургия, Москва (1968).
8. A. P. Mackenzie, S. R. Julian, A. J. Diver et al., *Phys. Rev. Lett.* **76**, 3786 (1996).
9. T. M. Riseman, P. G. Kealey, E. M. Forgan, A. P. Mackenzie, L. M. Galvin, A. W. Tyger, S. L. Lee, C. Ages, D. McK. Paul, C. M. Aegerter, R. Cubitt, Z. Q. Hao, T. Akima, and Y. Maeno, *Nature* **396**, 242 (1998).
10. D. J. Singh, *Phys. Rev. B* **52**, 1358 (1995).
11. С. В. Тябликов, *Методы квантовой теории магнетизма*, Наука, Москва (1975).
12. Р. О. Зайцев, В. А. Иванов, *ФТТ* **29**, 2554 (1987).