Національний технічний університет України Київський політехнічний інститут

МОН України

*На правах рукопису*

**НАЗАРЕНКО Олександр Борисович**

УДК 538.9, 538.945

**ВИВЧЕННЯ НИЗЬКО ДОПОВАНОГО РЕЖИМУ ГЕЙЗЕНБЕРГОВСЬКОГО АНТИФЕРОМАГНЕТИКА ЗА ДОПОМОГОЮ ЧИСЕЛЬНИХ МЕТОДIВ ТА ДIАГРАМНОї ТЕХНIКИ**

01.04.07 - фізика твердого тіла

Автореферат

дисертації на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук

Київ - 2018

Дисертацією є рукопис (монографія).

Робота виконана в КПИ…

**Науковий консультант** науковий ступінь, вчене звання,

**(керівник) – ПРІЗВИЩЕ Ім’я По батькові,**

місце роботи,

посада.

**Офіційні опоненти:** науковий ступінь, вчене звання,

**ПРІЗВИЩЕ Ім’я По батькові,**

місце роботи,

посада;

науковий ступінь, вчене звання,

**ПРІЗВИЩЕ Ім’я По батькові,**

місце роботи,

посада;

науковий ступінь, вчене звання,

**ПРІЗВИЩЕ Ім’я По батькові,**

місце роботи,

посада.

Захист відбудеться «\_\_\_» *20 року о*  *годині* на засіданні спеціалізованої вченої ради …

З дисертацією можна ознайомитися в бібліотеці …

Автореферат розісланий «\_\_\_\_»\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_*20\_\_\_\_ року.*

**Вчений секретар**

**спеціалізованої вченої ради ПРІЗВИЩЕ И.П.**

У **вступі** ми перш за все описуємо основні напрямки досліджень, на яких побудована ця дисертація, а також аналізуємо їх зв’язок з дослідженнями інших авторів та тенденціями сучасної теорії твердого тіла. Ми також формулюємо головні цілі та окремі проблеми, які розглянуті в дисертації.

За останні роки високотемпературна надпровідність перетворилась на окрему самостійну галузь фізики твердого тіла. Швидкий розвиток цієї галузі фізики твердого тіла був обумовлений такими причинами. Перш за все це експериментальне відкриття надпровідності купратів. Ці результати відразу захопили не тільки фізиків, але і науковців, що працюють у суміжних науках, своїми новими ідеями та новим підходом до властивостей системи багатьох частинок.

Незважаючи та те, що перші експериментальні результати були отримані більше ніж 30 років тому назад, ще і досі не існує теорії, котра давала би картину цього явища і була би в змозі передбачати нові властивості високотемпературних надпровідників. Ця обставина пов’язана, безумовно, з надто складним станом систем, в яких було знайдено високотемпературну надпровідність.

Спроби отримати результати за допомогою методів комп’ютерної фізики також не привели до прогресу, бо навіть найкращі сучасні комп’ютери не в змозі обробити навіть найпростіші моделі.

За цих обставин нові ідеї, навіть до певного ступеня інтуїтивні, залишаються важливими для вивчення властивостей високо температурних надпровідників як з теоретичної так і з експериментальної точки зору.

Вивчення розсіювання повільних нейтронів показало, що недодоповані купрати в антиферомагнітному стані можуть мати металевий основний стан. Нагадаємо, що підхід на основі зонної теорії забороняє металевий стан як основний стан для антиферомагнетиків. Як відомо, антиферомагнітний стан досить швидко знищується при допіюванні купратів, але як показано, в купратах існують сильні антиферомагнітні флуктуації із зростанням допінгу і залишаються навіть тоді, коли концентрація домішок досягає свого оптимального (для надпровідності) значення в 15% за концентрацією. Ці антиферомагнітні флуктуації призводять то того, що основний стан допованого купрата суттєво відрізняється від основного стану звичайних металів, властивості котрих описуються за допомогою теорії Ферми рідини Ландау, I потребує принципово нового підходу до опису фізичних характеристик як нормального так i надпровiдного стану.

Нещодавно, експериментальні данні привели ще до одного “сюрпризу”: зменшенню приблизно в десять разів ширини зони квазічастинок, існуванню великої плоскої області в законі дисперсії квазічастинок та “тіньової” зони. Це вказує на те, що відстань у просторі між антиферомагнітними флуктуаціями мала.

Симетрія , незвичайна для низькотемпературних надпровідників, отримала повне експериментальне підтвердження у випадку високотемпературних надпровідників. В цій дисертації запропоновані нові ідеї, котрі дають можливість описати властивості малодопованих купратів. Наближення, що розвивається у дисертації, ми називаємо антиферомагнітним сценарієм Ван Хова (відомому в літературі як Dagotto-Nazarenko-Moreo або DNM модель). Наша модель ґрунтується з одного боку на феноменологічному опису купратів, а також використанні комп’ютерних чисельних розрахунків в рамках мікроскопічної  з іншого боку. Ця модель є моделлю для сильно скорельованої електронної системи. Було показано, що вона правильно описує головний структурний елемент всіх купратів, а саме поведінку при низьких енергіях електронів площини . В моделі  рух дірок в локальному антиферомагнітному оточенні коректно описує такі явища: зменшення ширина зони на або ; можливість існування “тіньової” зони; присутність плоских частинок поверхні Фермі, а головне, тенденції дух дірок до об’єднання в пару.

Ми покажемо, що базова  модель з симетрією щілини в купратах відіграє таку ж саму роль як модель Хабарда з від’ємним у випадку надпровідників, щілина котрих має симетрію.

В цьому наближенні ми вивчили властивості купратів як в нормальному стані, так і в надпровідному стані. Було показано, що існує досить добре погодження між нашими теоретичними результатами та експериментальними спостереженнями інших авторів. И застосували ці ідеї для вивчення тривимірних () антиферомагнетиків з урахуванням двох сусідніх шарів . Для вивчення руху дірок було використане самоузгоджене Борнівське наближення в кожній окремий площині. Ми також провели детальні чисельні розрахунки в моделі сильно зв’язаних електронів із застосуванням самоузгодженої діаграмної техніки та провели аналіз результатів розрахунків щодо стабільності результатів відносно внесення домішок.

У цьому ж розділі ми даємо у концентрованому виді огляд результатів щодо експериментально досліджених властивостей високо температурних надпровідників виконаних за останні 15 років, котрі свідчать, що високотемпературні надпровідники це метали з великими аномаліями як у нормальному, так і в надпровідному стані. Потім ми аналізуємо теоретичні результати, отримані за останні роки, щодо дослідження високотемпературних надпровідників. Як відомо, в цих дослідженнях були отримані певні результати, що пояснюють природу аномалій в цих металах у нормальному та надпровідному станах. Ми звертаємо особливу увагу на ту ідею, що пов’язує магнітні взаємодії з високотемпературною надпровідністю.

А саме, вважається, що квазі-частинкові збудження, пов’язані з магнітними взаємодіями в площинах  є відповідальними як за особливості в поведінки купратів в нормальному стані, так і в надпровідному стані. Обговорюється фазова діаграма допованих купратів як з теоретичної точки зору так із точки зору експериментаторів. Детально обговорюється унікальна структура та експериментальних даних з фотоемісіонної спектроскопії. Ми також обговорюємо атомні конфігурації елементів, що входять до складу купратів.

Існують два види купратних сполук, які відрізняються знаком зарядів, якими вони можуть бути леговані, а саме електронні (наприклад *Nd2−xCexCuO4−y*) та діркові (наприклад *La2−xSrxCuO4*), як відображено на Рис.1.

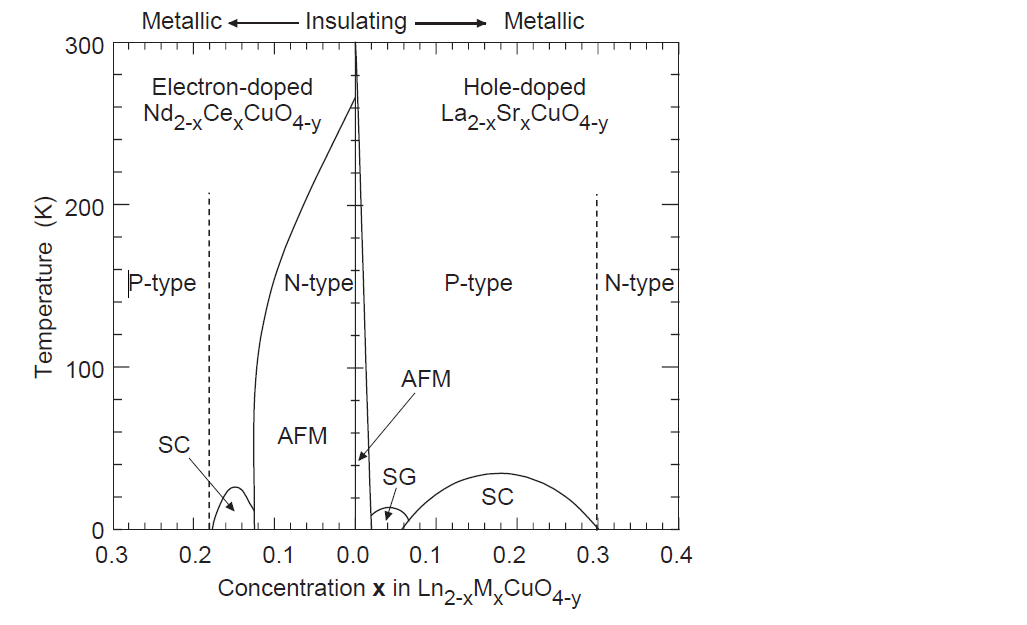


Рис.1 Фазова діаґрама купратних сполук

Недоповані батьківські сполуки є антиферомаґнитно впорядковані. Після введення носіїв заряду в систему дальній антиферомагнетизм руйнується. Наприклад звичайний дірковий допінг рівня *δh* ≈ 2% призводить до зникнення магнітної фази. Електронно леговані матеріали зберігають антиферомагнетизм трохи далі до електронноґо допінгу рівнів *δe* ≈ 12%. Однак, ближні антиферомагнітні коливання існують набагато далі в чисельних значеннях допінгу. Фазова діаграма досліджена в багатьох фізичних станах, як піде мова детально в дисертації.

В сучасних експериментальних літературних даних по ARPES (скорочене Angle Resolved Photoemission Spectrosсopy) Ref.[?] мається як найменш чотири можливості, котрі переконливо вказують, що сильна кореляція суттєво впливає на закон дисперсії квазі-частинок:

1. Ширина зони квазі-частинок за порядком величини співпадає з суперобміном  між атомами міді . Це – досить велике значення за електронною шкалою.
2. В купратах типу  існує досить велика за розмірами плоска ділянка зони, обумовлений зв’язком. Ця ділянка розташована досить близько до поверхні Фермі. Є підстави вважати, що це є загальна властивість дірочно допованих купратів. Для того, щоб з’ясувати таку поведінку спектрів квазі-частинок треба провести розрахунки спектрів (зон) для купратів з урахуванням електронних потенціалів кожної компоненти купрата.
3. ARPES експерименти для антиферомагнітного ізолятора  вказують на існування в цієї сполуці дірки, закон дисперсії якої визначається обмінним інтегралом .
4. Нещодавні результати по спостереженню фото емісійних спектрів , отримані Аебі та ін.(P. Aebi, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **72**, 2757 (1994)), для  температура надпровідного переходу якого є свідчать, що в ньому існують декілька груп спектральної ваги, розташованих в імпульсному просторі декілька вище Фермі імпульсу, отриманого в наївному наближенні вільних носіїв зарядів. Ці групи спектральної ваги значно посилюються антиферомагнітною взаємодією, що переводять систему до майже антиферомагнітного стану, де існують дальні антиферомагнітні флуктуації. Таким чином знайдено було так звані “тіньові” зони, що обумовлені антиферомагнітною взаємодією або структурними особливостями цієї сполуки. Наслідком цього являється локальний антиферомагнітний порядок, в якому дві дірки намагаються опинитись на сусідніх вузлах гратки, таким чином мінімізуючи енергію основного стану купратів. Це в свою чергу означає наявність ефективної двочастинкової взаємодії за величиною порядку обмінного інтегралу . Точна величина двочастинкової взаємодії численно знаходиться в дисертації.

Результати, отримані на всебічному аналізі цих та інших експериментальних досліджень , ми використовуємо для побудови мікроскопічної моделі купратів.

Особливу увагу ми надаємо розгляду елементарної комірки  купратів. Дається обґрунтування тому, щоб вважати її квадратною, та такою, що містить у себе один атом міді та два атоми кисню. Така просторова структура елементарної комірки дає можливість запропонувати трьох зонну модель для опису властивостей цих трьох атомів комірки. Ця модель повинна враховувати кулонівське відштовхування на одному вузлі гратки,  рівні енергії кисню, нарешті, енергію  орбіталі міді. Відповідний цим уявленням гамільтоніан є гамільтоніан трьох-зонної моделі Хабарда. Подальше спрощення гамільтоніану пов’язане з урахуванням ідеї, що була запропонована Жангом та Райсом.[?] А саме, вони на підставі аналізу експериментальних даних довели, що обмінна взаємодія між дірками  орбіталі кисню *O* та дірками орбіталі міді *Cu* настільки великі, що можна нехтувати триплетними збудженнями [3]. Ці міркування дають можливість звести трьох зонну Хабардівську модель до  моделі з гамільтоніаном

|  |  |
| --- | --- |
|  | (1) |

Де  - оператор спину (1/2), розташованого у точці  двох вимірній квадратної гратки,  - константа антиферомагнітної обмінної взаємодії між найближчими сусідами. Другий доданок в гамільтоніані (1) описує перескоки з вузла гратки  на вузол гратки . Оператори проектування  у явному вигляді забороняють знаходження двох носіїв на тому ж самому вузлі гратки. Для того, щоб врахувати стрибки до наступного найближчого сусіда, до рівняння (1) додається кінетична енергія



Потім, вибравши параметри *J* = 0.128 *eV*, *t* = 0,43 *eV* і *t’* = −0.07 *eV*, низько енергетичний спектр, що має трьох зонна модель Хабарда, може бути відтворений досить точно, як це показано в даному дослідженні.[?] Ми також розглядаємо одно-зонну модель Хабарда . Ця модель у випадку досить сильного зв’язку () може відповідати  моделі з доданком, що описує взаємодію носіїв в трьох вузлах гратки. Слід зауважити, що як одна зонна модель Хабарда, так і  модель набагато кращі для чисельних розрахунків на комп’ютері ніж трьох зонна модель Хабарда.

У вступі ми звертаємо увагу на ту обставину, що надпровідність купратів не являється “звичайною” надпровідністю, пов’язаною з симетричною щілиною у спектрі квазі частинок. Надпровідність купратів пов’язана з асиметричною щілиною у спектрі квазі частинок. А саме симетрія щілини у випадку купратів співпадає з симетрією орбіталі . Як це витікає з гамільтоніану (1), надпровідний стан згідно з розрахунками у моделі як раз пов’язаний з каналом взаємодії .[?] Однак, повне дослідження надпровідності за допомогою  моделі або близької родини Хабардівських моделей стикається з труднощами, пов'язаними з відсутністю у доступних сучасних чисельних підходах, заснованих на точній діагоналізації, і підходів Монте-Карло.

Щоб вивчити цю можливість, далі в цій дисертації ми представляємо нові ідеї для розробки моделі, що відображає важливі особливості  модель при низькому дірковому допінгові, де дві дірки створюють зв'язаний стан  (детальне обговорення в наступному розділі). Значення параметрів беруться з наявних експериментальних даних отриманих на купратах. Тоді можна розрахувати дисперсію однієї дірки в антиферомагнітному оточенні за допомогою декількох незалежних надійних технічних прийомів. В дисертації були застосовані розрахунки в рамках дифузійного Монте Карло, точної діагоналізації (другий розділ), та самоузгодженого Борновського наближення (третій розділ). Як ми обговорюємо нижче, результати дуже схожі, і їх можна вважати точними в прийнятому підході. Низька доля діркового допінгу, звичайно, не сильно вплине на головні особливості одночасткової дисперсії, і система може бути заселена в наближенні жорстких зон (другий розділ). В четвертому розділі у рамках самоузгодженого діаграмного дослідження обмеження жорсткої зони розслаблено. Притягання найближчих сусідів між двома дірками є наслідком мінімізації загальної кількості порушених зв’язків в антиферомагнітному оточенні і наближається по порядку величини до обмінного інтегралу . Вищенаведені основні принципи лягли в основу так званої антиферомагнітної моделі Ван Хова (скорочено AFVH). Тому зрозуміло, що AFVH походить з моделі  в реалістичному просторі параметрів. Таким чином виникає природня послідовність зниження масштабy енергії, починаючи з проблеми розгляду трьовимірних купратів, далі через площини , модельовані гамільтоніаном Хаббарда, який зводиться до  моделі, й нарешті до AFVH моделі як це показано на Рис.2.

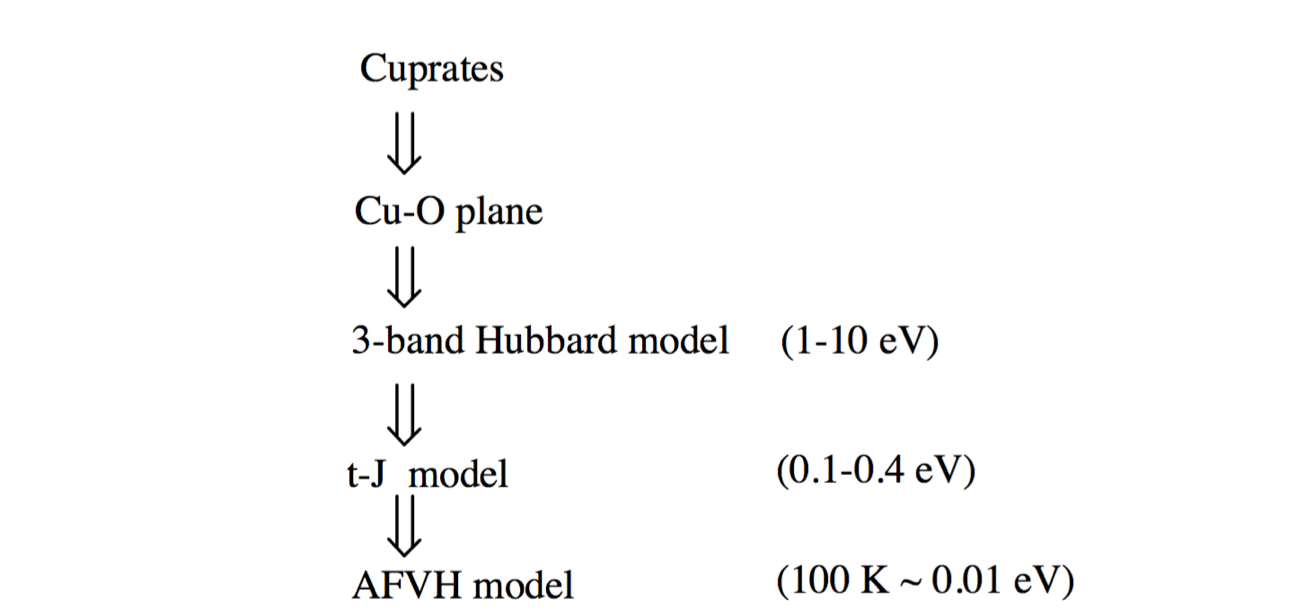


Рис.2. Зменшення енергетичного масштабу в моделях площини .

Сценарій AFVH моделі працює в масштабі енергій біля 100K, характерних

для явища високотемпературної надпровідності.

На закінчення вступу, треба відзначити, що існування так званої *t-U-V* моделі представляє альтернативний підхід то теорії низькодопованого антиферомагнетика, тому наступний розділ дисертації присвячений вивченню *t-U-V* моделі з метою доведення переваги AFVH моделі спеціально для високотемпературної надпровідності.

У **першому розділі** проведено дослідження так званої *t-U-V* моделі або поширеної однoзонної моделі Хаббарда, яке враховує взаємодію між найближчими сусідами. *t-U-V* модель у наближенні сильного зв’язку вважалась природнім кандидатом для ефективної теорії надпровідності в каналі . Тут наведено повний огляд *t-U-V* моделі для випадку напівзаповнення. Це є достатнім, щоб проілюструвати наше основне твердження – конкуренція між надпровідністю та сепарацією фаз (СФ, або PS, скорочене Phase Separation) руйнує надпровідність по каналу . В наслідок цього, питання чи можна використовувати дану модель для опису купратів з малою концентрацією домішок потребує детального чисельного розрахунку. Результати такого вивчення наведені нижче.

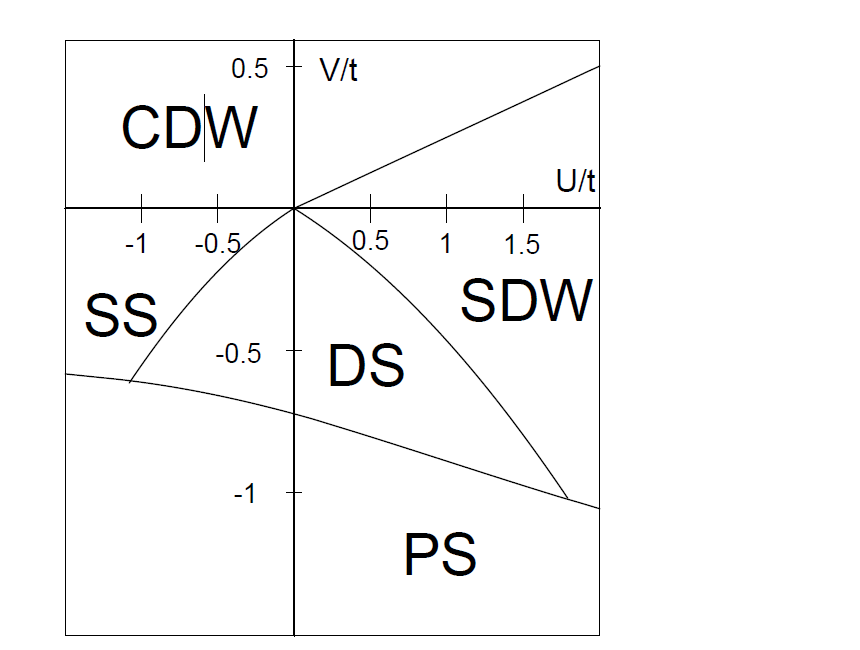
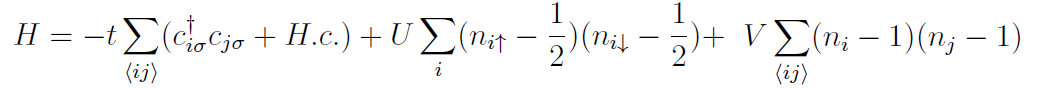


Рис.3. Фазова діаграма середнього поля *t-U-V* моделі для випадку напівзаповнення.

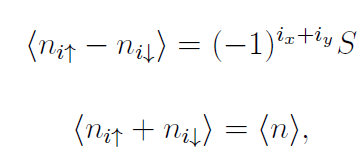
Оператор Гамільтона для моделі *t-U-V* на *2D* квадратних гратках з N сайтів і періодичні граничних умовах визначається як:



де *t* є стрибковий інтеграл між найближчими сусідами, *U* є взаємодія на вузлі, *V* є взаємодія між найближчими сусідами, оператор заповнення визначається формулою:

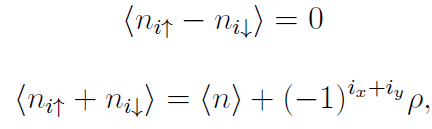


Розрахунки проводилися у частинка-дірка симетричній формі такій, що енергія середнього поля (mean field, або MF) в нормальному стані дорівнює нулю при половинному заповненні. Таким чином, в цьому розділі, хімічний потенціал *μ ≡ 0*. Як відомо, для чистої моделі Хаббарда (*V = 0*) опис MF виробляє хвилю спінової щільності (spin-density wave, або SDW) в основному стані (ground state або GS) для *U> 0* і двома виродженими GS для *U <0*, а саме, ізотропна синглет (або S-хвилі) надпровідність (superconductivity або SC) і хвилю зарядової щільності (charge density wave, або CDW). Додавання взаємодії між найближчими сусідами *V* виробляє більшу різноманітність можливих фаз, як буде показано нижче. Стан з хвилею спінової щільності визначається наявністю двох різних підграток з ненульовим значенням магнітного моменту підгратки, рівного для кожного сайту в рамках тієї ж підгратки. Напрями магнітного моменту на різних підгратках протилежні. У той же час щільність заряду є рівномірним на гратці. Формально для параметра порядку в стані з SDW можна записати в реальному просторі:



де *S* є варіаційний параметр, пропорційний середньому Z-компоненту спина  
на сайті ***i*, <**n**>** це середнє число електронів на вузлі.

У дусі аналогічному стану з  SDW ми визначаємо параметр порядку в стані з СDW в реальному просторі таким чином:



де ρ є варіаційний параметр порядку, аналогічному *S* в SDW MF. В цьому станi спин системи рівномірно розподілений по вузлам гратки.

Тепер розглянемо синглетну надпровідність, що визначена таким параметром порядку  (який в загальному випадку може бути анізотропним):  

Inline image

який задовольняє наступні симетрії: антисимметрiя по спиновiй компонентi та симетрія по хвильовому вектору ***k* (**за означенням синглета). Такий параметр порядку досить сильно відрізняється від SDW або СDW тому що спин і заряд рівномірно розподілені по вузлам гратки.

На Рис.3 наведена фазова діаграма *t-U-V* моделі в (*U, V*) площині , що порівнює енергії основних станів усіх розглянутих ситуацій: хвилі спінової густини (ХСГ, або SDW), хвилі зарядової густини (ХЗГ, або CDW), s-хвильової синглетної надпровідності (СН, або SS) та, зрозуміло, найбільш цікавої для нас ***d–***хвильової синглетної надпровідності (ДH, або DS).

Фазова діаграма *t-U-V* моделі дуже багата. Вона демонструє, що надпровідні фази чисто електронної моделі як правило межують з сепарацією фаз, або СФ. Навіть для притягальної моделі Хаббарда, яка “надпроводить” без сепарації фаз, слабке притягання між найближчими сусідами є достатнім, щоб ввести нестабільність близьку до сепарації фаз (хоча вона і розширює простір параметрів, це розширення є природнім, оскільки фізично реалізація строго локальних сил є малоймовірною). Сепарація фаз в *t-U-V* моделі є дуже стійкою і існує навіть для великих та додатних значень *U*. У цьому регіоні існує цікавий прямий перехід з хвилі спінової густини до сепарації фаз. Таким чином недостатньо знайти сепарацію фаз у даній моделі, щоб гарантувати наявність поряд з нею надпровідності. А також, нарешті, цікаво розглянути “острів” в параметричному просторі, де  надпровідний стан є стійким. Розмір цього “острова” в *t-U-V* моделі дуже малий як для моделі d-хвильової надпровідності. *t-U-V* модель має і інші вади. Щоб проаналізувати як сильно сепарація фаз впливає на надпровідність, було залучено комп’ютерне моделювання за квантовим методом Монте-Карло. Сепарація фаз може бути отримана за допомогою комп’ютерного моделювання за рахунок того, що в залежності від вибору початкових полів Хаббарда-Стратоновича для середньої густини частки має місце конвергенція двох результатів, тобто має місце сепарація фаз і різко скорочується область, де d-хвиля є стійкою. Наприклад, в області, де сепарація фаз вже не спостерігається (*T* = *t/*6), розрахунки квантовим методом Монте-Карло все ще не виявляють посилення d-хвильових кореляцій. Якщо ввести оператор, що руйнує d-хвильову локальну пару як  з одиничними векторами  та  повздовж осей, тоді кореляцією спарювання основних станів є .  швидко спадає з відстанню (дивись Рис. 4 (а)). Данні з дифракції електронів на кластерах 4×4 [?] співпадають з розрахунками квантовим методом Монте-Карло. Хоча результати розрахунків за квантовим методом Монте-Карло не виключають стабільність d-хвильової надпровідності для *T<<t/6*, вони показують, що при існуючих комп’ютерних технологіях практично неможливо досліджувати малу область її існування без використання наближення середнього поля. Ще більш ускладнює ситуацію той факт, що режим слабкої кореляції куперівських пар суперечить *t-U-V* моделі. Таким чином *t-U-V* модель є непридатною для пояснення фізики купратів.

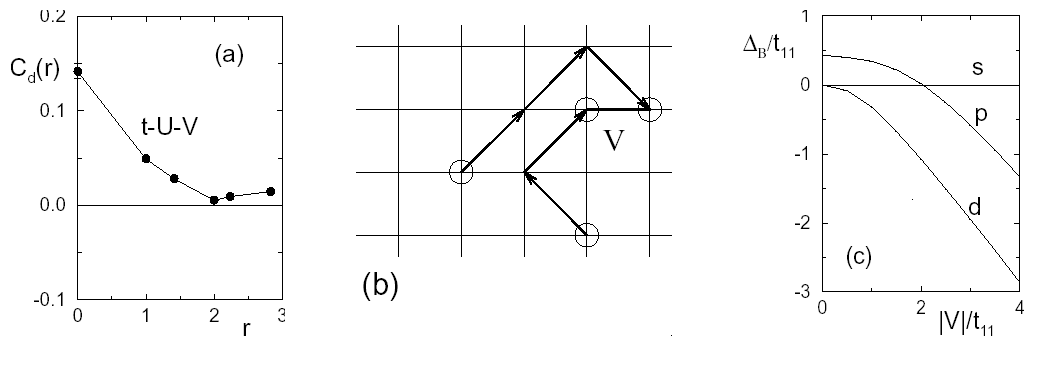


Рис.4. (а) Залежність  парної кореляції від відстані ***r***, отримана комп’ютерним моделюванням за методом Монте-Карло на кластері 4×4, *T=t/6, U/t=0, V/t=-0.3*, тобто, в наближенні середнього поля, в області існування *d*-хвилі. Аналогічні результати в цій області були отримані для інших зв’язків. Величина помилки є меншою за розмір символу. (b) Схематичне зображення антиферомагнітної моделі Ван-Хова (AFVH). Ферміони рухаються в межах однієї підгратки і взаємодіють на відстані. (с) Енергія зв’язку *ΔВ* для задачі двох частинок, що розв’язана точно для *t20=0.4t11*. Також зображено стани з найнижчою енергією в підпросторі   та розширених підпросторах *s*-та *p-*хвильового спарювання. Аналогічні результати отримано для *t20<0.5t11*. Якщо *t20>0.5t11*, при малих значеннях  *V/t* фактичний основний стан має *р*-хвилю. Але він стає знов  хвилею, якщо зв’язок не малий.

У **другому розділі** проводиться обговорення нещодавно створеної AFVH моделі, яка грає роль мікроскопічної ферміонної моделі для  надпровідності при малій густині. Ця модель враховує ефект сильної кореляції в дисперсійному співвідношенні для дірок, що може бути точно оцінено за допомогою чисельних методів, і має гарну відповідність до експерименту. Модель описує ряд нестандартних властивостей нормального стану в купратах. Вона також пояснює відсутність кишень для дірок в результатах чисельних розрахунків для моделей Хаббарда та *t-J*.

В реальному просторі гамільтоніан запропонованої моделі записується у вигляді:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (2) |

де *α* = *А, В* позначає підгратки, *п*і – числовий оператор (Рис. 4(b)). Дисперсія у *k*-просторі має вигляд *εAF*(***k***) = 4*t*11*coskxcosky* + 2*t*20(*cos*2*kx* + *cos*2*ky*), де параметри *t*11 та *t*20 було зафіксовано, щоб забезпечити дисперсію для дірок в антиферомагнітній матриці, що розраховувалась чисельно за допомогою ряду методик, включаючи точну діагоналізацію, дифузійний метод Монте-Карло (методом функцій Гріна), самоузгоджене наближення Борна та інші. Усі результати щодо руху дірок в антиферомагнітній матриці, отримані різними числовими методами, дуже гарно узгоджуються між собою.

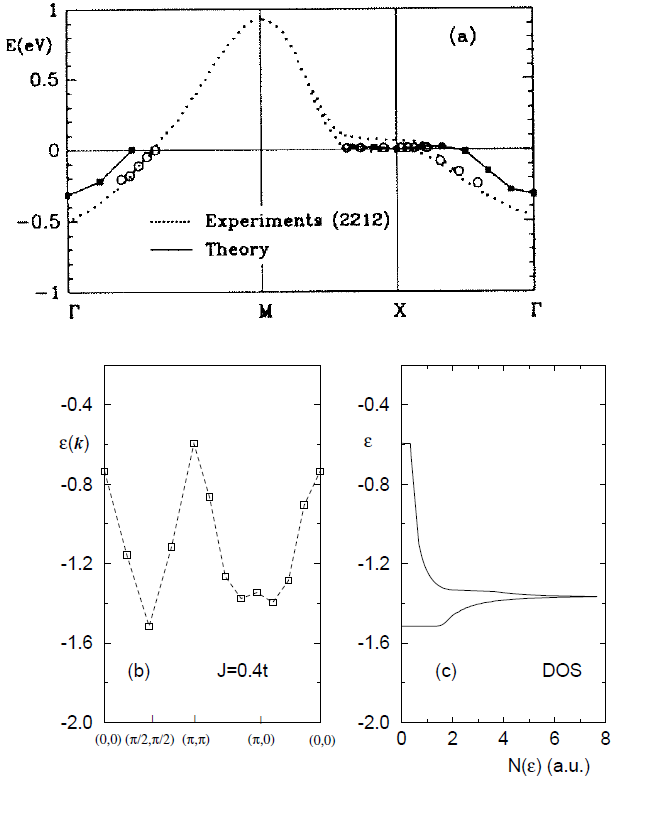


Рис.5. (а) Iмпульсна залежнiсть енергії, що експериментально спостерігається для квазічастинкових зон, отримані за допомогою ARPES техніки (K. Gofron, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **73**, 3302 (1994)) (відкрити кола). Пунктирна лінія є екстраполяції, обговорюється в D.S. Dessau, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **71**, 2781 (1993). Теоретичне передбачення зроблене в цій главі показано на малюнку як група повних квадратів поєднаних суцільною лінією. Вони відповідають *J/t* = 0.4, на кластері 12 × 12; (b) енергії дірки

в *t − J* моделі, або *ε*(***k***), проти імпульса, отримані за допомогою дифузного методу Монте Карло на 8 × 8 решітки та *J/t* = 0.4 (в одиницях *t*). Чисельні результати є відкриті квадрати і суцільна лінія проведена для облегшення очей. Зверніть увагу на плоскі області поблизу X точки. Планки похибок не відображаються, але звичайно вони ≈ 0.02*t* на всіх хвильових векторах, виключаючи на Γ і M точки, де вони знаходяться поблизу  ≈ 0.20*t*; (c) густина станів (density of states  або DOS), отримана з нашими підгонками числових даних від (a)-розділy -  ця крива показує сингулярності Ван-Хова між (π, π) і (π, 0). Одиниця енергії є *t*.

Перевал, що з’являється на залежності *ε*(***k***) і призводить до сингулярності Ван-Хова в DOS, виникає як результат розв’язку багаточасткової задачі. Одним з наших головних результатів є наступний: наявність цього перевалу призводить до практично плоскої зони дірок поблизу точки Х. Цей факт співпадає з даними ARPES експериментів (D.S. Dessau, *et al.,* Phys. Rev. Lett. 71, 2781 (1993)). Практично повне виродження між Х та  вводить малий енергетичний масштаб в задачу, в наслідок чого коефіцієнт Хола і поверхня Фермі мають поблизу кімнатної температури сильну температурну залежність, що корелює з недавніми експериментальними даними Хванга та ін. (H. Y. Hwang, et al, Bell Labs preprint, (1993)). В дійсності відповідність між *t-J* теорією та *RH* експериментом можна отримати до температури 800 К (Рис. ).

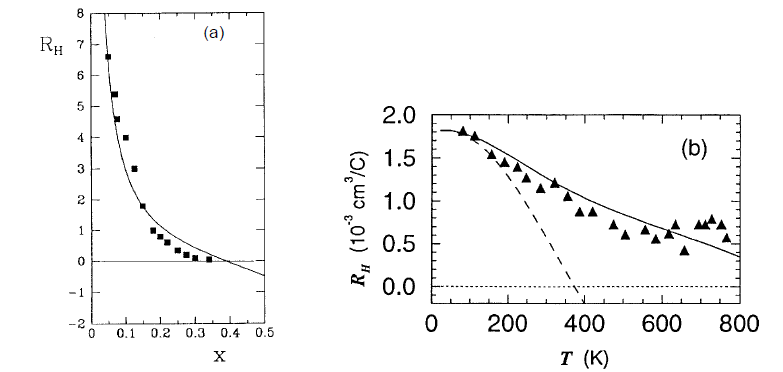
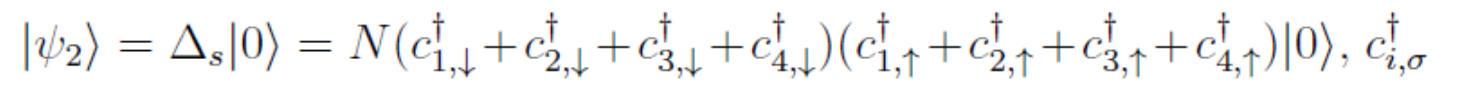


Рис.6. (a) Коефіцієнт Хола (Hall coefficient, або *RH*) (в одиницях 10−3cm3/C) як функція густини дірок (x). Суцільна лінія позначає результати для чистої моделі *t − J* при *J/t* = 0.4 та *T=0*. Повні квадрати відображають експериментальні результати для *La2−xSrxCuO4* при *T = 50K*, результат взятий з Hwang et al. (H. Y. Hwang, et al, Bell Labs preprint, (1993)); (b) як функція температури при постійній густині дірок.

Ця глава також присвячена точному розв’язку двочасткової задачі з використанням рівняння (2). На Рис.4(с) представлено результати для розширеної симетрії *s*-, - та *р*-хвилі, у випадку якщо енергія зв’язку введена як Δ*В* = *Е*2 – 2*Е*1 (де *Еп* – енергія основного стану підпростору *п*-часток). Стан з найнижчою енергією має Δ*В* < 0, що говорить про наявність зв’язаного стану, який відповідає  симетрії. Доки  є малим (тобто для слабо зв’язаних частинок), Δ*В* є дуже невеликим за абсолютним значенням, але все ще від’ємним. Аналізуючи середню відстань між частками, було показано, що для ~2 (Рис.4(с)) розмір пари стає близьким до свого мінімального значення (стала гратки), знаменуючи перехід до режиму сильного зв’язку.

В роботi встановлено походження ***d***-хвильoвoї симетрії в основному станi купратiв. Для цього розв'язана задача двох тіл – електронної пари пари на квадратнiй гратцi при наявності антиферомагнитних кореляцій (antiferromagnetic correlations або AFC) в реальному просторi i показано що формується /var/folders/z7/ph5rz8v558n1gmr_m356cb5r0000gp/T/com.microsoft.Word/Content.MSO/AF602FA0.tmpсиметрія пари. Походження /var/folders/z7/ph5rz8v558n1gmr_m356cb5r0000gp/T/com.microsoft.Word/Content.MSO/AF602FA0.tmpсиметрії в основному стані задачі двох тіл базується на наступному інтуїтивному міркуванні: ***d***-хвильова симетрія формується дірковою або електронною парою на квадратний решітці при наявності антиферомагнитних кореляцій (АФК, або AFC) в картині реального простору, що детально пояснюється нижче.

Близько напiвзаповнення, коли густина дiрок низька, AFC пригнічують стрибки мiж найближчими вузлами гратки (*t = 0*) в межах флуктуації, в той час коли інтеграл перескоку мiж наступними найближчими  сусідами є позитивним (*t’ >0*). Іншими словами, дiрки починають заповнення верхньої частині нижньої SDW зони де основному стану (GS) відповідає хвильовий вектор ***k***  = (π/2, π/2) або ***k*** = (π, 0). Або, іншими словами AFC мають найбільшу амплітуду в станi Нееля в  розширеннi  половинно заповненого GS в реальному просторі. Це еквівалентно великим значенням *U/t*  в моделі Хаббарда, і ефективно дiрка в цьому граничному випадку  буде вести себе, як обговорювалося вище. Тепер звернемося до системи з одною плакеткою на квадратний гратцi. Розглянемо наступну конфігурацію в реальному просторі двох дiрок в границi сильного зв’язку: одна дiрка розташвана, наприклад, на вузлi 1, ще одна переміщується між 2 і 4, як випливає безпосередньо з вище наведеного аргументу. Ймовірність опинитися на сайті 3 є невелика. Таким чином виникає мінімальна іграшкова модель: чотирьох-вузловий одновимiрний лнцюг з позитивним стрибковим інтегралом і відкритими або періодичними крайовими умовами, якi для такого кластера еквiвалентнi. Спектра *ε*(***k***)/*t* = 2cos(***k***) з основного стану в ***k*** = π. Таким чином, стан другої дірки являєтеся 1 на сайті 2 і *eiπ* = − 1 на сайті 4. Це якраз являєтеся станом з симетрією  для двох дирок в такому випадку коли заповнені всі інші місця квадратної решітки, що чітко відповідає дії **Δ***d* оператора на стан половинного заповнення з  розвинутими AFC. У роботі було показано, що стан системи описуваний функцією **Δ***d*  |ψ4>  має найбільший вагу в  станi |ψ2> для 2 × 2 кластера, де |ψ4>  є точним GS з чотирма електронами на плакеті, а является оператором створення електрона на сайті, N є множником нормалізації. Таким чином,  кореляції  типу  є найсильнішими в наполовину заповненому стані. При низький густини носіїв заряду, та при наявності зовнішнього модульованого магнітного поля ми спонукаєм AFC в регіоні з малою кількістю носіїв, тоді NNN становиться для електрона негативний (*t’*<0), тобто, грубо кажучи, електрони заселяють дно нижньої зони SDW, розташованого на позиції хвильового вектора ***k*** = (0, 0) . Таким чином, така ж проблема з двома вузлами для електронів приводить в основний стан з ***k*** = 0.

Таким чином, відносна фаза цих двох конфігурацій, коли один електрон знаходиться на ділянці 1, а інший на 2 або 4, є *ei0/ei0 = +*1. Це являться дією оператора Δ †s на порожню решітку, і саме тому можна очікувати розширену ***s-***хвилю на високих значеннях допінгу. Ця ідея обговорюється в подальшому. Дійсно, розглянемо велике значення потенціалу *|****V****|* на всій решітці, а не на однoму плакеті. Підбором значення зв’язку ***V*** ми можемо змінити розмір пар. У межі великих ***V***, розміром пари являться тільки одна постійна решітки. Це можна розглядати як відповідний стан до дуже коротких AF кореляційних довжин. Проаналізуємо рух однієї частинки навколо іншої, як схематично показано на рис.6 (а). У цьому режимі, енергія мінімізується, коли відстань між частинками є одна стала решітки у всі часи. Тримаючи фіксованим знаходження частинки B на даному вузлі гратки, проблема зводиться до вирішення ефективного чотирьох-вузлового стрибучого гамільтоніану частинки, що рухається по чотирьох найближчих навколо B, використовуючи ймовірність амплітуди перескоку ривною значенню перекриття *t11* по діагоналі з рівняння (2). Тут важливо зауважити, що знак *t11*обраний позитивним числом згідно з вимогою, що дисперсійний мінімум знаходиться при ***р*** = (π/2, π/2) або (0, π), так як це природньо в задачах про дірки в антиферомагнетиках. [?] Знаки *t11* і *t20* мають фізичний зміст, на відміну від знаку інтегралу стрибка між найближчими сусідами, які можуть бути змінені за допомогою відповідних перетворень квадратної решітки. Тоді, основний стан ефективного чотирьох-вузлового стрибучого гамільтоніану відповідає вибору фази змінного знаку для частинки А (Рис.6 (а)). Це призводить до /var/folders/z7/ph5rz8v558n1gmr_m356cb5r0000gp/T/com.microsoft.Word/Content.MSO/E56E7DA.tmp симетрії зв'язаному стані, забезпечуючи інтуїтивне пояснення появи /var/folders/z7/ph5rz8v558n1gmr_m356cb5r0000gp/T/com.microsoft.Word/Content.MSO/7ACCF8.tmp пар у реальному просторі, який доповнює докази засновані на теорії збурень при обміну магнонами [?]. Зауважимо, що цей простий результат що–виводиться за формулою (1) не знаходиться в моделі ***t-U-V***. Якщо інтеграл стрибка між наступними найближчими сусідами (Рис.6 (а)) замінюється найближчими сусідами в моделі ***t-U-V***, то фаза основного стану частинки на орбіті навколо B при великих значеннях *|****V****|* зображені на Рис.6 (b), що відповідає розширений ***s-***хвилі. Таким чином доведено, що притягнення між найближчими сусідами не достатньо для /var/folders/z7/ph5rz8v558n1gmr_m356cb5r0000gp/T/com.microsoft.Word/Content.MSO/7ACCF8.tmpспарювання! Це притягнення має бути доповнено відповідними дисперсіями носіїв, як це показано в даному розділі. Наведений вище аналіз встановлює підставу вважати, що антиферомагнітний сценарій ван Хова може бути базовою моделлю для ***d*-**хвильової надпровідності, подібної негативно-***U*** моделі Хаббарда для випадку з ізотропною ***s-***хвилею.

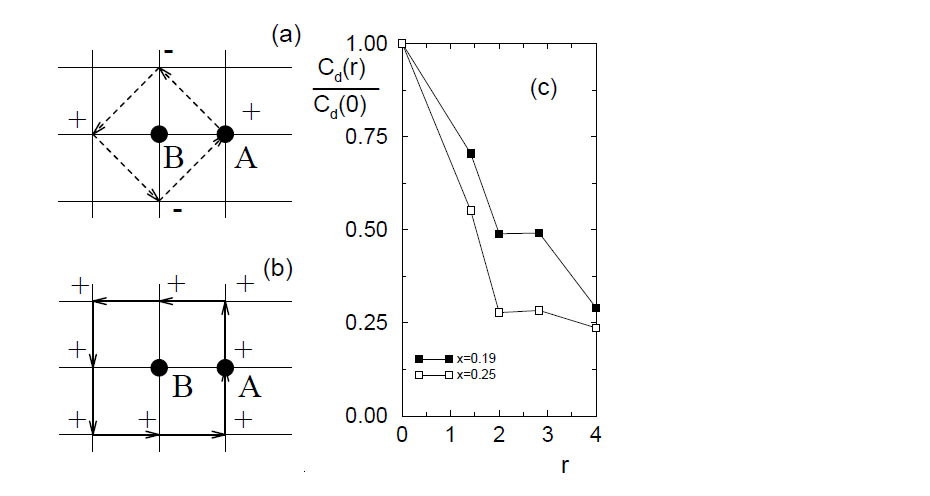


Рис. 6: (a) Два ферміони при великих значеннях у *|****V****|* рівнянні (2), що показує характер  хвилі з'язаного стану; (b) Два ферміони у границі великих *|****V****|* в моделі ***t-U-V***. Зв'язаний стан - ***s***-хвиля; (c) кореляції в залежності від дистанції ***r*** для моделі (2) при *T =* 0 вивчались за допомогою методів точної діагоналізації (exact diagonalization, або ED) на 32-вузловому кластері. Параметр зв’язку та інтегралу перескоку мають величини *|****V****|/t11* = 1.0, *t20 / t11* = 0.4, а концентрация носіїв заряду позначена на рисунку. Кореляції в ***s-*** і ***p-***каналах незначні, тому знехтувані.

Наявність  зв'язаних станів в задачі двох тіл рівняння. (2) допускає SC в тому ж каналі при кінцевій густині. Щоб уникнути ускладнень з PS, в дослідженні показаному на Рис.3.2 (с), відштовхуюча внутрішня підргратна взаємодія в каналі густина-густина величини *|****V****|*/√ 2 і *|****V****|*/2 на відстанях √2а і 2а (а – постійна гратки) відповідно, була також включена в гамільтоніан. (Зверніть увагу, що навіть з цією модифікацею модель має тільки один параметр взаємодії *|****V****|*). Якщо ці відштовхуючи взаємодії не включені, PS сильно конкурує з SC. Зауважимо, що ці складові відштовхування природно виникають в результаті аналізу ефективного потенціалу між дірками на основі механізму АF флуктуаций. [?]

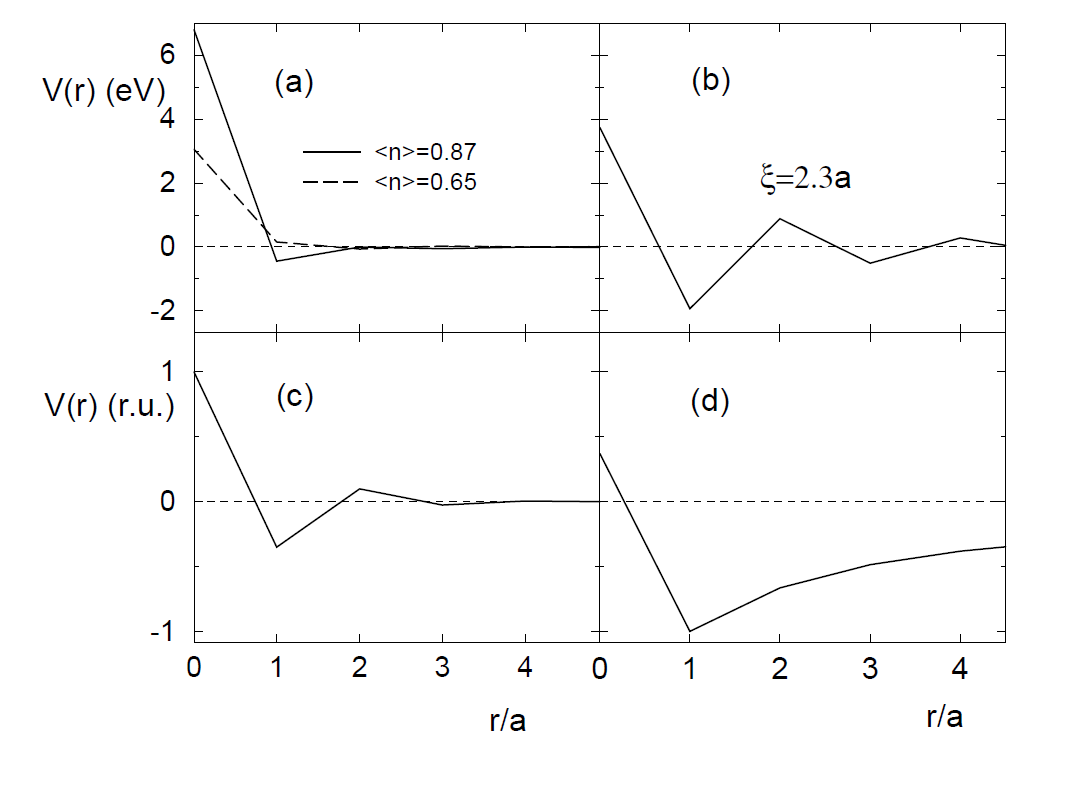


Рис 7: Статичні реальному просторі потенціалів у різних моделей (прийнятих на ω = 0): (муніципалітет) ефективний потенціал в FLEX апроксимації [?] поряд з AF нестабільність (13% допінг) а також від нестабільності (35% допінг); (b) майже antiferromagnetic FL потенціал [?] (співвідношення довжини AF є ξ = 2.3a, за це інтервал решітки); (c) ефективний потенціал запропонованих Лю, та ін. [?] у разі AF коливань у нормальному стані; (d) ефективний потенціал в безпосередній близькості від PS, вважається Ref. [?]; Зверніть увагу, що у (c) і (d) найбільших абсолютне значення потенціал в реальному просторі має значення 1 (r.u. означає, що відносних одиницях). У випадку (d) це 0,2 eV, хоча у випадку (c) була надана немає шкали.

Можна стверджувати, що в запропонованій моделі (AFVH, або DNM) задача двох тіл природнім шляхом призводить до зв’язаного стану -хвилі і, що в розбавлених надпровідниках існує сильна  кореляція пар. Було також відмічене, що в *t-U-V* моделі, яка обговорювалась тут, немає *d-*хвильової надпровідності у випадку низької густини. Таким чином DNM модель, що ґрунтується на феноменології недодопованої високотемпературної надпровідності, є природнім узагальненням моделі Хаббарда на випадок  надпровідності.

Ця теорія легко пояснює не тільки  надпровідний стан, який спостерігався в ряді експериментів, але йде далі, показуючи, що для оптимального допування, коли час існування квазічастинок стає лінійним від енергії, критична температура має підвищитися,. Теоретичні результати добре корелюють з експериментальними даними для критичної температури, оптимального допування, надпровідної щілини та теплоємності (Рис. 6).

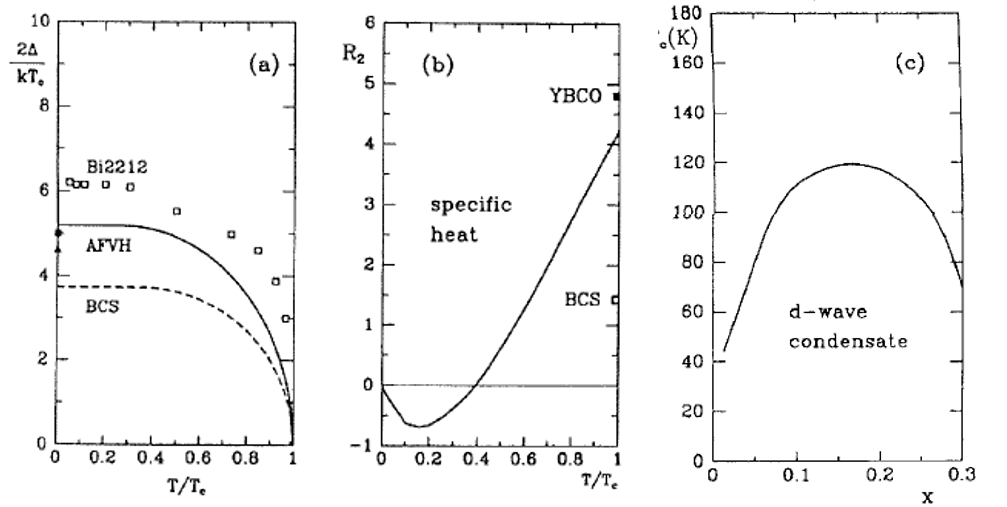


Рис.8: (а) *2Δmax (T)/kTc* проти *Т/Tc*. Суцільною лінією відзначена поведінка AFVH моделі в точці оптимального допінгу. Відкритим квадратам відповідає тунелювання даних для *Bi2Sr2CaCu2O8* [?]. Повний трикутник при T = 0 відповідає даним ARPES [?] а повний площа резюме експериментальних даних.[?] Пунктирна лінія є ПБД прогнозування (тобто привабливі моделі Хаббарда в половині наповнюючих і слабкі муфти); (b) R2, як це визначено в текст проти T/Tc для моделі AFVH на оптимальне допінг. Точка відповідає експериментальні результати для YBCO.[?]. БКС результат показано. (c) критична температура ТК AFVH моделі в залежності від щільності отвір x (= 1 − \_n\_). Надпровідний стан є d- хвиля.

Результати цієї теорії, яка побудована в реальному просторі з дисперсією і взаємодіями, розрахованими для напівзаповнення, залишаються якісно достовірними і для скінченої густини дірок (включаючи високу ТС та надпровідність в  каналі). В режимі наддопування передбачається можливий перехід з d-хвилі до розширеної s-хвилі.

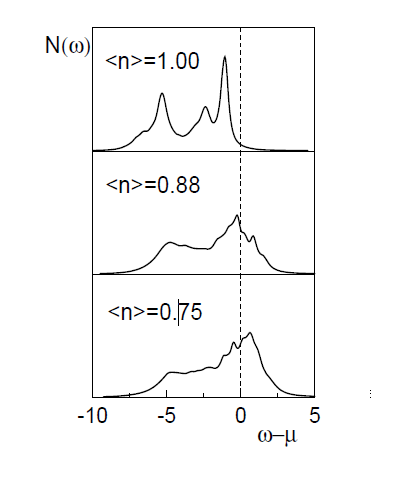


Рис.9: *N*(*ω*) для 2D *t-J* моделі в результаті усереднення для кластерів з 16 і 18 місць, при *J/t* = 0.4 і для вказаних густин. У δ-функції були передані ширину *η* = 0.25*t*. Аналогічні результати були отримані при інших значеннях *J/t*.

У **третьому розділі** досліджуються властивості одношарового, двошарового та 3D антиферомагнетиків, а саме щодо поведінки дірок в такому оточенні та виникнення надпровідного стану при допуванні. Головне припущення полягає в тому, що антиферомагнітні кореляції зберігаються щонайменше на відстані кількох сталих гратки. Це в першому наближенні дозволяє використовувати при напівзаповненні дисперсію дірок та NN притягання густина-густина між квазічастинками, що також є результатом антиферомагнетизму. Усі моделі, що обговорювалися до цього часу були по суті двовимірні моделі корельованих носіїв заряду в квадратній гратці. Зараз аналіз буде поширено за межи одного шару. Для цього дисперсія дірки була розрахована в рамках самоузгодженого наближення Бору або розв’язуючи систему діаграмних інтегральних рівнянь, узагальнених для двох шарів та тривимірних систем. Порівняння з ARPES експериментами отриманими на *Sr2СuO2Cl2* показало, що *t-J* модель треба розширити до *t-t'-J* з *t'*=-0.35*t*. Це дозволяє репродукувати важливу частину дисперсії дірок біля верхнього краю електронної зони, що було знайдено експериментально. Наявність плоскої частини дисперсії біля (π,π) в Bi2Sr2CaCu2O8 з “оптимальним допуванням” також є частиною спектра дірок для *t'<<t*. Таким чином величина *t'* відображує різницю в мікроскопічних властивостях різних купритів. В той же час механізм надпровідності може бути якісно таким самим. *t-J* модель може бути поширена і на орторомбічну тривимірну гратку з урахуванням граничних NN перескоків:



де *і* позначає вузли в двох шарах або елементарний тривимірний кластер, **е**α – одиничний вектор в напрямку α, *t*α відповідає NN перескокам у напрямку α, *t*αβ відповідає NNN перескокам по діагоналі ***е****α±****е****αβ* (*α, β* = *x, y, z*), параметр  характеризує анізотропію магнітного обміну. Після лінеаризованого перетворення Холстейна-Примакова (основаного на розкладання в ряд по ступеням 1/S), ефективний гамільтоніан має вигляд:



де *ε***k** = 4(*txy cos kx cos ky* + *txz cos kx cos kz* + *tyz cos ky cos kz*) – дисперсія дірок без урахування спинів (яка дорівнює нулю якщо гамільтоніан не містить членів відповідаючи за прямі NNN перескоки),

.

Після діагоналізації *Нт* була отримана стандартна ферміон-бозонна форма гамільтаніану, що може бути використана для самоузгоджених розрахунків спектра квазічастинок:



де *b*-оператори були перетворені щоб помістити оператори народження перед операторами нищення. Дисперсія магнонів завдається як *ω***q**= *ω*0*ν***q**, а *M***k,q**=*u***q***β***k-q**+*υ***q***β***k** – діркo-магнонна вершина. ħ=1.



Основний стан (GS) визначається як  і його енергія *Е*0 має вигляд:



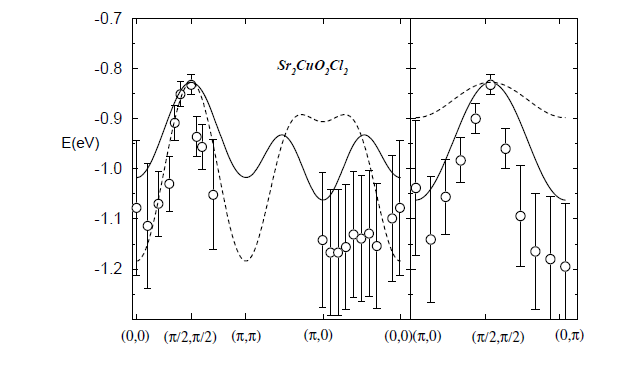


Рис.10: Sr2CuO2Cl2 hole spectrum: SCBA (solid line) vs experiment (open circles). Dashed line is the *t − J* model without NN hopping term.

Було досліджено надпровідність в двошаровому та тривимірному антиферомагнетику. Малий зв’язок в напрямку z якісно не змінює  надпровідний стан знайдений для одношарової площини. Тільки для великих значень обміну в напрямку перпендикулярному до площин (система набуває тривимірного характеру) s-хвильовий надпровідний стан стає рівно ймовірним і врешті-решт домінуючим. Як і очікувалось тривимірність веде до падіння *Тс*.

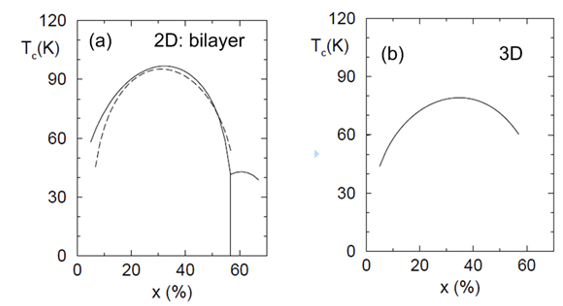
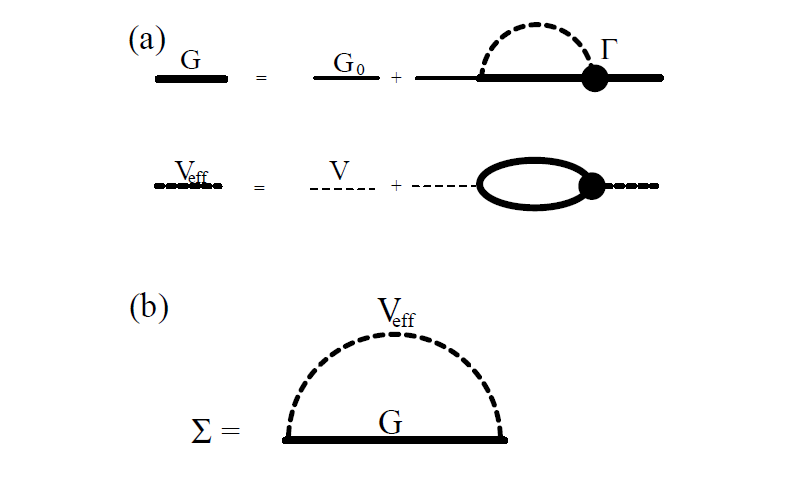


Рис.11: (а) когерентності критична температура Tc (суцільну лінію) vs Квазічастинка отвір щільність для AF bilayer з J/t = 0.3125 і J⊥/J = 1 (див. текст для деталей). Пунктирна лінія-густина Tc vs Квазічастинка отвір для 2D AF літак з J/t = 0.3125. Обидві лінії розраховується в рамках реального space спаровування підхід і розрив рівняння ПБД. Для шару фосфоліпідів, в q.p. високої щільності (55% x ∼) відбувається перехід до «s хвилі» стану. (b) когерентності критична температура Tc vs Квазічастинка отвір щільність для ізотропних 3D AF з J/t = 0.4, використовуючи рівняння розрив ПБД.

У **четвертому розділі** наведені результати розрахунків *ТС* та аналізується симетрія SCOP в наближенні RPA до антиферомагнітної моделі Ван-Хова для двовимірної гратки. По-перше було визначена закон дисперсії, що використовувався для розрахунків: *εAF*(**k**)=4*t*11*coskxcosky* + 2*t*20(*cos*2*kx* + *cos*2*ky*) з 4*t*11=0.165 *eV* та 2*t*20=0.0435 *eV*, що, як було показано, призводить до появи плоскої області поблизу (π,0) в відповідності до експериментів з фотоемісії в допованих купратах. Відсутність NN перескоків в дисперсії є наслідком сильної апертуріровання дірки антиферомагнитними флуктуаціями, які, як відомо, існують в основному стані високотемпературних надпровідників. В цьому дослідженні можна послабити наближення жорстких зон оскільки перенормована дисперсія залежить від фактора заповнення обчислений в рівнянні (??). Проте, симетрія антиферомагнитного основного стану не може бути змінена в цьому наближенні, оскільки відсутність NN перескоків є притаманною властивістю моделі незважаючи на корекції на збудження. По-друге, розмір двовимірної гратки був 32×32 з 512 точками на осі уявного часу (частоти). Звичайна кількість ітерацій FTT процедури для нормального стану було 15-20. Щодо отримання найбільших властивих значень в надпровідному стані, кількість ітерацій була навіть менша. В дійсності після 10-11 ітерацій помилка розрахунків ставала менш за задану.



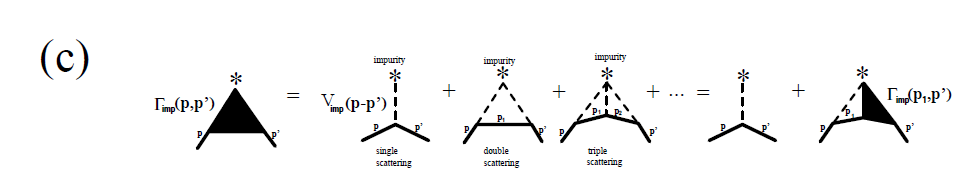


Рис 3.3: (a) точне рівняння Дайсона для взаємодії двох тіл; (b) власна енергя у випадку залежного від часу наближення HF; (c) повна самоузгоджена домішкова вершина.

Симетрія SCOP існує в  каналі, коли нескінчена кількість феміоних кульок сумуються в ефективному потенціалі, і залишається незмінною для широкого діапазону концентрацій дірок (згідно феноменології купритів - до 40%). Використання ефективного потенціалу лише однієї кульки дає розв’язок в вигляді s-хвилі, що наглядно демонструє переваги RPA наближення. Дійсно, в границі сильного зв’язку моделі симетрія є d-хвилею і малоймовірно мати різку зміну симетрії при переході від слабкого зв’язку до сильного. Це також показує, що діаграмна техніка може давати розумні результати навіть для сильного

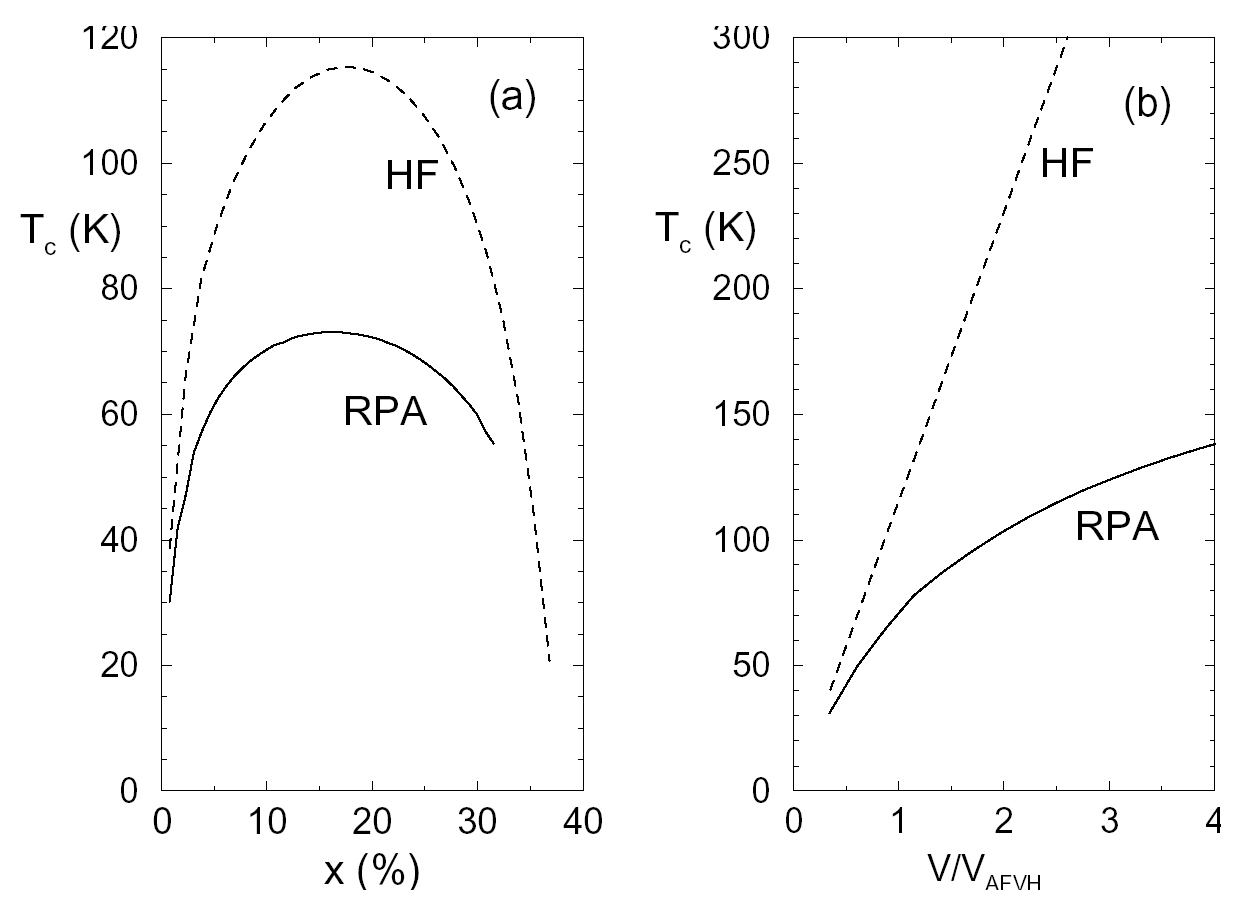


Рис.12. (а) Критична температура ТС антиферомагнітної моделі Ван-Хова як функція феміонної густини х. 4t11 = 0.165 еВ, 2t20 = 0.0435, як пропонується феноменологією високотемпературної надпровідності. Суцільна лінія – самоузгоджене RPA наближення. Пунктирна лінія – результат наближення середнього поля чи HF. (b) ТС як функція константи обміну V. 4t11 та 2t20 такі ж самі як в (а). Густина відповідає максимуму ТС в (а). VAFVH=0.075 eB (зв’язок використаний в []).

зв’язку, коли теорія збуpень формально вже не може використовуватися і треба підсумовувати найбільш важливі діаграми до нескінчених ступенів і розраховувати їх самоузгоджено.

Результати самоузгодженого RPA наближення наведені на Рис.3 у порівнянні з розрахунками отриманими в наближенні середнього поля. На Рис.3(а) представлена залежність *ТС* від густини дірок, а на Рис.3(b) – від сили остовного

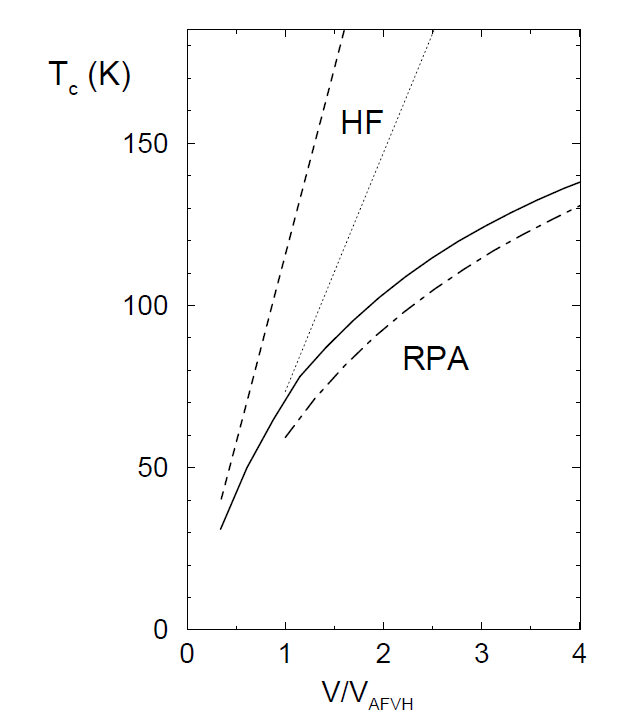


Рис.13. Вплив розчинених домішок на TС: суцільна лінія – “чистий” RPA розрахунок, штрих-пунктирна лінія – “брудний” RPA, пунктирна лінія – “чисте” HF наближення, точки – “брудне”. Домішки набагато слабкіше впливають на розрахунки сильного зв’язку ніж на HF наближення.

потенціалу при оптимальному допуванні (~20%). Видно, що всі основні особливості антиферомагнітної моделі Ван-Хова є стійкими до корекцій високого ступеню. Критична температура досягає максимуму при оптимальному допуванні і залишається достатньо високою (~80 К), хоча й на 50% меншою за значення отримане в наближенні середнього поля. Залежність від концентрації дірок більш полога у порівнянні з наближенням середнього поля, але це ближче до експерименту. Залежність від *V* демонструє, що наближення середнього поля сильно переоцінює критичну температуру для сильного зв’язку. RPA є ближчою до досліджень електронної дифракції в модельних надпровідниках, роблячи менш швидким зростання *ТС* зі зростанням сили зв’язку. Однак недолік RPA моделі полягає в тому, що вона не може описати падіння *ТС* при такому сильному зв’язку, коли має відбуватися перехід до Бозе конденсації локальних пар. Нарешті, Рис.4 демонструє вплив різноманітних ізотропних розсіянь на домішках (унітарна границя) на *ТС*: результат для системи з 10% домішок з *U*=0.25 eВ наведена у порівнянні з “чистою” системою. Вплив на залежність *Tc*(*V*) досить малий (менш ніж 10% падіння у RPA випадку) для такої значної кількості “бруду”. Як видно, для 10% домішок система все ще надпровідник.

Підводячи підсумок, в цій главі в рамках RPA наближення була досліджена антиферомагнітна модель Ван-Хова. Використовуючи числові розрахунки, було встановлено, що в рамках моделі  симетрія SCOP стійка до впливу допування, домішок та корекцій високого ступеня. Інша важливі особливості що спостерігаються експериментально в дожованих дірками купратах, а саме, “оптимальне” допування та високе *ТС* залишаються також. RPA наближення призводить до більш близьких до експерименту результатів та ED розрахунків ніж наближення середнього поля.