

Спиновые флуктуации и высокотемпературная сверхпроводимость в купратах

Н.М. Плакида

ОИЯИ, ЛТФ, Дубна

Коуровка 25.02.2014

План лекций

Высокотемпературные сверхпроводники

Спектр АФМ спиновых возбуждений:

эксперимент и теория : $t - J$ модель

Сильно коррелированные электронные системы:

модели и методы вычислений

- ▶ Электронный спектр купратов: модель Хаббрда
- ▶ Сверхпроводимость: расширенная модель Хаббрда

Публикации

A.A. Vladimirov, D. Ihle, N.M. Plakida,

Dynamic spin susceptibility in the t-J model

Phys. Rev. B **80**, 104425 (2009)

A.A. Vladimirov, D. Ihle, N.M. Plakida,

Dynamic spin susceptibility of superconducting cuprates:

A microscopic theory of the magnetic resonance mode

Phys. Rev. B **83**, 024411 (2011)

N.M. Plakida, V.S. Oudovenko,

Electronic spectrum in high-temperature cuprate superconductors.

JETP **104**, 230 (2007)

N.M. Plakida, V.S. Oudovenko,

*On the theory of superconductivity in the extended Hubbard model:
Spin-fluctuation pairing.*

Eur. Phys. Jour. **86**, 115 (2013) [*arXiv:1301.4347*]

N.M. Plakida, V.S. Oudovenko,

*Kinematic spin-fluctuation mechanism of high-temperature
superconductivity. [arXiv:1402.4934](https://arxiv.org/abs/1402.4934)*

Nikolay Plakida

SPRINGER SERIES IN SOLID-STATE SCIENCES 166

High-Temperature Cuprate Superconductors

Experiment, Theory, and Applications

 Springer

Nikolay Plakida

High-Temperature Cuprate Superconductors

Experiment, Theory, and Applications

With 161 Figures

570 pp.
with 161 Figures
and 1440 references

ISSN 0171-1873

ISBN 978-3-642-12632-1

e-ISBN 978-3-642-12633-8

DOI 10.1007/978-3-642-12633-8

 Springer

Сверхпроводимость (СП)

1911 г. - открытие СП в ртути (Kamerlingh Onnes)

1911 – 1985 гг. низкотемпературные СП ($T_c < 23 \text{ K}$)

1986 г. открытие медно-оксидных СП с $T_c = 30 \text{ K}$
(Bednorz and Muller)

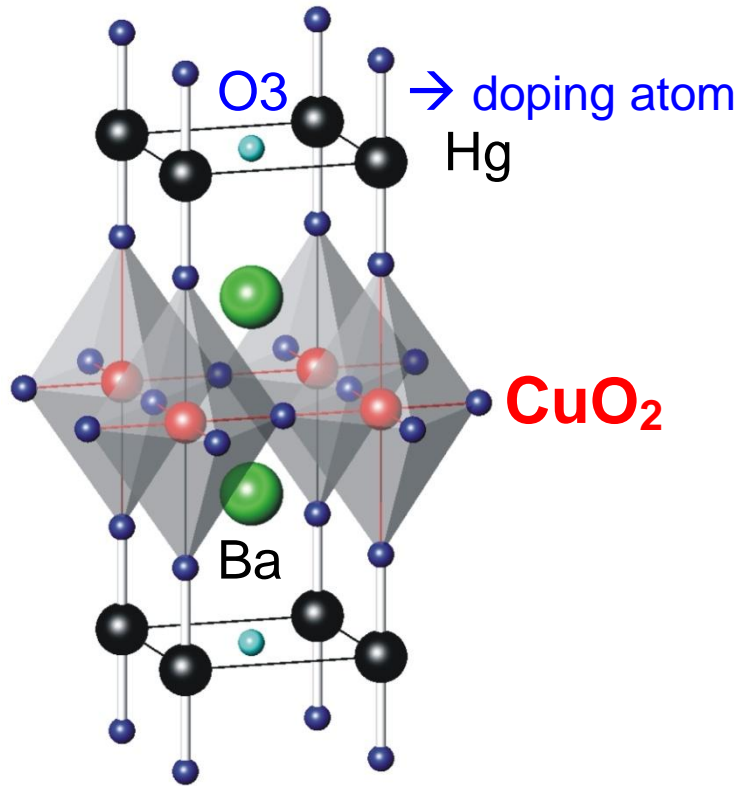
1987 г. высокотемпературные СП: $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$
($T_c = 100 \text{ K} > T_{N_2} = 77 \text{ K}$)

2008 г. СП на основе железа (Fe-AS)

(Y. Kamihara, T. Watanabe, M. Hirano, and H. Hosono)

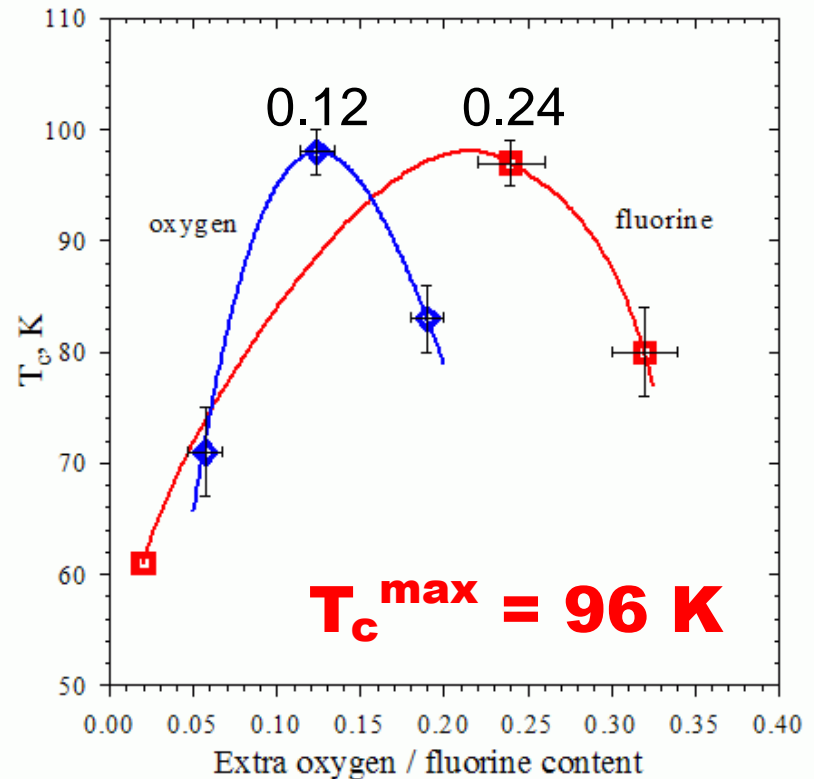
(максимальные $T_c = 55 \text{ K}$ в $\text{Sm Fe As O}_{1-x}\text{F}_x$)

Медно-оксидные ВТСП соединения (купраты)



Структура Hg-1201
(HgBa₂CuO_{4+δ})

A.M. Balagurov et al.

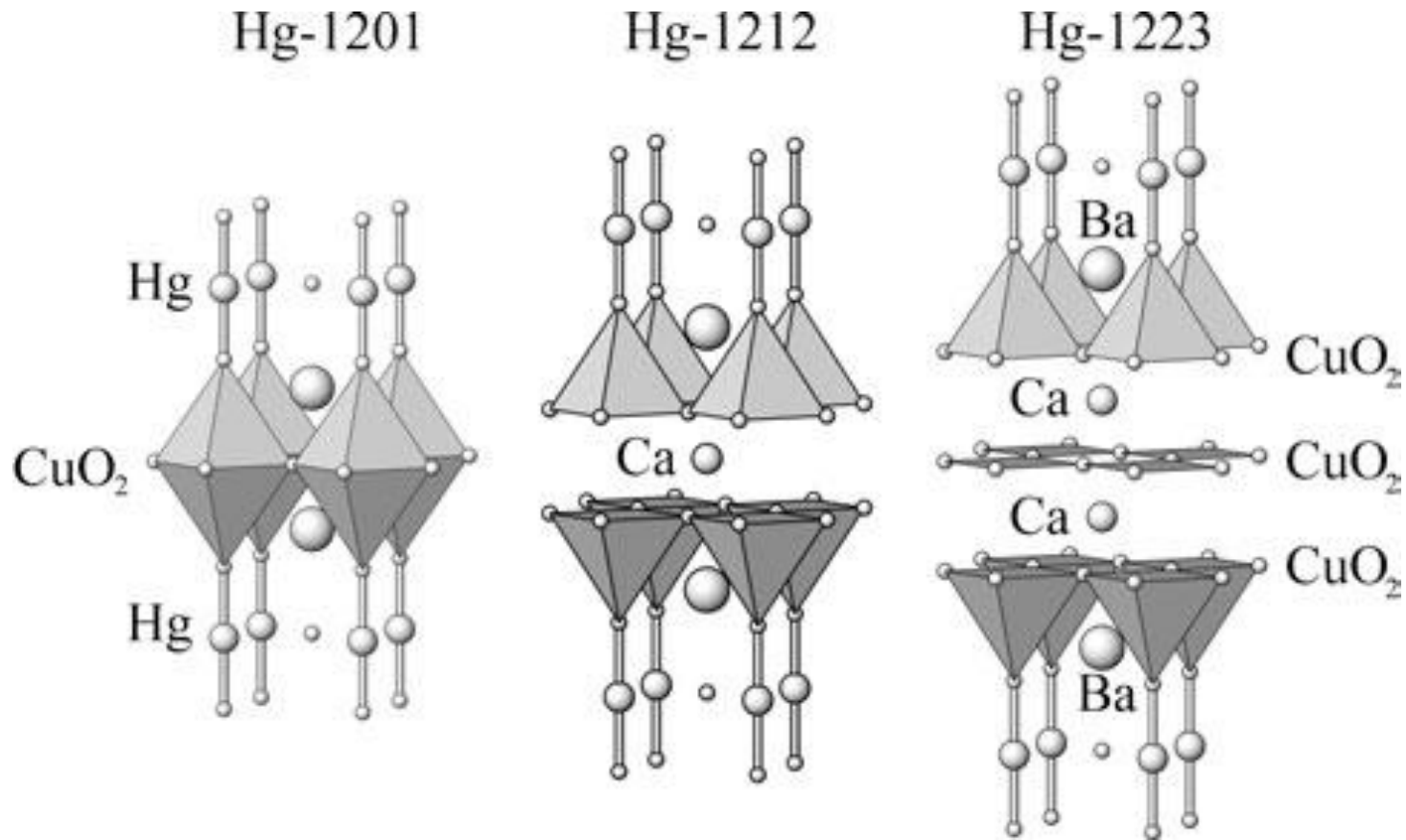


T_c зависит от легирования
(O²⁻ или F¹⁻)

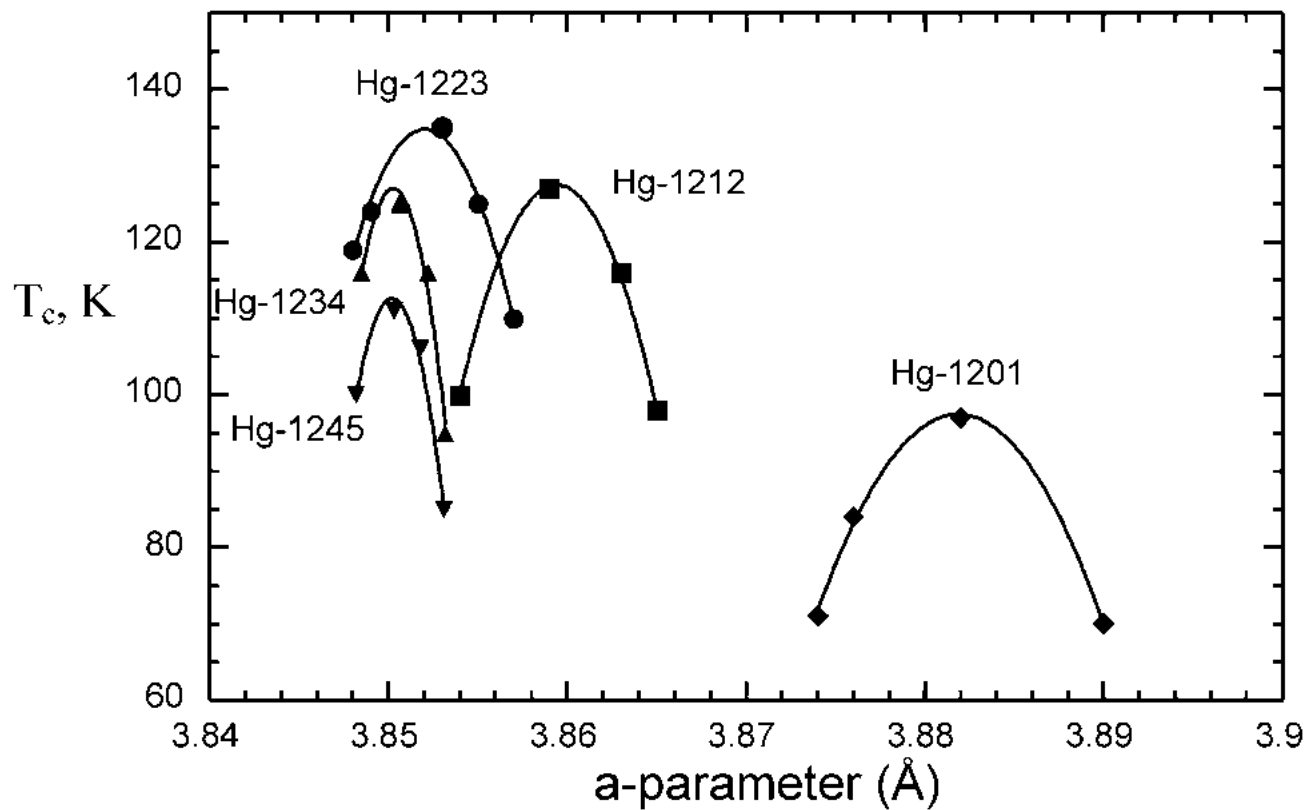
Abakumov et al. Phys.Rev.Lett. (1998)

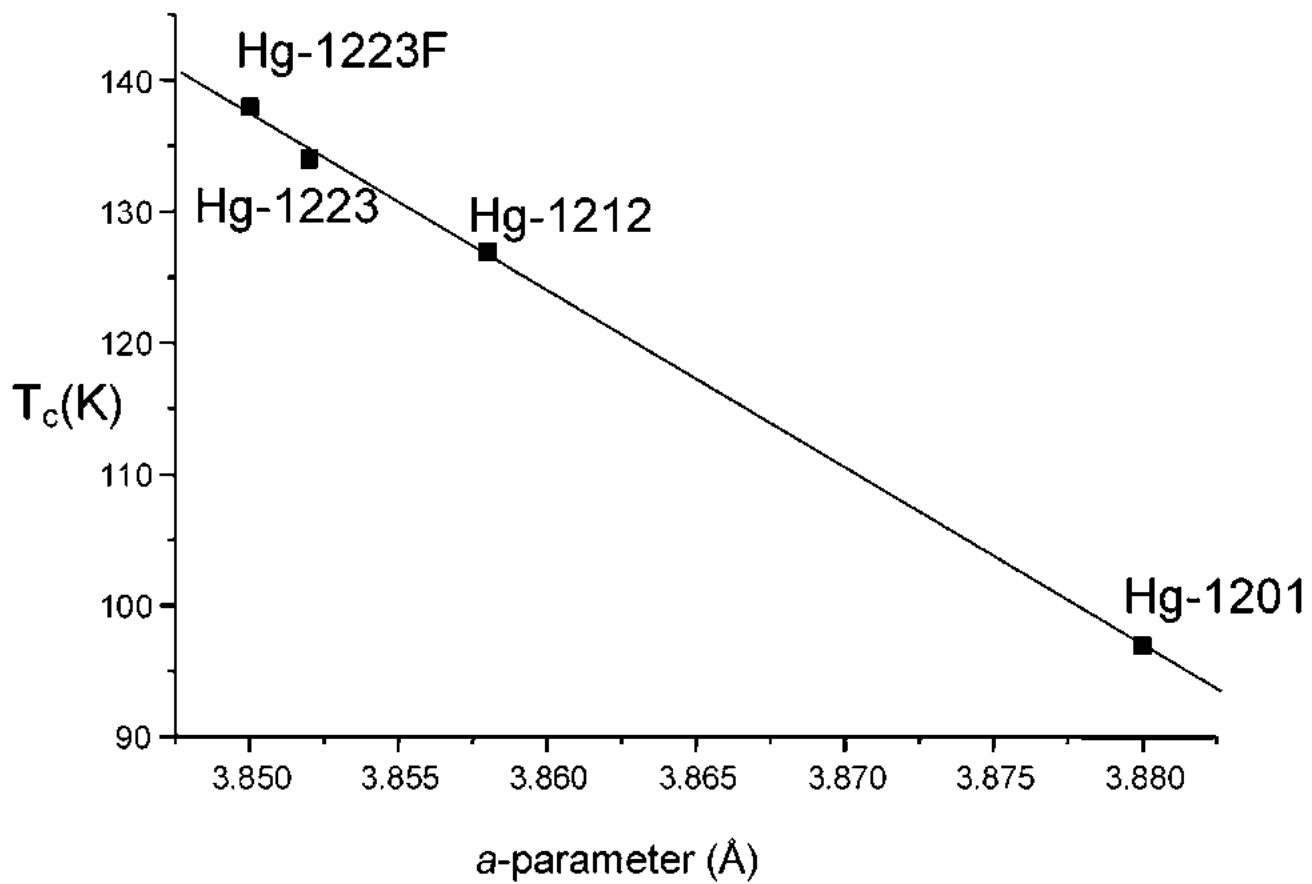
Максимальные $T_c = 135 \text{ K}$ (168 K) в соединениях ртути

$\text{Hg Ba}_2\text{Ca}_{(n-1)}\text{Cu}_n\text{O}_{(2n+2+x)}$ (Hg-12(n-1)n) для $n=3$

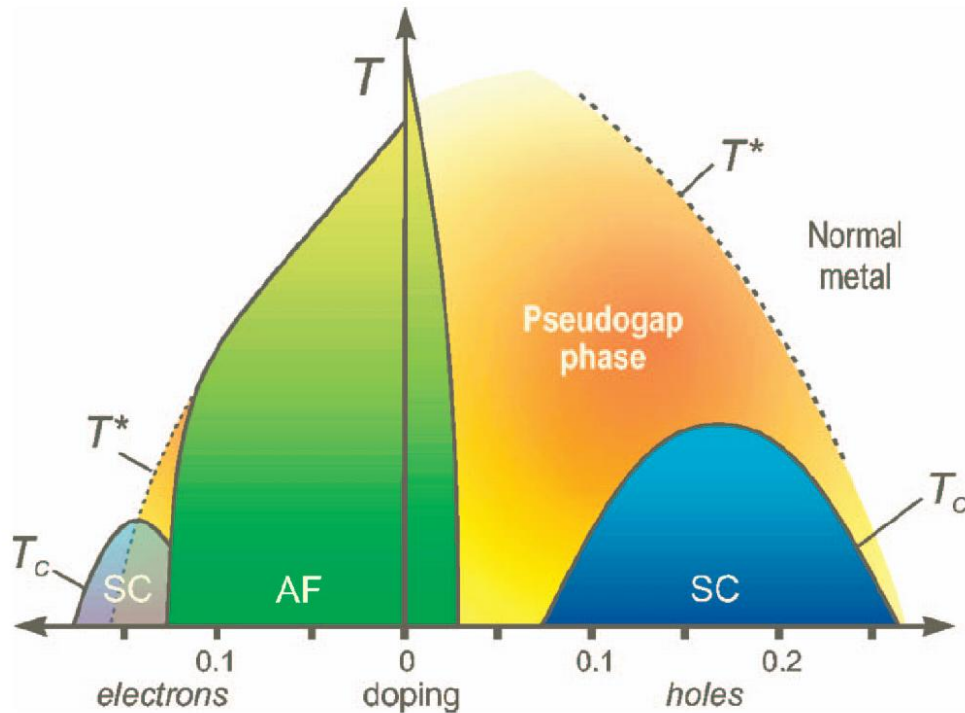


Зависимость T_c в соединениях ртути от числа слоев
и параметров решетки [Antipov (2002)]





Фазовая диаграмма купратных ВТСП

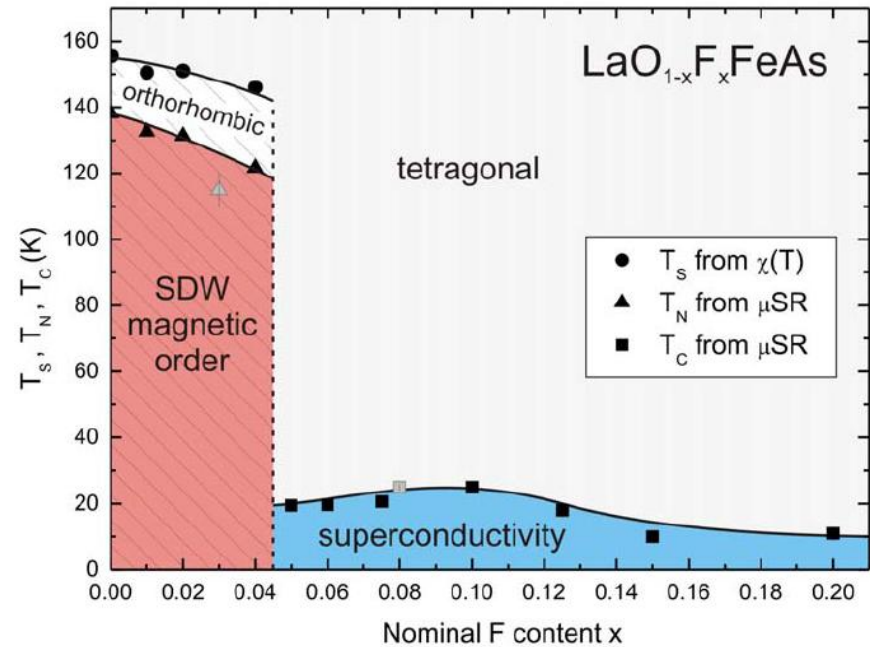
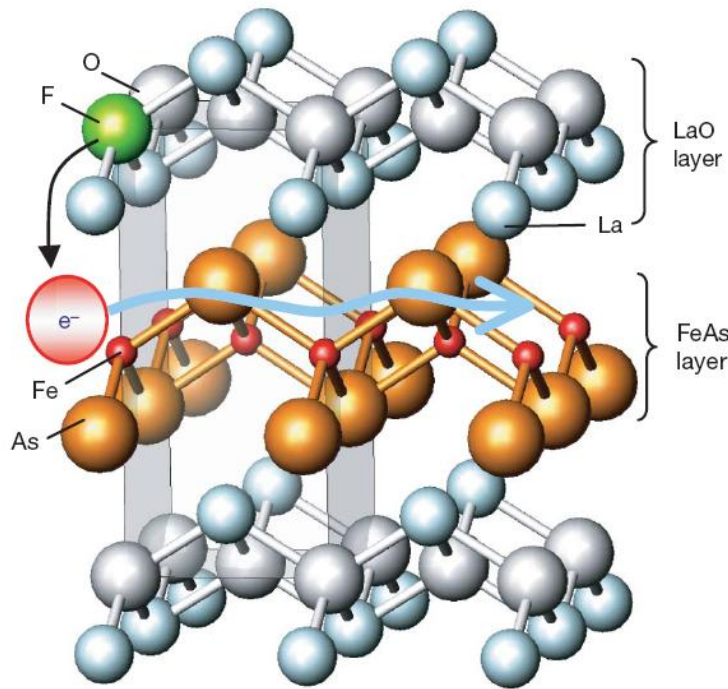


*Fisher et al. (2007):
Rev. Mod. Phys.
79, 353.*

Исходные соединения – антиферромагнитные изоляторы. Сверхпроводимость существует лишь при легировании их дырками или электронами. Максимальное T_c возникает при оптимальном легировании $\delta_{opt} \sim 0.16$. T^* - температура появления псевдощели

Новый класс сверхпроводников на основе железа (Fe-As)

Discovered by Y. Kamihara, et al., *J. Am. Chem. Soc.* **130**, 3296 (2008)



Crystal structure and phase diagram of $\text{La O}_{1-x}\text{F}_{1-x}\text{Fe As}$

Takahashi et al. *Nature* **453**, 376 (2008) $T_c = 43 \text{ K}$ at 4 Gpa

Максимальное $T_c = 55 \text{ K}$ в $\text{Sm Fe As}_{1-x}\text{F}_{1-x}$

Superconductivity in Mg B₂ with T_c = 39 K

Discovered by J. Akimisu,

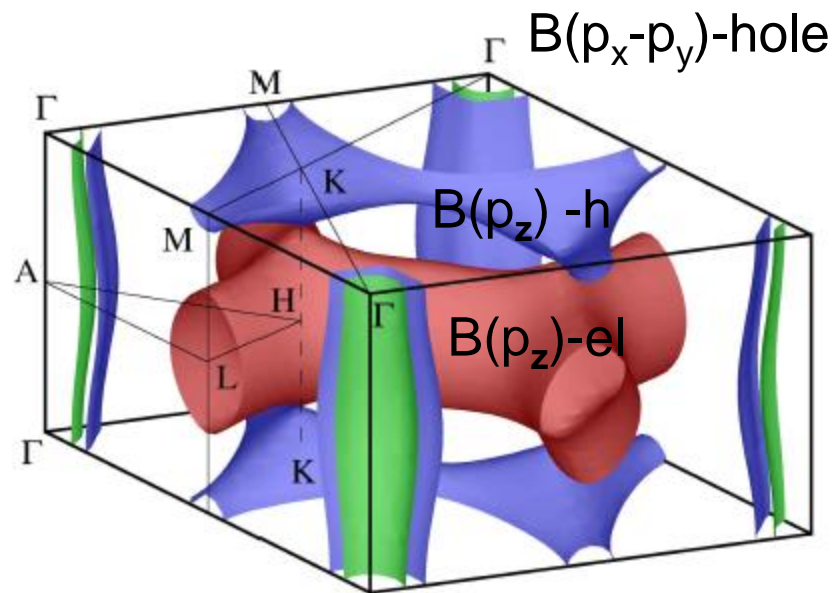
in Proceedings of the Symposium on Transition Metal Oxides,
Sendai, 10 January 2001

J. Nagamatsu, N. Nakagawa, T. Muranaka, Y. Zenitani, and
J. Akimitsu, *Nature* **410**, 63–64 (2001).

Mg²⁺ (B¹⁻)₂ где B¹⁻ (2p²)

Электрон-фононный механизм
(изотоп - эффект: $\alpha_B = 0.26$),
двухзонный сверхпроводник,
сильная связь ($\lambda \sim 1$)
высокие частоты фононов
(300 - 700 cm⁻¹)

«аналог долгожданного
металлического водорода»



Поверхность Ферми B(p_x-p_y)
J. Kortus, I.I. Mazin, et al. (2001)

- ▶ Механизмы высокотемпературной сверхпроводимости:
электрон-фононный или
спин-флуктуационный ?

$$T_C \simeq \omega_{ph} e^{-\frac{1}{\lambda}} \quad \lambda = N(0) \frac{g_{ep}^2}{M\omega_{ph}^2} - \mu^*, \quad \mu^* = \frac{V_C}{1 + V_C \ln(E_F/\omega_{ph})}$$

Высокие T_C при эл.-фон. механизме можно получить

- при высокой плотности электронных состояний $N(0)$
- при сильном эл.-фон. взаимодействии g_{ep}
- высокой частоте фононов ω_{ph}

Оценки дают: $T_C^{\max} \leq 40$ К при оптимальном выборе параметров:

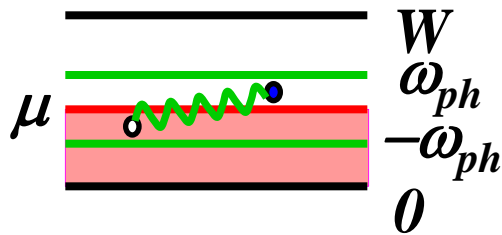
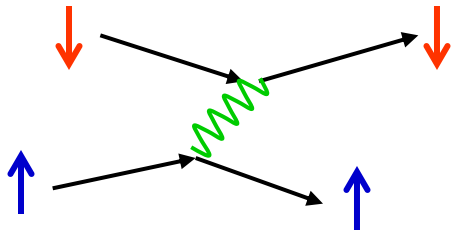
Nb_3Ge : $T_C = 23,2$ К (1973), - сильная связь λ , $N(0)$ велико

MgB_2 : $T_C = 40$ К, (2001) – сильная связь, высокая $\omega_{ph} \propto \sqrt{1/M_B}$

В купратах: $\omega_{ph} \sim 400$ К, но $N(0)$ мало и для получения $T \sim 100$ К необходима сильная связь g_{ep}

Электрон-фононный механизм спаривания

Теория Бардина-Купера-Шриффера-Боголюбова (1957 г.)



Волновая функция куперовской пары

$$\langle \varphi(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \rangle = \langle \Psi_{\uparrow}(\mathbf{x}_1) \Psi_{\downarrow}(\mathbf{x}_2) \rangle$$

$$= \sum_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}\uparrow} c_{-\mathbf{k}\downarrow} \rangle \exp \{ i \mathbf{k}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \}$$

Уравнение для щели $\Delta(\mathbf{k})$

$$\Delta(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{q}} V(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \frac{\Delta(\mathbf{q})}{2E(\mathbf{q})} \tanh \frac{E(\mathbf{q})}{2T},$$

где спектр $E(\mathbf{q}) = \sqrt{\varepsilon(\mathbf{q})^2 + \Delta(\mathbf{q})^2}$

Температура СП

$$T_c \simeq \omega_{ph} e^{-\frac{1}{\lambda}}$$

$$\lambda = N(0) \frac{g_{ep}^2}{M\omega_{ph}^2} - \mu^*, \quad \mu^* = \frac{V_C}{1 + V_C \ln(E_F/\omega_{ph})}$$

Изотопический эффект:

$$T_c \sim M^{-\alpha}, \quad \alpha = 1/2$$

MgB₂: T_c = 40 K, (2001)

Электрон-фононный механизм

Е.Г. Максимов УФН 170, 1033. (2000)

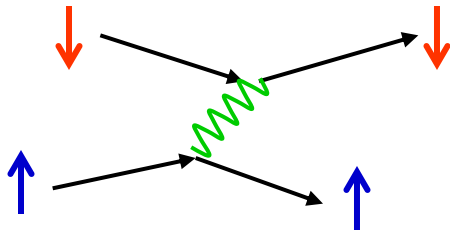
High-temperature superconductivity: the current state.

E.G. Maksimov, M.L. Kulić, O.V. Dolgov,

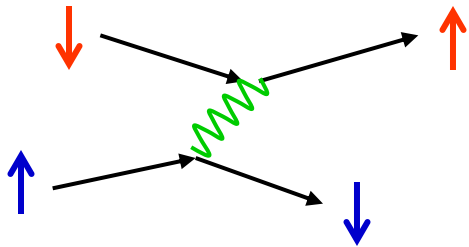
Adv. in Cond. Mat. Phys., Article ID 423725 (2010).

Bosonic Spectral Function and the Electron-Phonon
Interaction in HTSC Cuprates

Спин-флуктуационный механизм спаривания



$V_{ph}(\mathbf{q}) = g^2 \chi_{ph}(\mathbf{q}) > 0$
 рассеяние на фононах



$V_{sf}(\mathbf{q}) = -g^2 \chi_{sf}(\mathbf{q}) < 0$
 рассеяние на спиновых флуктуациях

Для спин-флуктуационного спаривания

$$V_{sf}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) = -g_{sf}^2 \chi_{sf}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) < 0,$$

и уравнение для щели $\Delta(\mathbf{k})$

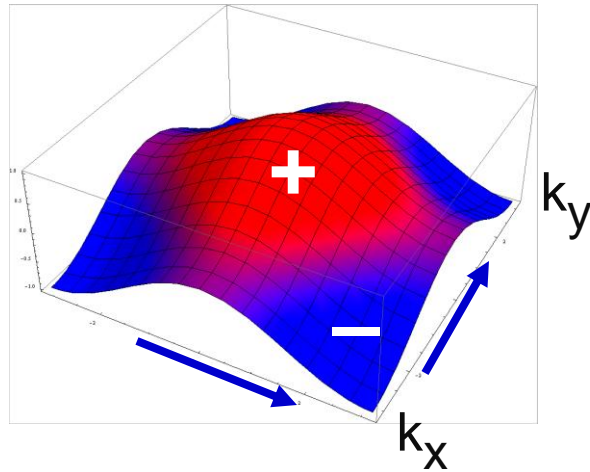
$$\Delta(\mathbf{k}) = - \sum_{\mathbf{q}} g_{sf}^2 \chi_{sf}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \frac{\Delta(\mathbf{q})}{2E(\mathbf{q})} \tanh \frac{E(\mathbf{q})}{2T},$$

Ненулевое решение возможно лишь для знакопеременной $\Delta(\mathbf{k})$, например,

$$d\text{-симметрии} : \Delta(\mathbf{k}) = -\Delta(\mathbf{k}'),$$

где $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{Q}$, $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ – антиферромагнитный вектор в 2D зоне Бриллюэна

Симметрия щели: $C_4 (s)$ и $C_2 (d)$

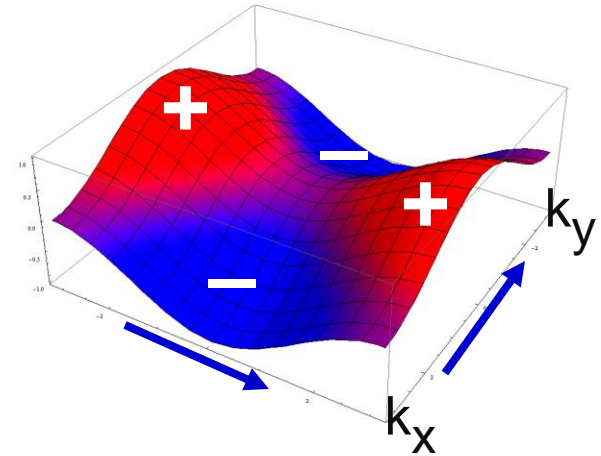


s-волновая симметрия:

$$\Delta_S(k_x, k_y) = \Delta_0 (\cos k_x + \cos k_y)$$

$$\Delta_S(k_x, k_y) = \Delta_S(k_y, k_x)$$

$$\Delta_S(k_x, k_y) = 0 \text{ для } |k_x| + |k_y| = \pi$$



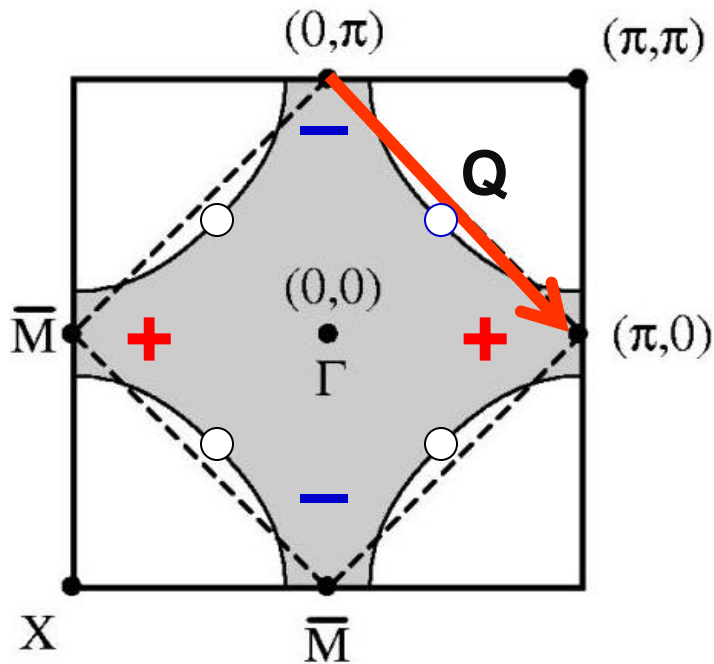
d-волновая симметрия:

$$\Delta_d(k_x, k_y) = \Delta_0 (\cos k_x - \cos k_y)$$

$$\Delta_d(k_x, k_y) = -\Delta_d(k_y, k_x)$$

$$\Delta_d(k_x, k_y) = 0 \text{ для } k_x = \pm k_y$$

Спин-флуктуационное спаривание в 2D зоне Бриллюэна



○ нули СП щели d -симметрии на поверхности Ферми

Для АФ спиновой восприимчивости

$$\chi_{sf}^{AF}(\mathbf{q}) = \frac{\chi(\mathbf{Q})}{1 + \xi_{AF}^2 (\mathbf{q} - \mathbf{Q})^2}$$

при большой величине ξ_{AF} спиновая восприимчивость имеет острый максимум при \mathbf{q} , равным АФ волновому вектору

→ $(\mathbf{Q}) = (\pi, \pi)$
и связывает СП щели d -симметрии $\Delta_d(\pi, 0) > 0$ и $\Delta_d(0, \pi) < 0$

Спин–флуктуационный механизм спаривания

M. Cyrot (1986): Solid State Comm. **60**, 253.

A possible origin for heavy Fermion superconductivity.

Miyake, K., Schmitt-Rink, S., and Varma, C.P. (1986):

Phys. Rev. B **34**, 6554.

Spin-fluctuation-mediated even-parity pairing in heavy-fermion superconductors.

Scalapino D.J. (1995): Phys. Reports **250**, 329.

[arXiv:cond-mat/9908287].

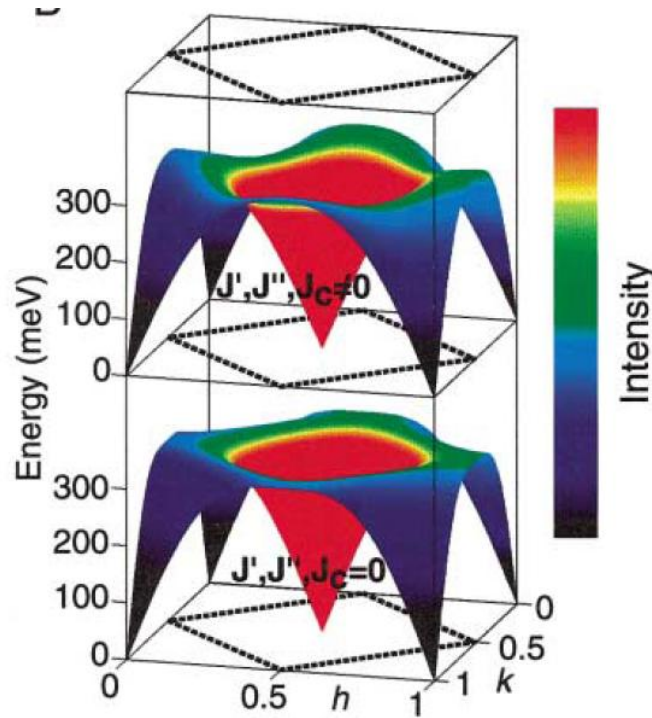
The case for $d_{x^2-y^2}$ pairing in the cuprate superconductors.

Спектр спиновых возбуждений в ВТСП-купратах: эксперимент

В нормальной фазе: переход от спиновых волн в системе локализованных спинов $S = \frac{1}{2}$ на узлах меди Cu^{2+} ($3d^9$) в нелегированных соединениях к широкому спектру сильно затухающих спиновых возбуждений в спиновой жидкости при конечной концентрации носителей (электронов или дырок)

В сверхпроводящей фазе: появление резонансного пика в спектре спиновых флуктуаций при низких температурах (ниже T_c) при энергиях $E_r \sim 40$ мэВ в оптимально-легированных дырками купратах и $E_r \sim 30$ мэВ при слабом легировании

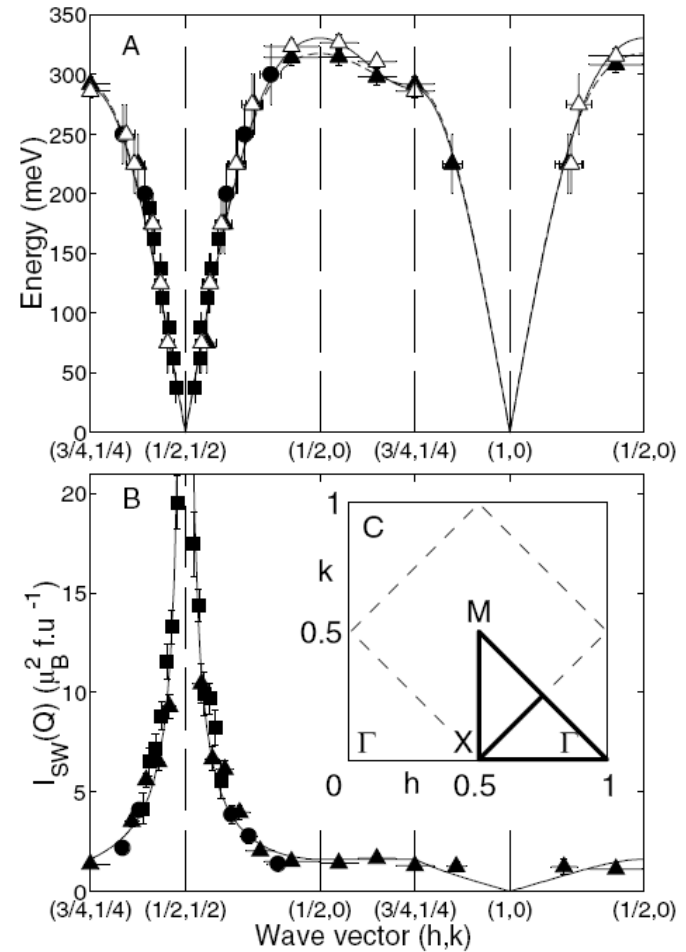
Спектр спиновых волн и интенсивность неупругого магнитного рассеяния нейтронов в La_2CuO_4



$$\omega(\mathbf{k}) = 4SZ_c J \sqrt{1 - \gamma^2(\mathbf{k})}$$

$$\gamma(\mathbf{k}) = (1/2)(\cos k_x a + \cos k_y a)$$

$$J = 136 \text{ meV}, \quad Z_c = 1.17, \quad S = 1/2$$

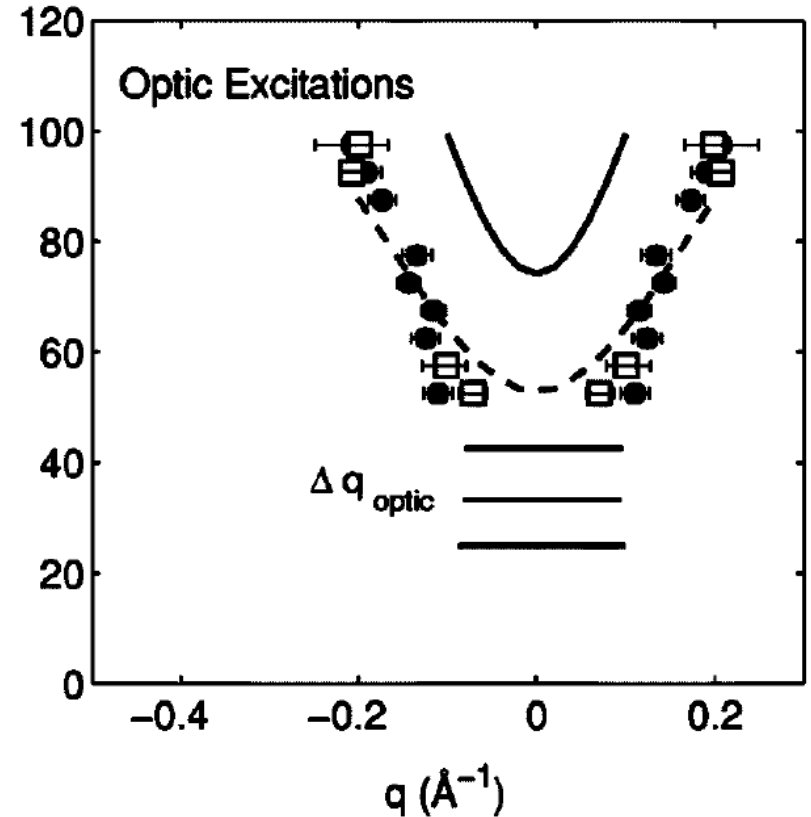
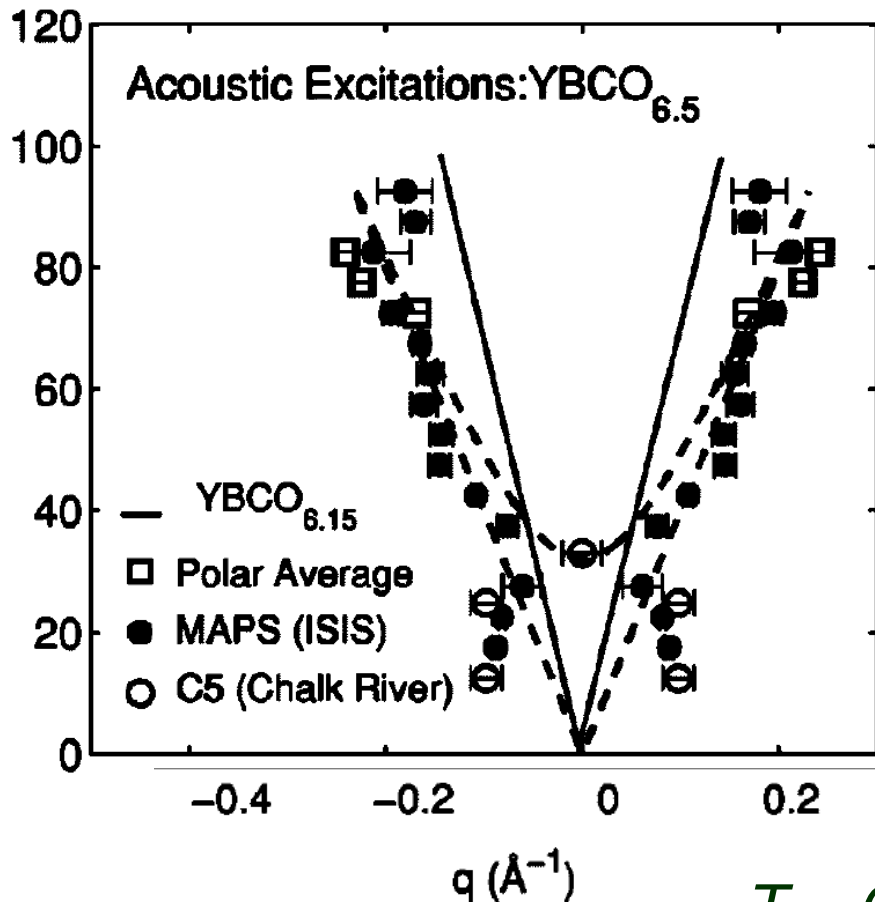


Coldea et al. PRL **86**, 5377 (2001)

Spin excitations in YBCO [Stock et al. PRB 71, 024522 (2005)]

Two layer system: acoustic (odd) and optic (even) modes

$$\omega_{(\text{ac}/\text{op})}(q_x, q_y) = 2J \left\{ 1 - \gamma^2(\mathbf{q}) + (J_{\perp}/2J) [1 \mp \gamma(\mathbf{q})] \right\}^{1/2}$$

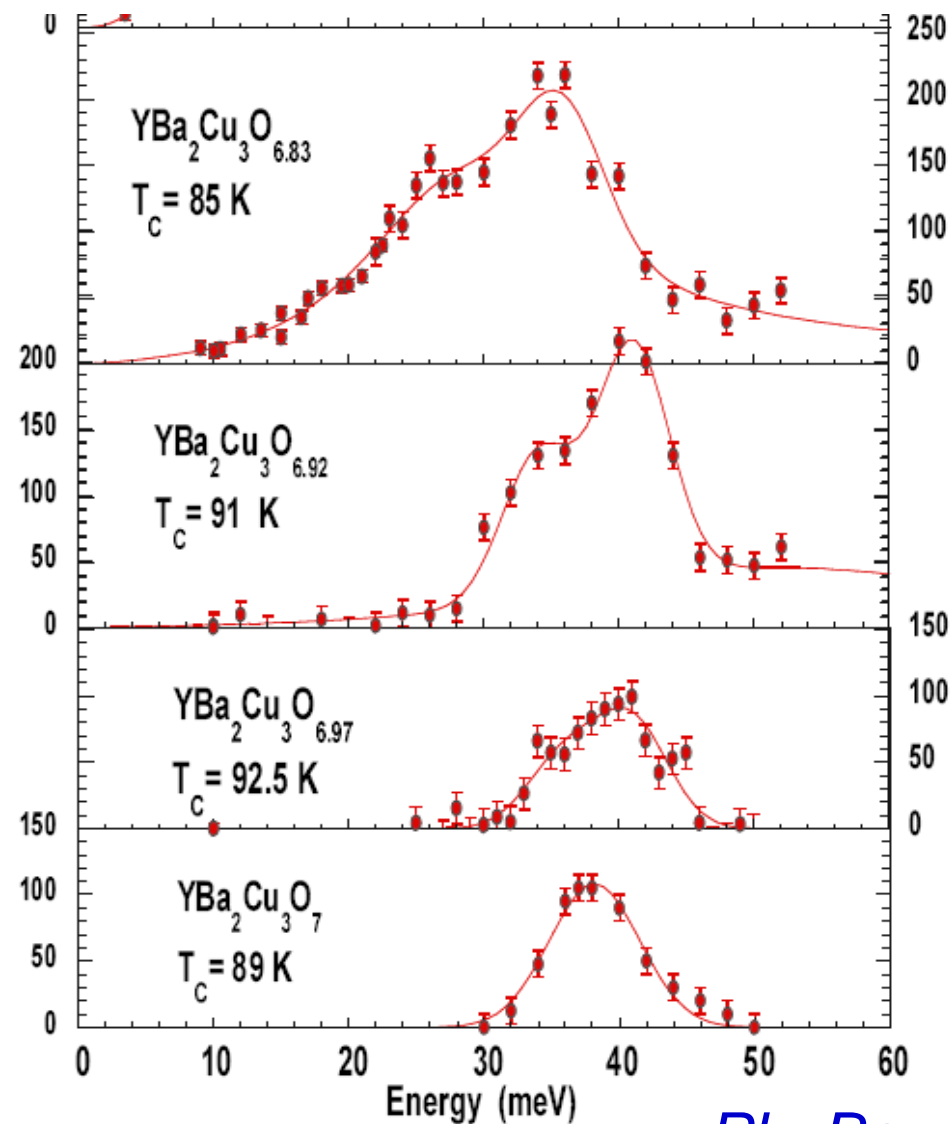


$T = 6 \text{ K}$ $J \sim 120 \text{ meV}$, $J_{\perp} \sim 10 \text{ meV}$

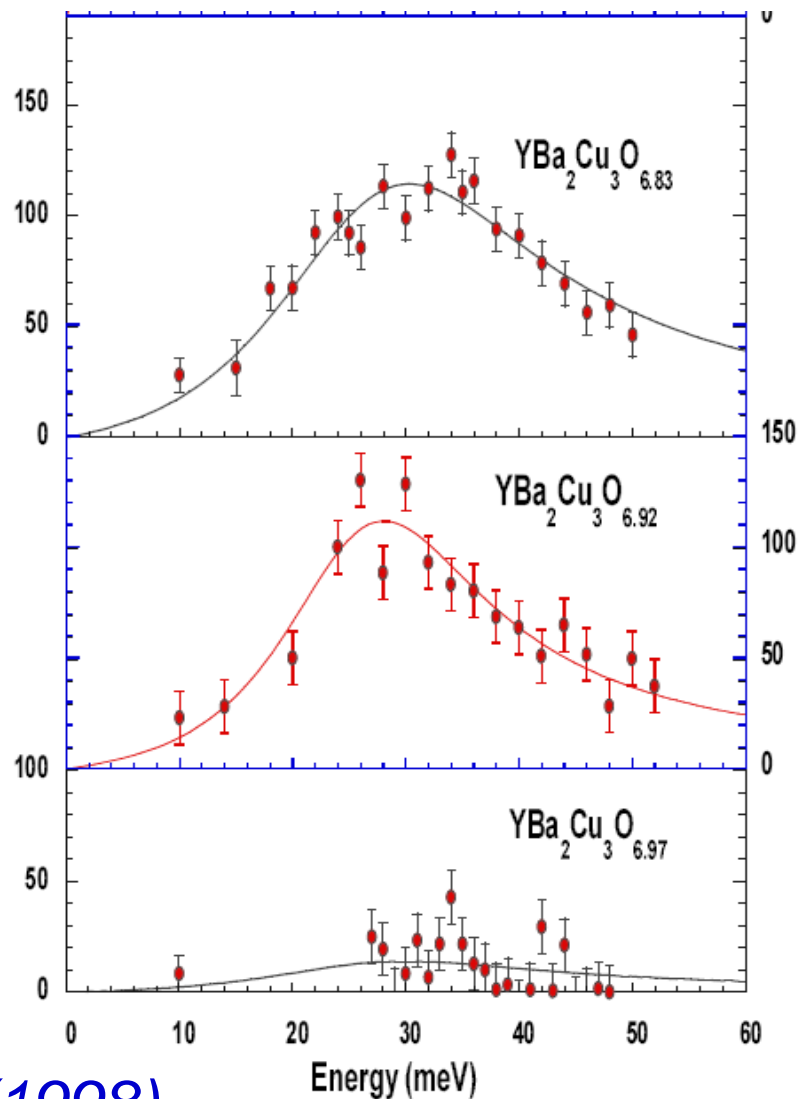
Неупругое магнитное рассеяние нейтронов в $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$

SC State, 5 K, $Q=(\pi,\pi)$

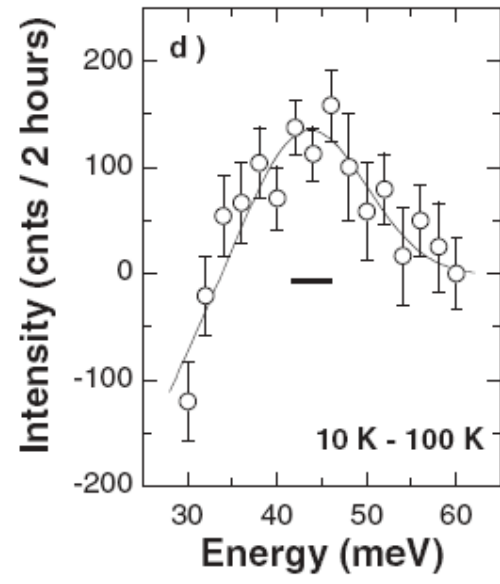
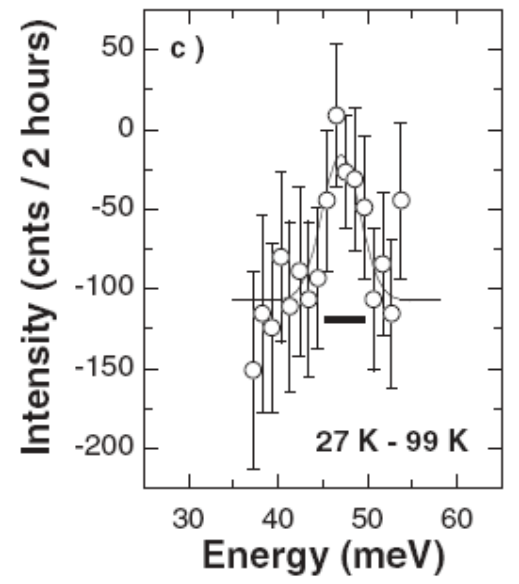
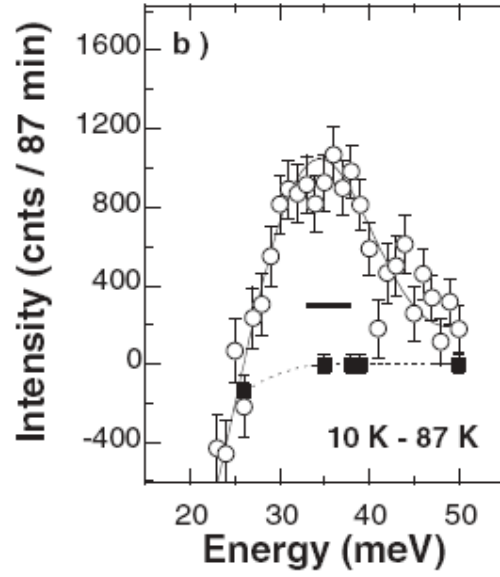
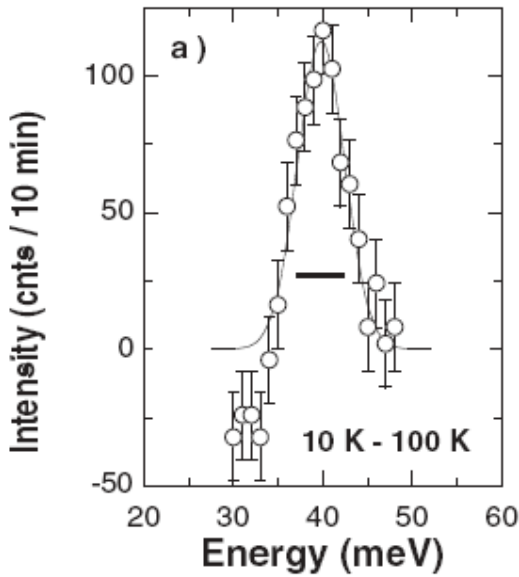
Normal State, 100 K, $Q=(\pi,\pi)$



$\text{Im } \chi_{\text{odd}}$ (Arbitrary Units)



Ph. Bourges (1998)

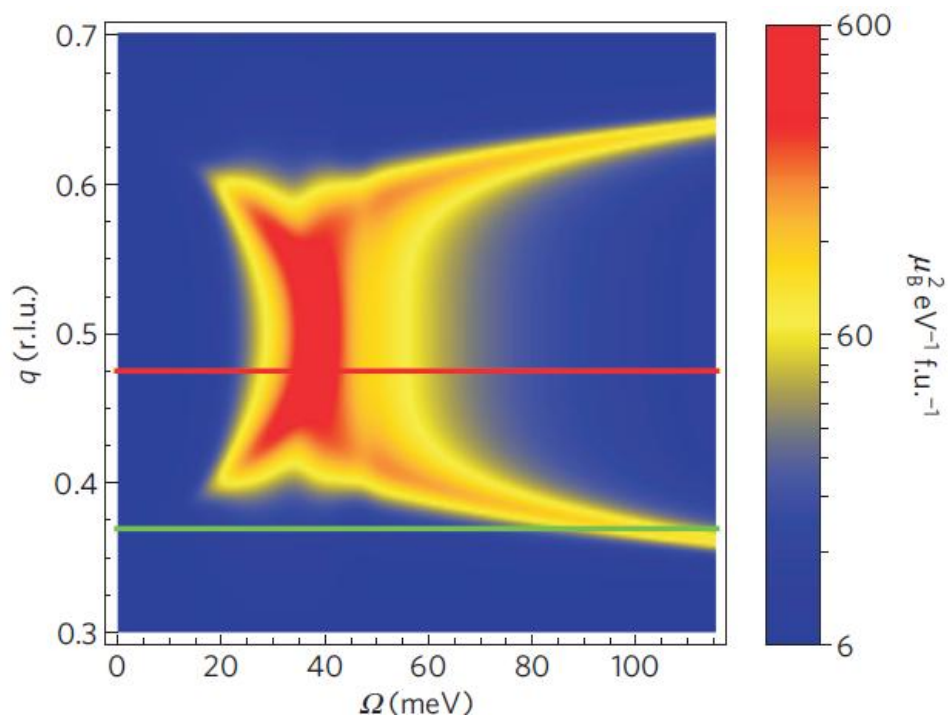


«Резонансная мода»
в сверхпроводящем
состоянии вблизи АФМ
вектора $Q = (\pi, \pi)$

- (a) $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.95}$ ($T_c = 93\text{K}$)
- (b) $\text{YBa}_2(\text{Cu Ni})_3\text{O}_7$ ($T_c = 80\text{K}$)
- (c) TI-2201 ($T_c \sim 90\text{K}$)
- (d) Bi-2212 ($T_c = 91\text{K}$)

*Magnetic resonant
excitations in High- T_c
superconductors*
Y. Sidis, et al., *phys. stat.
sol. (b)* **241**, 1204 (2004) .

Strength of the spin-fluctuation-mediated pairing interaction in a high-temperature superconductor
T. Dahm, B. Keimer, et al., Nature Physics (2009)



Solution of the Eliashberg equation for the spin-fluctuation pairing

$$V_{\text{eff}}(\mathbf{Q}, \Omega) = \frac{3}{2} \bar{U}^2 \chi(\mathbf{Q}, \Omega),$$

with $U = 1.6$ eV
 results in $T_c = 170$ K

Figure 1 | Intensity of spin excitations along $\mathbf{Q} = q(2\pi, 2\pi)$ resulting from numerical fits to the INS spectra of $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.6}$ at $T = 5$ K. The

Resonant inelastic x-ray scattering (RIXS)

($2p$ core hole created at the Cu L_{23} edge)

$$\chi(\omega, \mathbf{Q}) = \lim_{\Gamma \rightarrow 0^+} \langle i | (R_{\omega_i, \mathbf{Q}}^{\varepsilon_i \varepsilon_o})^\dagger \frac{1}{\omega + E_i + i\Gamma/2 - H} R_{\omega_i, \mathbf{Q}}^{\varepsilon_i \varepsilon_o} | i \rangle,$$

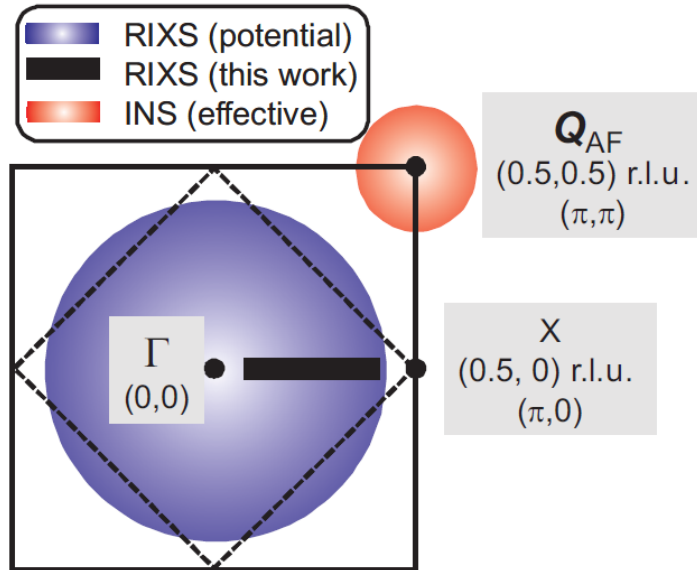
$$= -i \int_0^\infty e^{i\omega t} \langle i | (\varepsilon_o^* \times \varepsilon_i \cdot S_{\mathbf{Q}}(t))^\dagger (\varepsilon_o^* \times \varepsilon_i \cdot S_{\mathbf{Q}}(t=0)) | i \rangle dt.$$

where
$$R_{\omega_i, \mathbf{Q}}^{\varepsilon_i \varepsilon_o} = \sigma^{(0)} \varepsilon_i \cdot \varepsilon_o^* + \frac{\sigma^{(1)}}{s} \varepsilon_o^* \times \varepsilon_i \cdot S_{\mathbf{Q}} \quad S_{\mathbf{Q}} = \sum_j e^{i(\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_j)} S_j$$

effective scattering operator for a photon with the initial (i), outgoing (o)

energy, momentum, polarization, $\omega = \omega_i - \omega_o$ $\mathbf{Q} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_o$ $\varepsilon_{i(o)}$

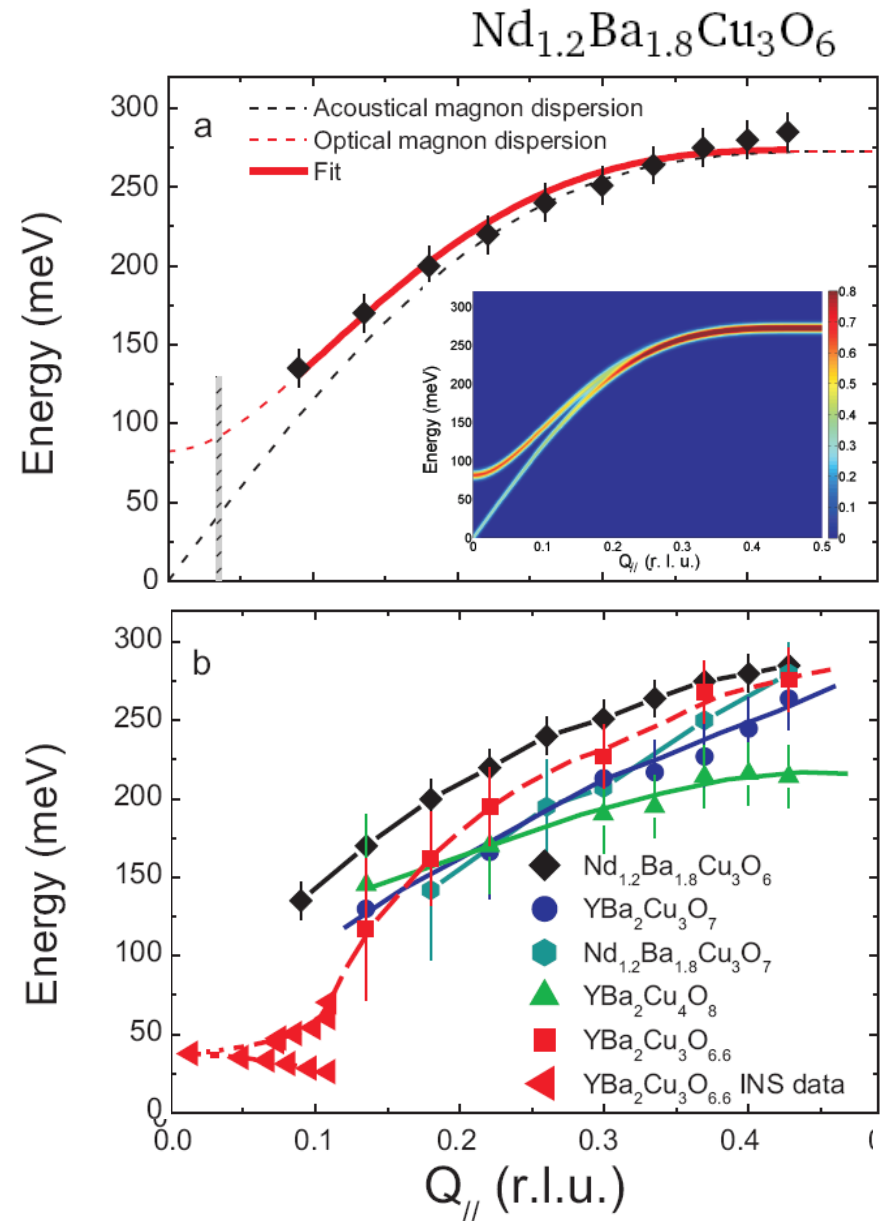
Resonant inelastic x-ray scattering



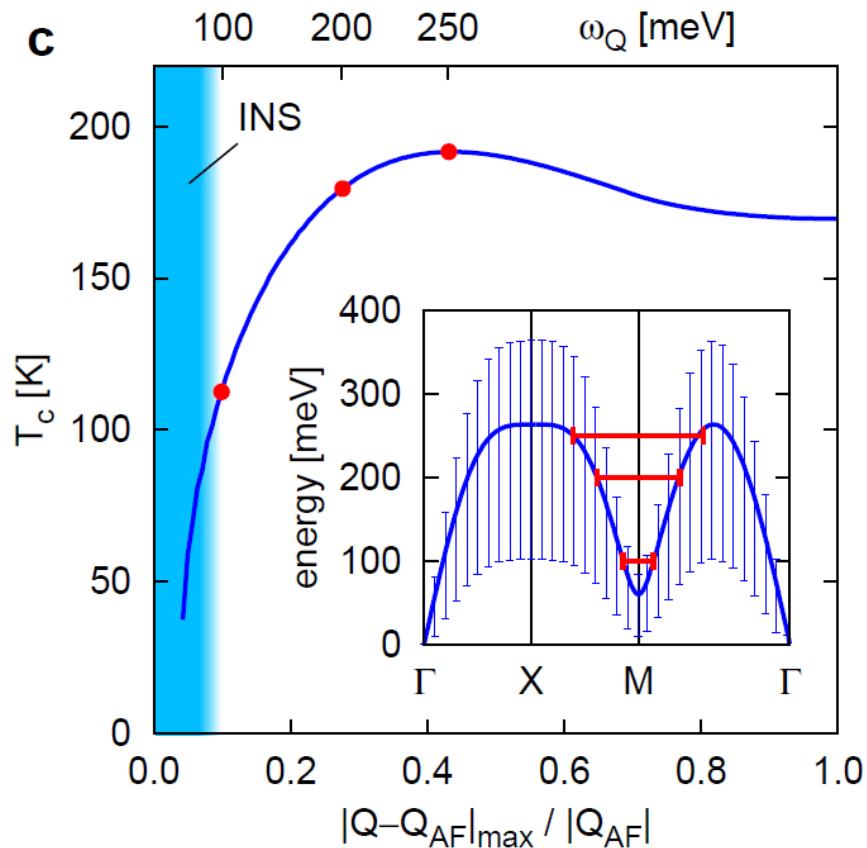
Intense paramagnon excitations in a large family of high-temperature superconductors

M. Le Tacon, et al.,

Nature Physics **7**, 725 (2011)



“В большом классе сверхпроводников, включая $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ и $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ наблюдается спектр парамагнонов с дисперсией и интенсивностью, сравнимой для магнонов в нелигированных купратах”

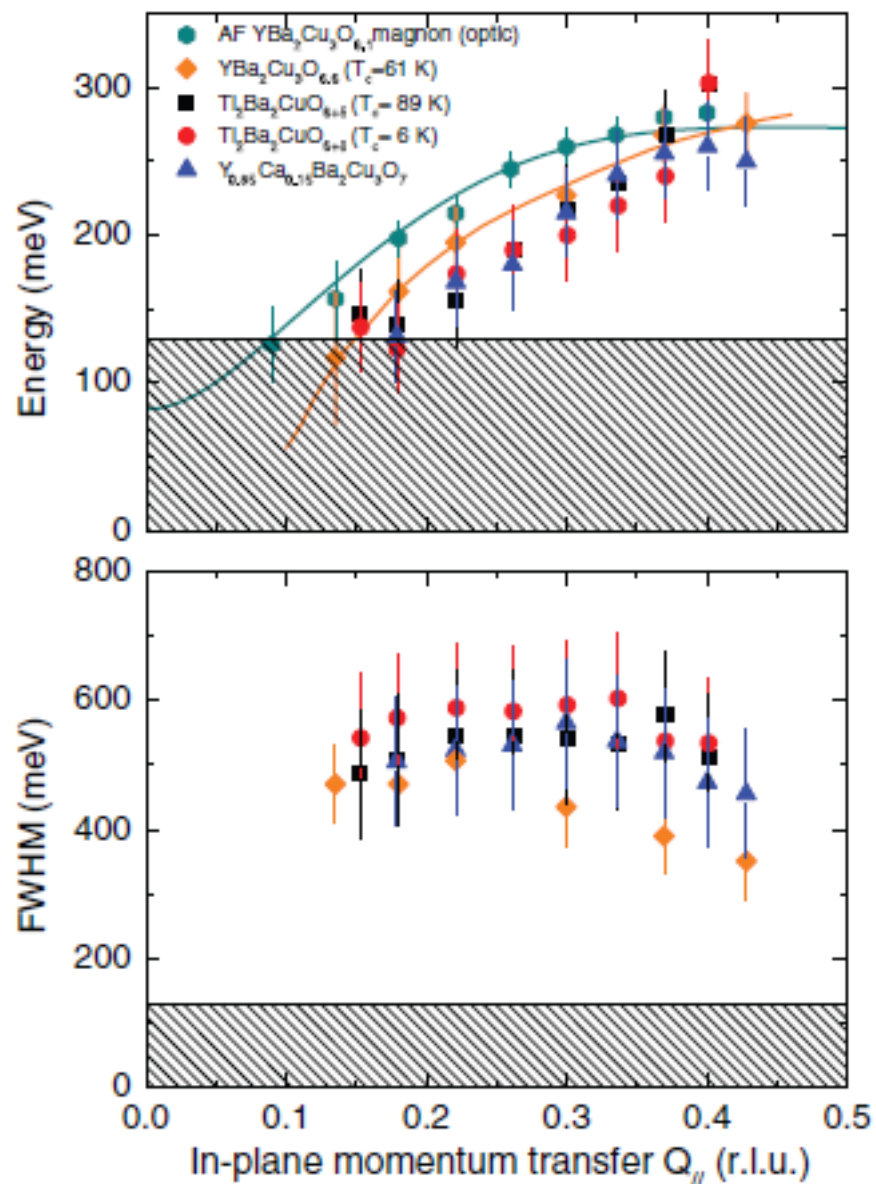
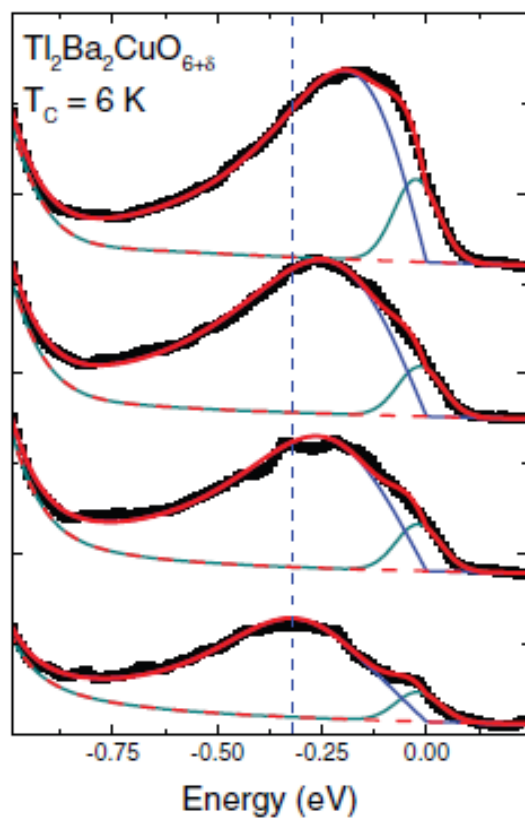


Решение уравнений
Элиашберга для
сверхпроводника со
спектром спиновых
возбуждений, измеренным в
 $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$
приводит к температуре СП
перехода порядка **~ 200 K**

Dispersive spin excitations in highly overdoped cuprates revealed by resonant inelastic x-ray scattering

M. Le Tacon, et al.

PRB 88, 020501(R) (2013)



- Спиновые возбуждения в купратах:
теория

Предел слабых корреляций ($U \ll t$, модели ферми-жидкости)

RPA
$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\chi_0(\mathbf{q}, \omega)}{1 - g_{\mathbf{q}} \chi_0(\mathbf{q}, \omega)} \quad \text{где } g_{\mathbf{q}} = U, J(q)$$

FLEX (fluctuation-exchange approximation):
самосогласованный расчет восприимчивости и функций Грина

$$\chi_0^{s,c}(q, \omega_n) = -T \sum_{k,m} [G(k+q, \omega_n + \omega_m) G(k, \omega_m) \pm F(k+q, \omega_n + \omega_m) F(k, \omega_m)] .$$

$$G(p, \omega_n) = \frac{i\omega_n Z(p, \omega_n) + X(p, \omega_n)}{[i\omega_n Z(p, \omega_n)]^2 - X^2(p, \omega_n) - \phi^2(p, \omega_n)} ,$$

$$F(p, \omega_n) = \frac{\phi(p, \omega_n)}{[i\omega_n Z(p, \omega_n)]^2 - X^2(p, \omega_n) - \phi^2(p, \omega_n)}$$

RM in the superconducting state: Spin-1 exciton scenario (Eremin et al., etc.)

$$1 - g_Q \operatorname{Re} \chi_0(Q, E_{\text{res}}) = 0,$$

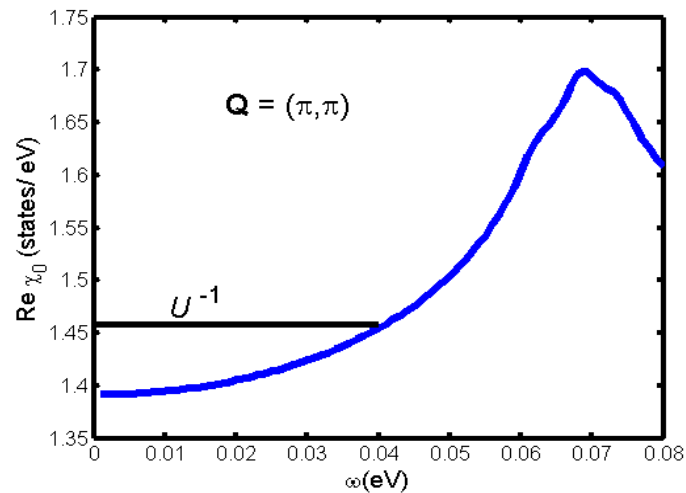
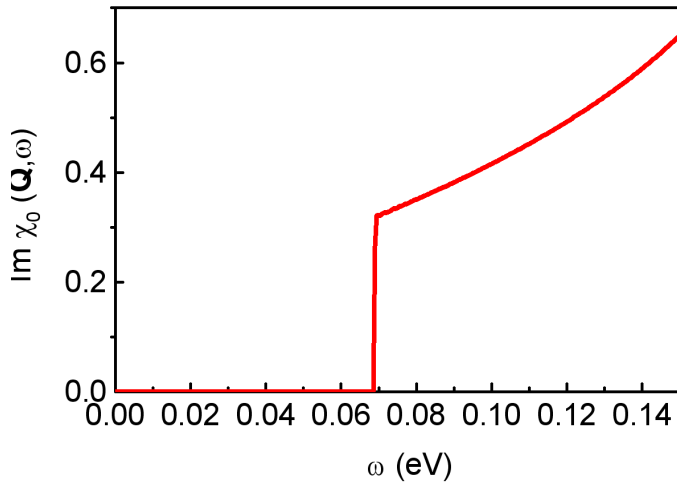
$$\operatorname{Im} \chi_0(Q, E_{\text{res}}) = 0$$

$$g_Q = (U, J(Q))$$

$$\operatorname{Im} \chi(\mathbf{q}, \Omega) = \frac{\operatorname{Im} \chi_0(\mathbf{q}, \Omega)}{(1 - U \operatorname{Re} \chi_0(\mathbf{q}, \Omega))^2 + (U \operatorname{Im} \chi_0(\mathbf{q}, \Omega))^2}$$

$$\operatorname{Im} \chi_0(\mathbf{Q}, \Omega) \propto \frac{1}{4} \sum_k \left(1 - \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} + \Delta_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}}{E_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}} \right) \delta(\omega - E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}})$$

d-wave: $\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = -\Delta_{\mathbf{k}}$



$$E_r \approx 40 \text{ meV}$$

$$E_{\text{sc}} \approx 2 \Delta \geq$$

$$\omega_c = 70 \text{ meV}$$

$$T_c \approx \Delta / 2$$

$$\approx 200 \text{ K}$$

Спин-фермионные модели (*Pines, Chubukov, Abanov*)

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\chi_0 \xi^2}{1 + \xi^2(\mathbf{q} - \mathbf{Q})^2 - (\omega/\Delta_{\text{sw}})^2 - \Pi(\mathbf{q}, \omega)} \quad \mathbf{Q} = (\pi, \pi)$$

где спиновая щель : $\Delta_{\text{sw}} = c_{\text{sw}}/\xi$ исчезает при $\xi \rightarrow \infty$

Поляризационный оператор

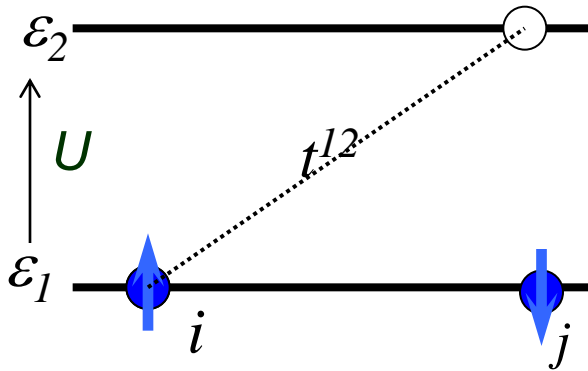
$$\Pi_{\Omega} = -2Ni\bar{g}\xi^2 \int \frac{d^2k d\omega}{(2\pi)^3} [G(k, \omega)G(k + Q, \omega + \Omega) + F(k, \omega)F(k + Q, \omega)]$$

в нормальной фазе $\text{Im}\Pi(\mathbf{q}, \omega) \simeq \omega \gamma_{\mathbf{q}} \xi^2$

и восприимчивость имеет релаксационный характер

$$\text{Im} \chi(\mathbf{q}, \omega) \propto (\omega/\omega_s) / [(1 + \xi^2(\mathbf{q} - \mathbf{Q})^2)^2 + (\omega/\omega_s)^2]$$

В пределе сильных корреляций , $U \gg t$,
 низкоэнергетические (спиновые) возбуждения могут
 быть описаны в рамках t - J модели для одной подзоны



Виртуальные перескоки между
 хаббардовскими подзонами
 приводят к АФМ обменному
 взаимодействию спинов на
 соседних узлах решетки

$$H = H_t + H_J = -\sum_{i,j,\sigma} t_{i,j} \hat{c}_{i,\sigma}^+ \hat{c}_{j,\sigma} + J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \vec{S}_j$$

где АФМ взаимодействие $J = 4 t^2 / U \approx 0.3 t \approx 0.13 \text{ eV}$

$\hat{c}_{i,\sigma}^+ = c_{i,\sigma}^+ (1 - n_{i,-\sigma}) = X_i^{\sigma 0}$ – спроектированные операторы,

действующие в однократно-заполненной подзоне, $n_{i,-\sigma} = 0$

В пределе сильных корреляций спектр спиновых возбуждений исследуется в рамках t - J модели

Exact diagonalization (*Dagotto, Prelovsek, Maekawa*)

Slave-boson representation (*Fukuyama, Ogata, etc.*)

Diagram technique (*Izyumov, Onufrieva, Val'kov, etc.*)

Mori projection technique for GFs in equation of motion method
(*Mancini, Prelovsek, Sega, Sherman, Plakida, M. Eremin,*)

A diagram technique for Hubbard operators:

*Yu.A. Izyumov and B.M. Letfulov,
J. Phys.: Condens. Matter, 2, 8905 (1990).*

Transverse GF $\mathcal{D}_\perp(x - x') = -\langle T(\tilde{X}_i^{+-}(\tau)\tilde{X}_{i'}^{-+}(\tau')) \rangle$ in GRPA

$$\chi(k) \equiv -\mathcal{D}_\perp(k) = \chi_0(k) / \{ [1 - \Lambda(k)][1 - Q(k)] + \chi_0(k)[\Phi(k) + J(k)] \}$$

$$\chi_0(k) = \frac{1}{2}(nn_0/T)\delta_{\omega_n,0} - \Pi(k). \quad n_0 = 2e^{\beta\mu} / (1 + 2e^{\beta\mu})$$

$$\begin{pmatrix} \Pi(k) \\ Q(k) \\ \Lambda(k) \\ \Phi(k) \end{pmatrix} = \frac{1}{N} \sum_{k_1} \begin{pmatrix} 1 \\ \varepsilon(k_1) \\ \varepsilon(k_1 - k) \\ \varepsilon(k_1)\varepsilon(k_1 - k) \end{pmatrix} G_\uparrow^0(k_1 - k) G_\downarrow^0(k_1)$$

$$G_\sigma(k, i\omega_n) = 1/[i\omega_n - \xi_\sigma(k)] \quad \xi_\sigma(k) = (1 - n_{-\sigma})\varepsilon(k) + \varepsilon_\sigma$$

Метод проектирования Мори в уравнениях для функций Грина

Динамическую спиновую восприимчивость в парамагнитной фазе

$$\chi_{\mathbf{q}}(\omega) = -\langle\langle S_{\mathbf{q}}^+ | S_{\mathbf{q}}^- \rangle\rangle_{\omega} = -\sum_{\mathbf{R}_{ij}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_{ij}} \langle\langle S_i^+ | S_j^- \rangle\rangle_{\omega}. \quad S_i^{\sigma} = X_i^{\sigma\bar{\sigma}}$$

удобно вычислять через функцию релаксации

$$\Phi_{\mathbf{q}}(\omega) \equiv ((S_{\mathbf{q}}^+ | S_{\mathbf{q}}^-))_{\omega} \quad \text{в виде} \quad \chi_{\mathbf{q}}(\omega) = \chi_{\mathbf{q}} - \omega\Phi_{\mathbf{q}}(\omega),$$

где введено скалярное произведение Кубо-Мори ($\beta = 1/k_{\text{B}} T$):

$$((A|B))_{\omega} = -i \int_0^{\infty} dt e^{i\omega t} (A(t), B), \quad ((i\dot{A}|B))_{\omega} = \langle\langle A|B \rangle\rangle_{\omega}$$

$$(A(t), B) = \int_0^{\beta} d\lambda \langle A(t - i\lambda) B \rangle \quad (i\dot{A}, B) = \langle [A, B] \rangle$$

$$A(t) = \exp(iHt) A \exp(-iHt) \quad i\dot{A} = [A, H]$$

Дифференцируя функцию релаксации $\Phi_{ij}(t-t') = \langle (S_i^+(t), S_j^-(t')) \rangle$ по двум временам получаем цепочку уравнений

$$\omega \langle (i\dot{S}_{\mathbf{q}}^+ | -i\dot{S}_{-\mathbf{q}}^-) \rangle_{\omega} = m(\mathbf{q}) + \langle (-\ddot{S}_{\mathbf{q}}^+ | -i\dot{S}_{-\mathbf{q}}^-) \rangle_{\omega},$$

$$\omega \langle (-\ddot{S}_{\mathbf{q}}^+ | -i\dot{S}_{-\mathbf{q}}^-) \rangle_{\omega} = \langle (-\ddot{S}_{\mathbf{q}}^+ | -\ddot{S}_{-\mathbf{q}}^-) \rangle_{\omega},$$

решение которой позволяет найти точное представление для динамической спиновой восприимчивости в виде

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = -\langle \langle S_{\mathbf{q}}^+ | S_{-\mathbf{q}}^- \rangle \rangle_{\omega} = \frac{m(\mathbf{q})}{\omega_{\mathbf{q}}^2 + \omega \Sigma(\mathbf{q}, \omega) - \omega^2}$$

где $m(\mathbf{q}) = \langle [i\dot{S}_{\mathbf{q}}^+, S_{-\mathbf{q}}^-] \rangle = 8(1 - \gamma_{\mathbf{q}})[J |C_{1,0}| - t F_{1,0}]$

$F_{n,m} = \langle X_0^{\sigma 0} X_{\mathbf{R}}^{0\sigma} \rangle$, $C_{n,m} = \langle S_0^+ S_{\mathbf{R}}^- \rangle$ и статическая

восприимчивость $\chi_{\mathbf{q}} = \chi(\mathbf{q}, 0) = \langle S_{\mathbf{q}}^+, S_{-\mathbf{q}}^- \rangle = m(\mathbf{q})/\omega_{\mathbf{q}}^2$.

The spin - fluctuation spectrum in a generalized MFA:

$$m(\mathbf{q}) = (-\ddot{S}_{\mathbf{q}}^+, S_{-\mathbf{q}}^-) = \omega_{\mathbf{q}}^2 (S_{\mathbf{q}}^+, S_{-\mathbf{q}}^-).$$

$$\omega_{\mathbf{q}}^2 = 16J^2(1 - \gamma_{\mathbf{q}})\alpha |C_{1,0}|(\Delta + 1 + \gamma_{\mathbf{q}}) \\ + 8t^2\lambda_1(1 - \gamma_{\mathbf{q}})(1 - n - F_{2,0} - 2F_{1,1})$$

$$\gamma_{\mathbf{q}} = (1/2)(\cos q_x + \cos q_y)$$

is calculated self-consistently with the static correlation functions

$$F_{n,m} = \langle X_0^{\sigma 0} X_R^{0\sigma} \rangle, C_{n,m} = \langle S_0^+ S_R^- \rangle$$

Parameters α , λ_1 (vertex corrections) defined by the sum rules

$$C_{0,0} = \langle S_0^+ S_0^- \rangle = (1/2)(1 - \delta)$$

Поляризационный оператор определяется временной корреляционной функцией

$$\Sigma(\mathbf{q}, \omega) = [1/m(\mathbf{q})] ((-\ddot{S}_{\mathbf{q}}^+ | -\ddot{S}_{-\mathbf{q}}^-))_{\omega}^{(\text{proper})}$$

$$\Sigma''(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{e^{\beta\omega} - 1}{2\omega m(\mathbf{q})} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle \ddot{S}_{\mathbf{q}}^- | \ddot{S}_{-\mathbf{q}}^+(t) \rangle$$

$$-\ddot{S}_i^+ = [[S_i^+, (H_t + H_J)], (H_t + H_J)] \equiv \sum_{\alpha} F_i^{\alpha}$$

которая вычисляется в приближении взаимодействующих мод



$$\langle \hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} S_j^- \hat{c}_{n\sigma} | \hat{c}_{n'\sigma}^{\dagger}(t) S_{j'}^+(t) \hat{c}_{i'\sigma}(t) \rangle$$

$$= \langle \hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{i'\sigma}(t) \rangle \langle S_j^- S_{j'}^+(t) \rangle \langle \hat{c}_{n\sigma} \hat{c}_{n'\sigma}^{\dagger}(t) \rangle$$

Self-energy induced by hopping in the MCA

$$\begin{aligned} \Sigma_t''(\mathbf{q}, \omega) = & -\frac{\pi(2t)^4(e^{\beta\omega} - 1)}{m(\mathbf{q})\omega} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} \int \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 d\omega_2 \\ & \times [1 - n(\omega_1)] n(\omega + \omega_1 - \omega_2) N(\omega_2) B_{\mathbf{q}_2}(\omega_2) \\ & \times [(\Lambda_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3}^2 + \Lambda_{\mathbf{q}_3, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_1}^2) A_{\mathbf{q}_1}^N(\omega_1) A_{\mathbf{q}_3}^N(\omega + \omega_1 - \omega_2) \\ & - 2\Lambda_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3} \Lambda_{\mathbf{q}_3, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_1} A_{\mathbf{q}_1\sigma}^S(\omega_1) A_{\mathbf{q}_3\sigma}^S(\omega + \omega_1 - \omega_2)], \end{aligned}$$

where $N(\omega) = (e^{\omega/T} - 1)^{-1}$, $n(\omega) = (e^{\omega/T} + 1)^{-1}$, $\mathbf{q} = \mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_3$

Vertex: $\Lambda_{\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2\mathbf{q}_3} = 4(\gamma_{\mathbf{q}_3+\mathbf{q}_2} - \gamma_{\mathbf{q}_1}) \gamma_{\mathbf{q}_3} + \gamma_{\mathbf{q}_2} - \gamma_{\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_3}$

The spectral functions for holes and spin-fluctuations

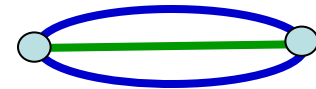
$$\begin{aligned} A_{\mathbf{q}}^N(\omega) &= -(1/\pi) \text{Im} \langle \langle X_{\mathbf{q}}^{0\sigma} | X_{\mathbf{q}}^{\sigma 0} \rangle \rangle_{\omega}, \quad A_{\mathbf{q}\sigma}^S(\omega) = -(1/\pi) \text{Im} \langle \langle X_{\mathbf{q}}^{0\sigma} | X_{-\mathbf{q}}^{0\bar{\sigma}} \rangle \rangle_{\omega} \\ B_{\mathbf{q}}(\omega) &= -(1/\pi) \langle \langle S_{\mathbf{q}}^+ | S_{-\mathbf{q}}^- \rangle \rangle_{\omega} = (1/\pi) \chi''(\mathbf{q}, \omega) \end{aligned}$$

Self-energy in particle-hole bubble approximation neglects spin excitation:

$$\tilde{\Sigma}_t''(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{\pi(2t)^4 Q^2}{m(\mathbf{q})\omega N} \sum_{\mathbf{q}_1} \sum_{\omega_1 = \pm E_{\mathbf{q}_1}} \sum_{\omega_2 = \pm E_{\mathbf{q}-\mathbf{q}_1}} \frac{n(\omega_1) - n(\omega_2)}{4\omega_1\omega_2} \left[\tilde{\Lambda}_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}-\mathbf{q}_1}^N (\omega_1 + \varepsilon_{\mathbf{q}_1})(\omega_2 + \varepsilon_{\mathbf{q}-\mathbf{q}_1}) - \tilde{\Lambda}_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}-\mathbf{q}_1}^S \Delta_{\mathbf{q}_1\sigma} \Delta_{\mathbf{q}-\mathbf{q}_1\sigma} \right] \delta(\omega + \omega_1 - \omega_2). \quad ($$

Here, instead of a spin-excitation decay into 3 excitations:

$$\omega_{\mathbf{Q}} = E_{\mathbf{q}_3} - E_{\mathbf{q}_1} + \omega_{\mathbf{q}_2} \quad \text{with} \quad \omega_{\mathbf{q}_2} \simeq \omega_{\mathbf{Q}}$$



decay only into a particle-hole pair occurs:

$$\omega_{\mathbf{Q}} = E_{\mathbf{Q}+\mathbf{q}} - E_{\mathbf{q}}$$



Resonance mode appears when $\omega_{\mathbf{Q}} < 2\Delta(T)$

Численные результаты

Модельные параметры: $J = 0.3 t$, $t = 0.3 - 0.4$ эВ

1. Электронный спектр и корреляционные функции

$$\varepsilon_{\mathbf{q}} = -4t Q \gamma(\mathbf{q}) - \mu, \quad \gamma_{\mathbf{q}} = (1/2) (\cos q_x + \cos q_y)$$

$$C_{\mathbf{q}} = \langle S_{\mathbf{q}}^+ S_{-\mathbf{q}}^- \rangle = \frac{m(\mathbf{q})}{2\omega_{\mathbf{q}}} \coth \frac{\omega_{\mathbf{q}}}{2T}, \quad F_{\mathbf{q}} = \langle X_{\mathbf{q}}^{\sigma 0} X_{\mathbf{q}}^{0\sigma} \rangle = Q [\exp(\varepsilon_{\mathbf{q}}/T) + 1]^{-1}$$

2. Сверхпроводящее состояние

$$\Delta(\mathbf{q}) = \Delta_0(T) \frac{1}{2} [\cos q_x - \cos q_y], \quad \Delta_0(0) \approx 1.8 T_c$$

$$\delta = 0.2 : T_c = 0.025 t (\approx 90 \text{ K}), \quad \Delta_0(0) \approx 0.044 t$$

$$\delta = 0.09 : T_c = 0.016 t (\approx 59 \text{ K}), \quad \Delta_0(0) \approx 0.028 t$$

Static properties

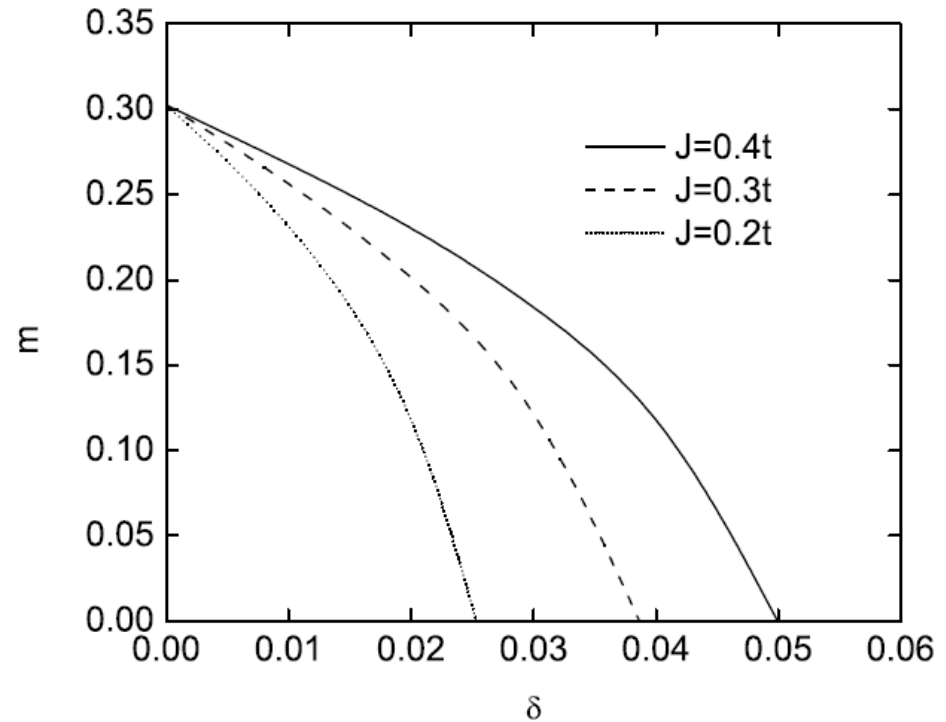
Staggered magnetization at $T=0$: $\omega_{\mathbf{Q}}(T=0) = 0$ $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$

$$m^2 = \frac{3}{2N} \sum_{\mathbf{R}} C_{\mathbf{R}} e^{-i\mathbf{Q}\mathbf{R}} = \frac{3}{2} C.$$

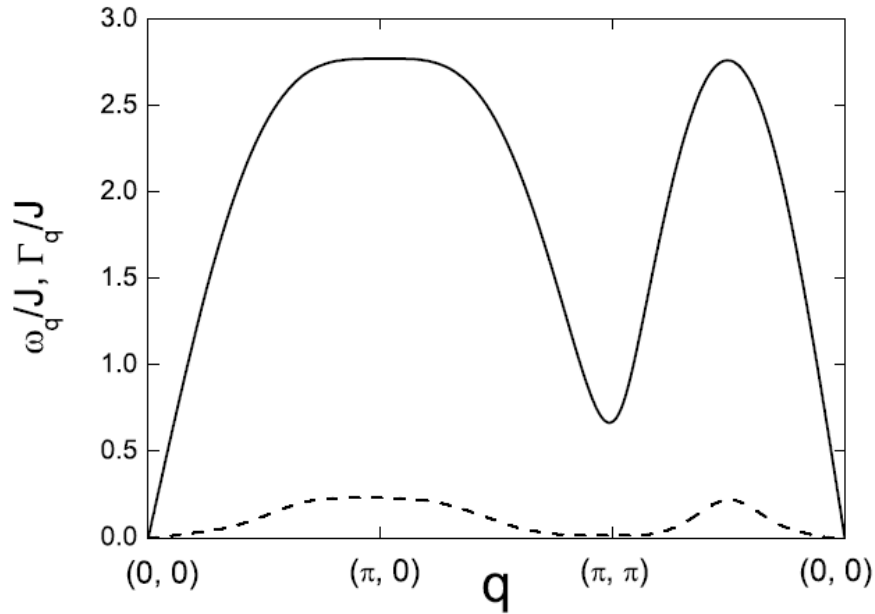
$$C_{\mathbf{R}} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{Q}} C_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} + C e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}}$$

AF correlation length:

$$\xi^2 = \frac{8J^2 \alpha_1 |C_{1,0}|}{\omega_{\mathbf{Q}}^2}$$

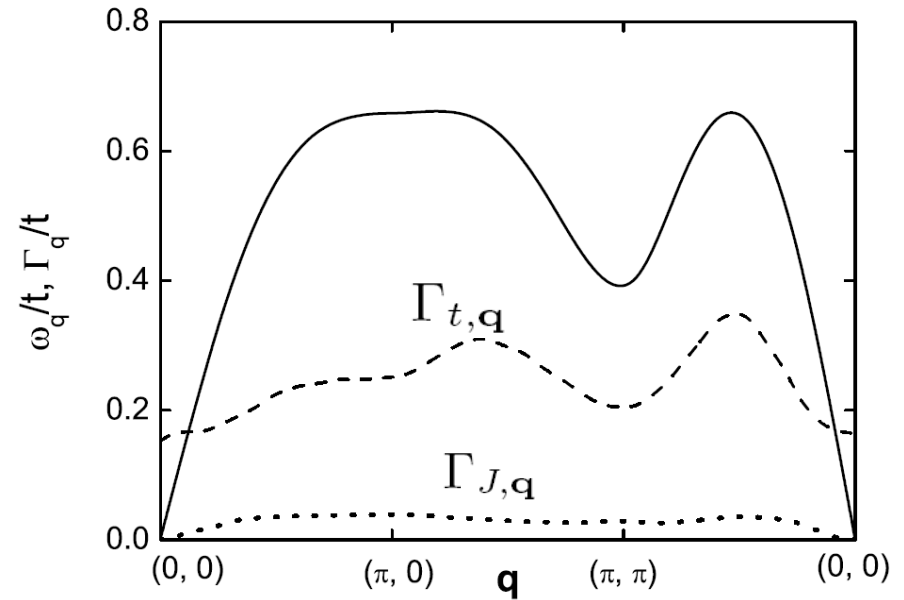


Spin-excitation spectra in the normal state



Spectrum ω_q and damping

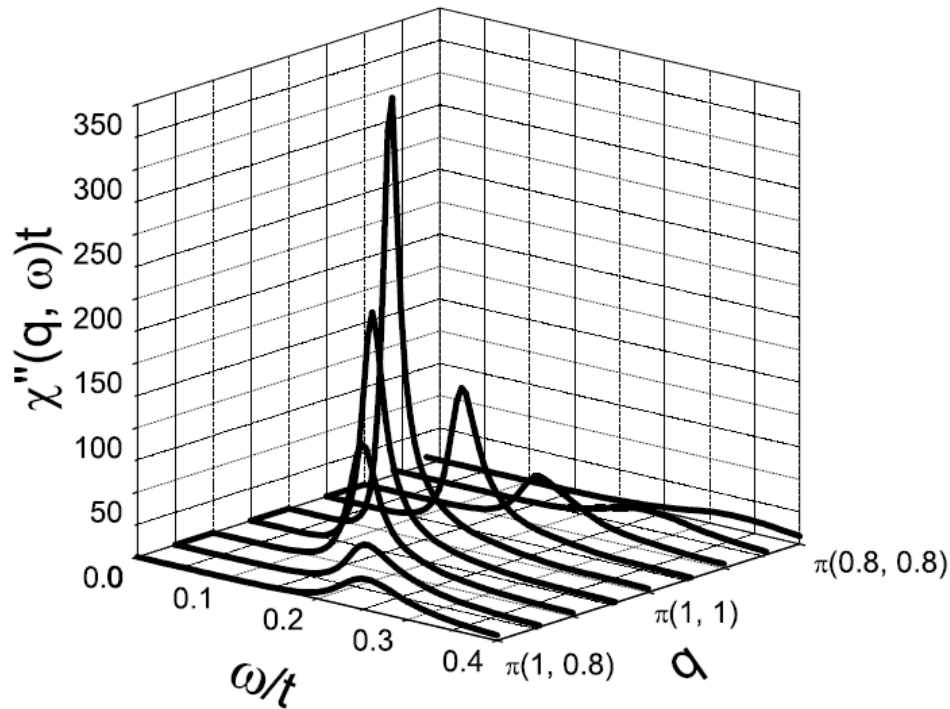
$\Gamma_q = - (1/2) \text{Im} \Sigma''(q, \omega_q)$
 in the Heisenberg model ($\delta = 0$)
 at $T = 0.35 J$



Spectrum ω_q and damping

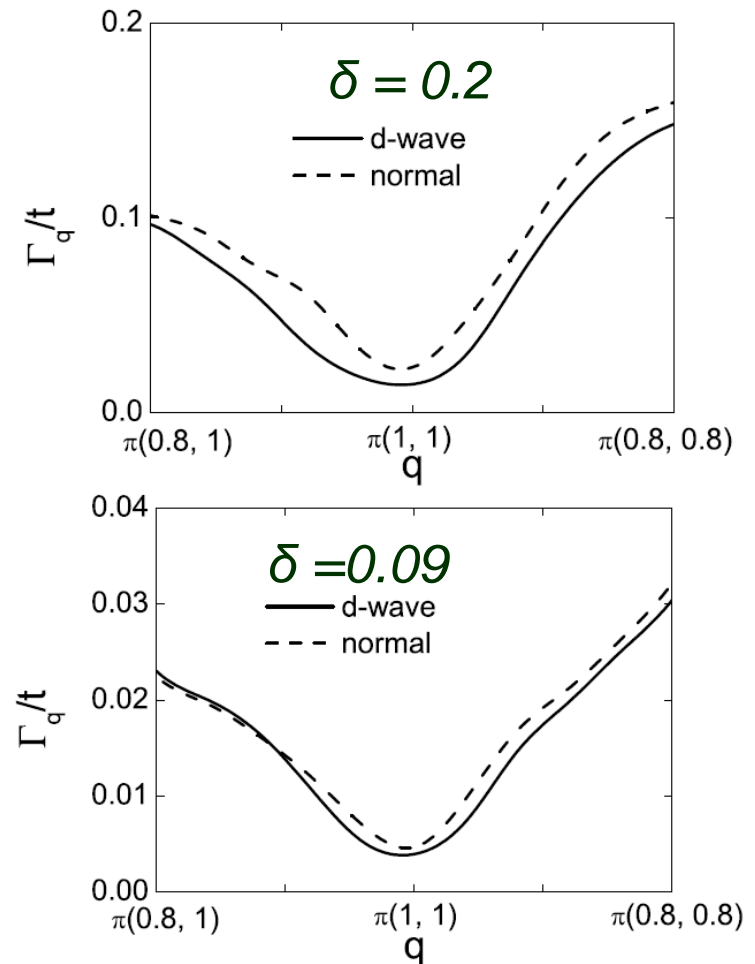
$\Gamma_{J,q}$ (dotted) and $\Gamma_{t,q}$ (dashed)
 at $T = 0.15 t$ and $\delta = 0.1$

Dispersion of the spectral functions



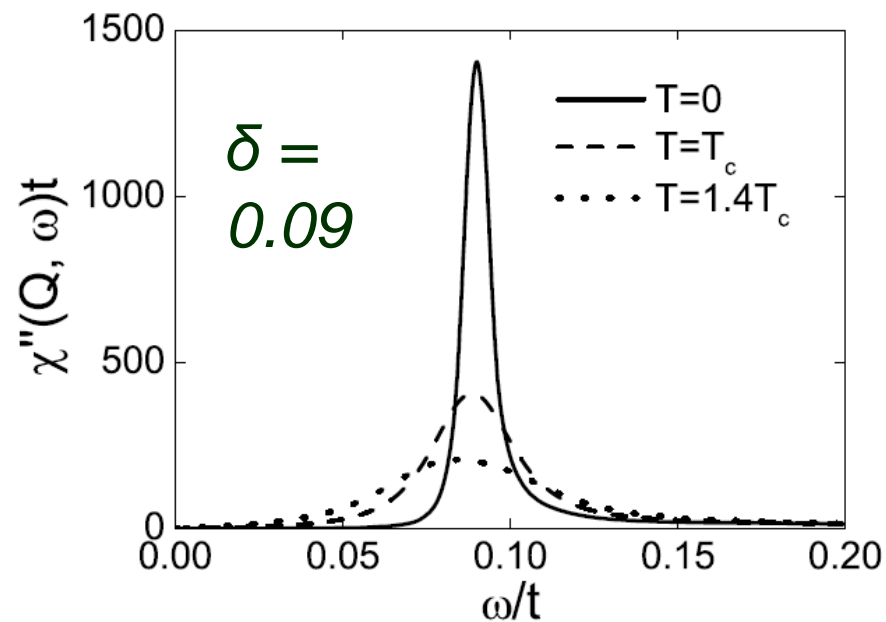
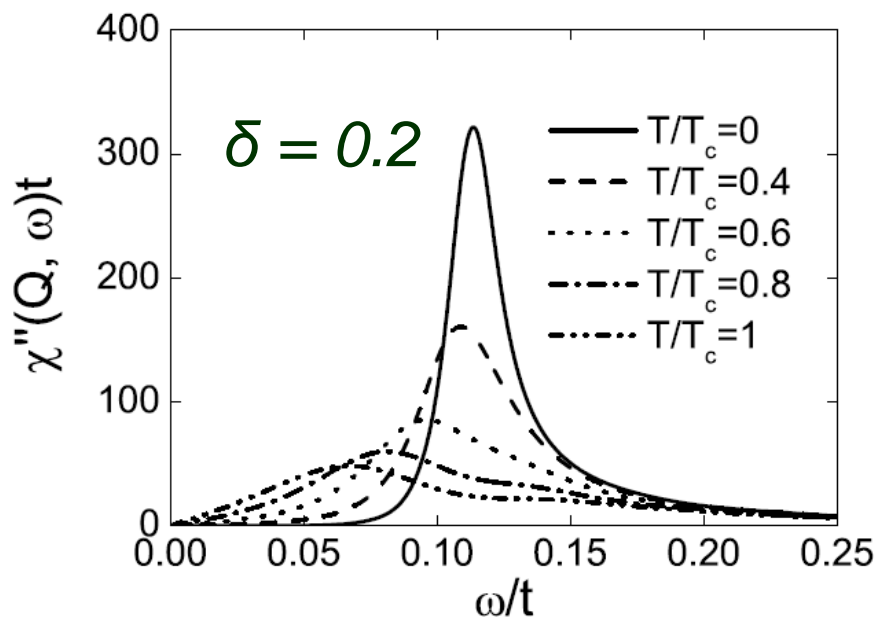
Spectral functions at $T = 0$
and $\delta = 0.2$

Spin-excitation damping
 $\Gamma(q) = - (1/2) \Sigma''(q, \omega_q)$



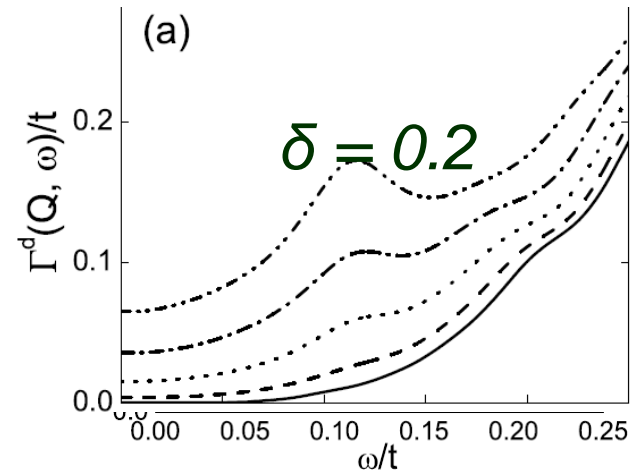
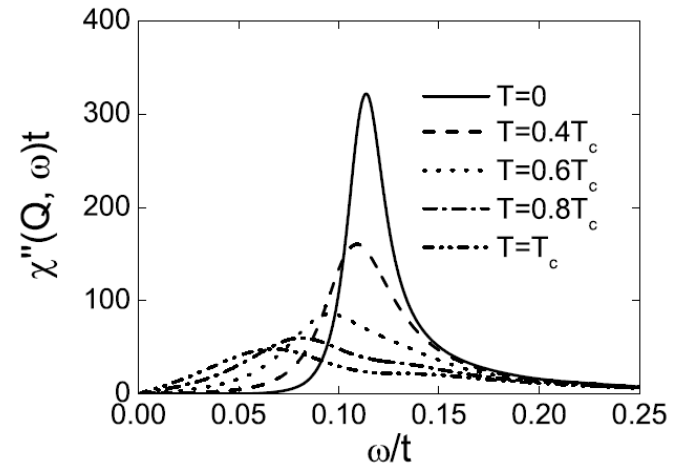
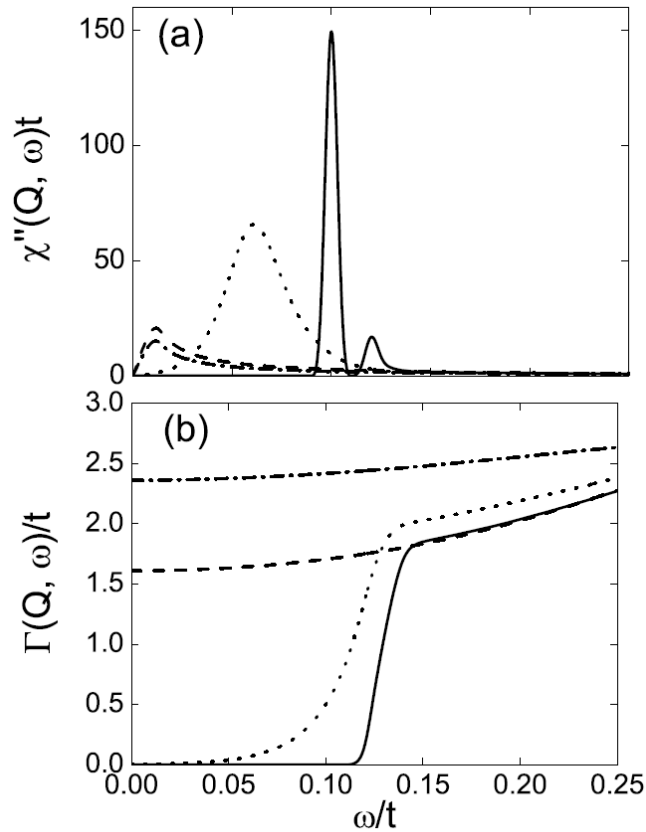
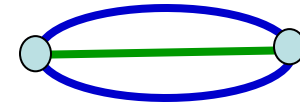
Температурная зависимость спектра возбуждений в сверхпроводящем состоянии («резонансная мода»)

$$\chi''(\mathbf{q}, \omega) = \frac{-\omega \Sigma''(\mathbf{q}, \omega) m(\mathbf{q})}{[\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2 - \omega \Sigma'(\mathbf{q}, \omega)]^2 + [\omega \Sigma''(\mathbf{q}, \omega)]^2}$$



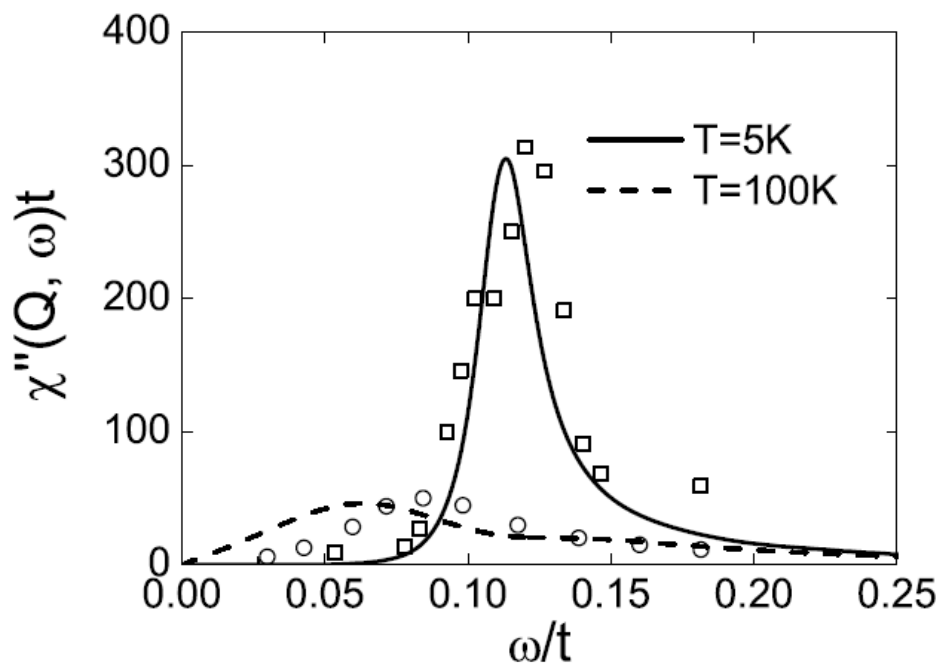
Particle-hole bubble approximation vs full self-energy results

[Sega et al. (2003)]

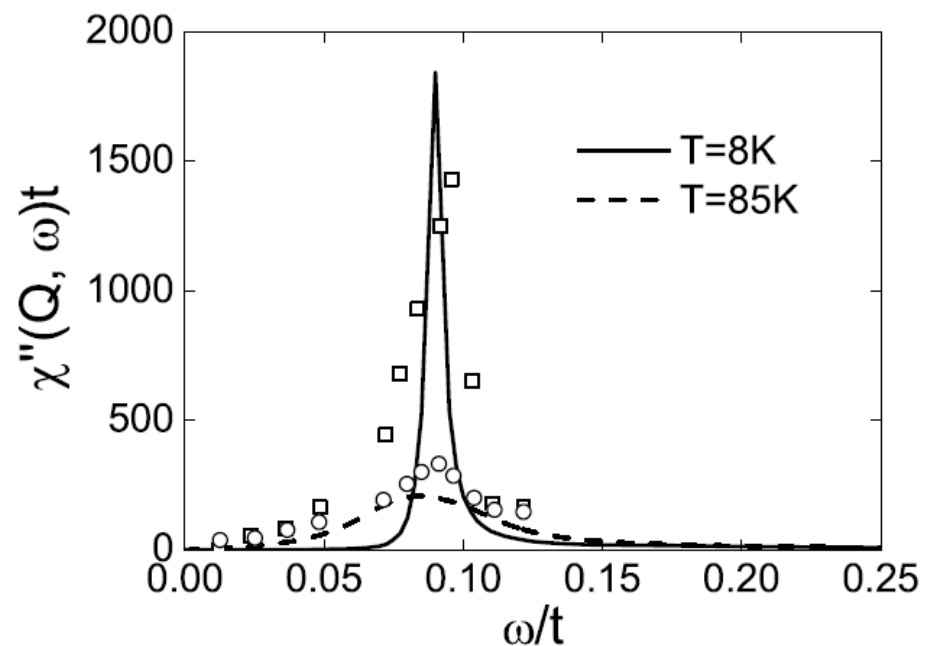


— $T = 0$
 $T = 0.4 T_c$

Резонансная мода в экспериментах по магнитному неупругому рассеянию нейтронов



$\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.92}$ ($T_c = 91\text{ K}$)
 $E_r \approx 40\text{ meV}$ at $Q = (\pi, \pi)$
Ph. Bourges (1998) (LLB, Saclay)



$\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.5}$ ($T_c = 59\text{ K}$)
 $E_r \approx 33\text{ meV}$, ($\delta = 0.09$)
C. Stock et al. (2004)
(Chalk River Lab., Canada)

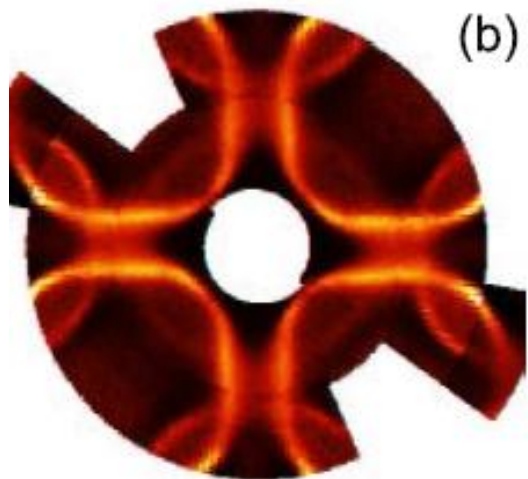
Выводы

Наблюдается кроссовер от хорошо определенных спиновых возбуждений в пределе модели Гейзенберга к сильно затухающим спиновым флуктуациям даже при малой концентрации дырок в соответствии с экспериментом.

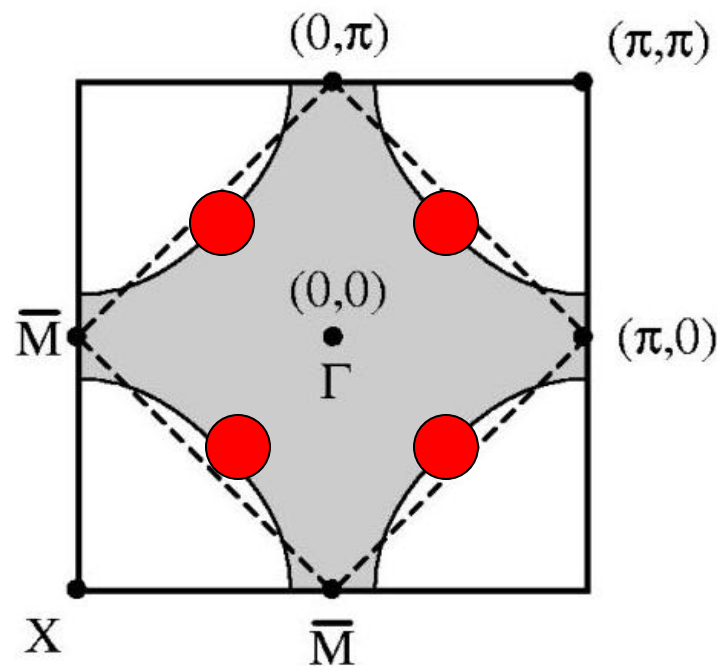
«Резонансная мода» при низких температурах в купратах обусловлена малым затуханием возбуждений вблизи АФМ вектора при учете распада этого возбуждения на пару частица-дырка с **сопутствующим возбуждением спиновой флуктуации**. При этом сверхпроводящая щель не играет существенной роли, в отличие от приближения случайных фаз, учитывающего только петлевые диаграммы. Это позволяет объяснить **слабую температурную зависимость** резонансной моды, наблюдаемой в эксперименте.

▶ Электронная структура
купратов: эксперимент

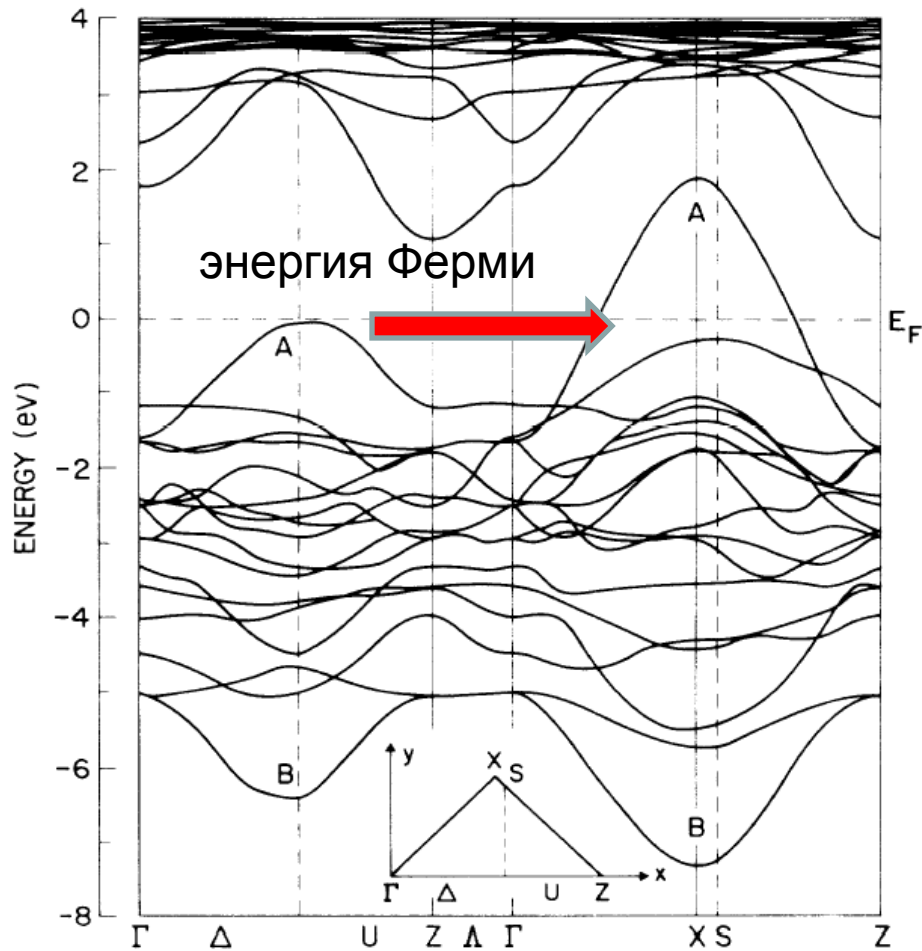
2D зона Бриллюэна и поверхность Ферми в купратах



Поверхность Ферми в $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{7+\delta}$ (Bi-2212)
(b) overdoped ($T_c = 69$ K)
(Kordyuk et al. 2002).



Нули СП щели d -симметрии
на поверхности Ферми



Зонная теория
предсказывает
наполовину
заполненную
широкую зону
состояний

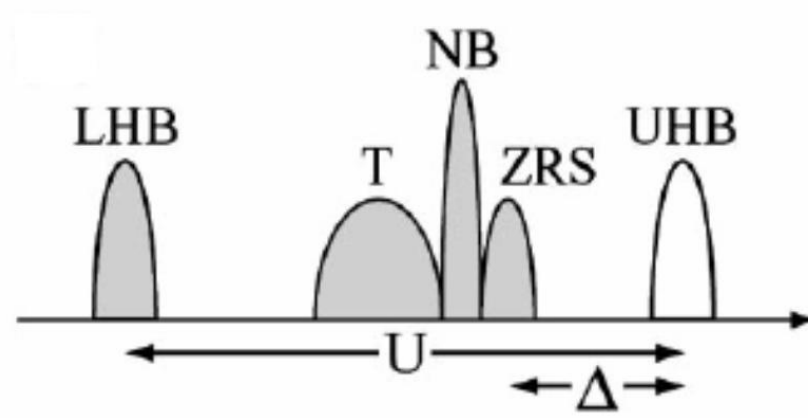
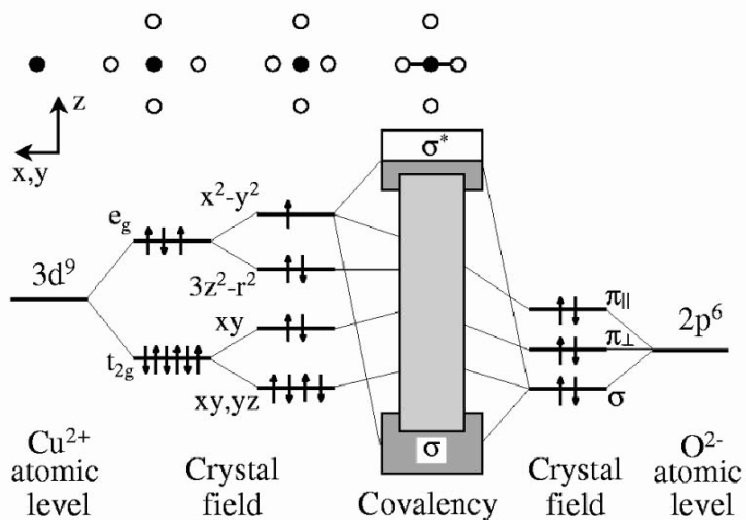
$$3d(x^2 - y^2) - 2p(x, y)$$

- хороший металл

FIG. 1. LAPW energy bands for La_2CuO_4 along symmetry lines in the bct Brillouin zone (see inset and discussion in text).

Mattheis (1987)

Электронная структура купратов $\text{Cu}^{2+} (3d^9) - \text{O}^{2-} (2p^6)$



При половинном заполнении зонная теория предсказывает широкую $pd\sigma$ зону проводимости $3d(x^2 - y^2) - 2p(x, y)$

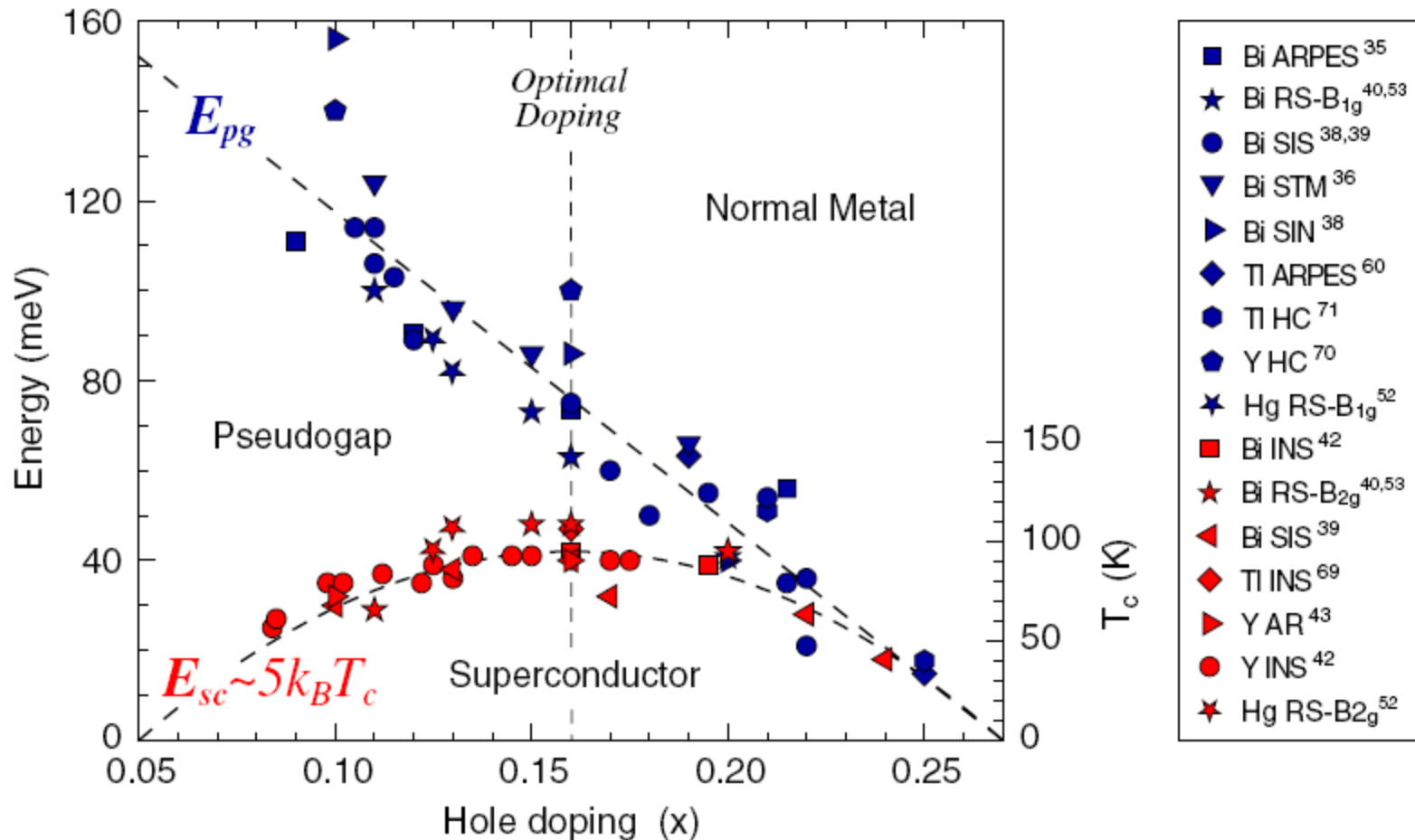
Сильные электронные корреляции приводят к расщеплению $3d$ зоны и изолятору со щелью при переносе заряда из $2p(x, y)$ зоны в $3d(x^2 - y^2)$ - зону

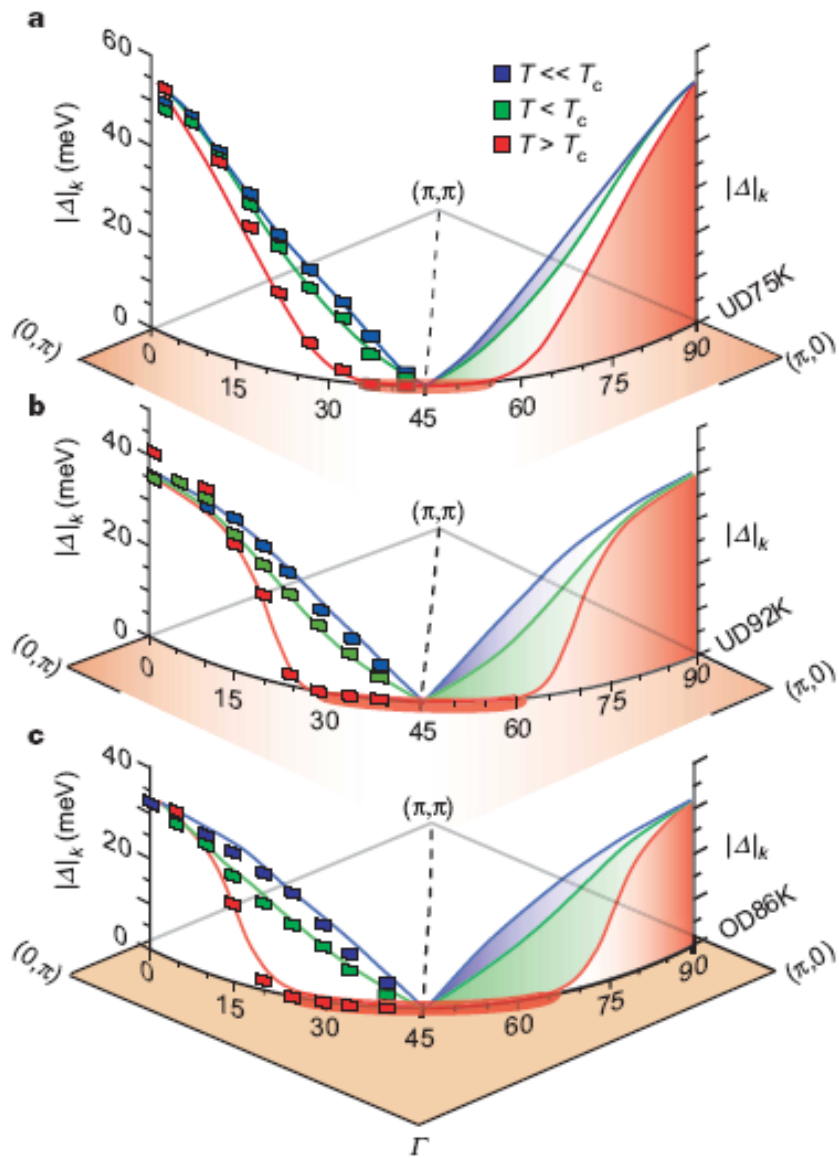
Псевдощель

Two gaps make a high-temperature superconductor?

S. Hufner, et al. Rep. Prog. Phys. 71 062501 (2008)

$$E_{pg} = E_{pg}^{\max} (0.27 - x)/0.22 \text{ and } E_{sc} = E_{sc}^{\max} [1 - 82.6(0.16 - x)^2]$$

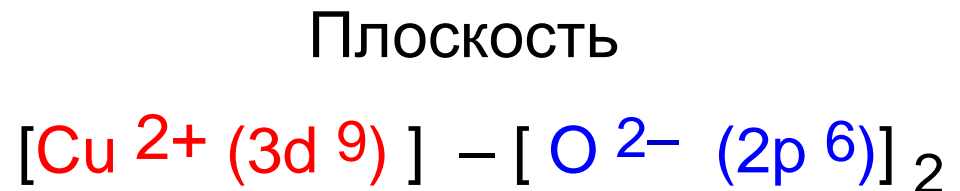
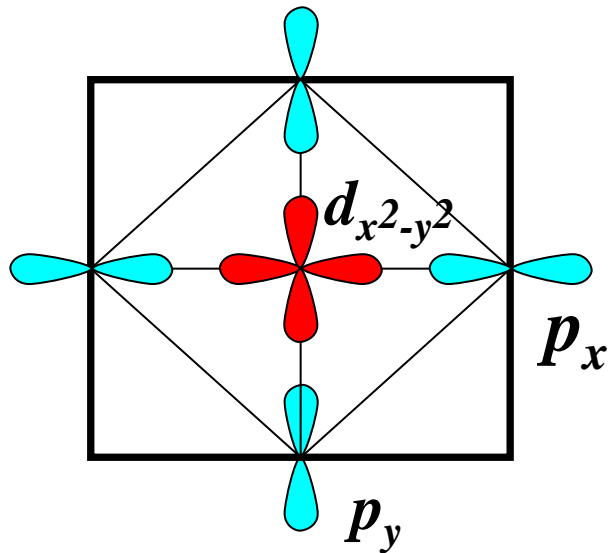




Две щели :
 СП щель при $T < T_c$ и
 псевдощель при $T < T^*$

Abrupt onset of a second
 energy gap at the
 superconducting transition
 of underdoped Bi-2212
W. S. Lee, et al., (2007)

- ▶ Электронная структура купратов:
Сильно коррелированные
электронные системы

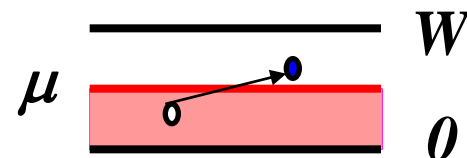


$$t_{pd} = 1.3 \text{ eV}$$

- Обычные металлы – слабо коррелированные электронные системы

В обычных металлах: $t_{i,j} \gg V_{i,j}$

$$H = \sum_{i,j,\sigma} t_{i,j} a_{i,\sigma}^+ a_{j,\sigma} + \sum_{i,j} V_{i,j} n_i n_j$$



где $a_{i,\sigma}^+$ и $a_{j,\sigma}$ – операторы рождения и уничтожения электронов, $n_i = \sum_{\sigma} a_{i,\sigma}^+ a_{i,\sigma}$. Кинетическая энергия электронов определяется параметром $t_{i,j}$, а их взаимодействие – $V_{i,j}$.

В импульсном представлении

$$H = \sum_{k,\sigma} t(k) a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} + \sum_{kk'} V(k-k') n_k n_{k'}$$

где $t(k)$ – зонная энергию электронов, а взаимодействие $V(k-k')$ дает лишь перенормировку.

- Сильно-коррелированные электронные системы

Модель металла с сильными корреляциями была предложена Шубиным и Вонсовским (1934):

On the Electron Theory of Metals.

By S. SCHUBIN and S. WONSOWSKY.

Sverdlovsk Physical Technical Institute.

(Communicated by R. H. Fowler, F.R.S.—Received December 29, 1933.)

Proceedings of the Royal Society of London. Series A, 145, 159 (1934).

Теорию в общем виде построил Н.Н. Боголюбов (1949):

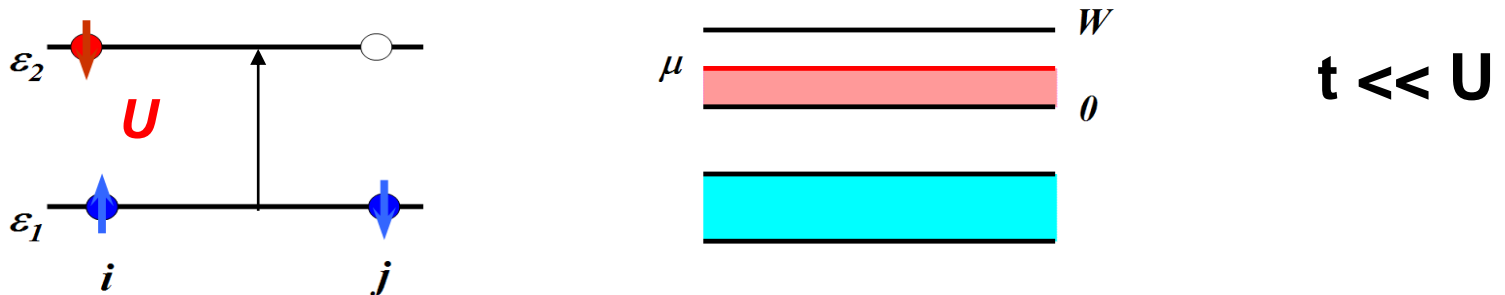
«Полярная модель металла» в книге:

Лекції з квантової статистики. Питання статистичної механіки квантових систем

Київ: Рад.школа.- 1949.- 227 с.

Простейшая модель с сильной корреляцией на одном узле была рассмотрена Хаббардом (Hubbard - 1965):

$$H = -t \sum_{i \neq j \sigma} a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} + (U/2) \sum_i n_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}}, \quad (\bar{\sigma} = -\sigma)$$



Изолятор при $n = 1$ и энергии кулоновского отталкивания больше ширины зоны: $U > W$

Методы в теории сильно коррелированных электронных систем

Теория возмущений ($U < W$)

- Phenomenological approaches (spin-fermion models) (*Pines, Norman, Chubukov, Eschrig*)
- FLEX (*Bickers et al., Manske et al.*)
- Renormalization-group (RG) approach (*Dzialoshinskii 1987, (Shankar, Metzner, Honerkamp, Salmhofer, Furukawa, Katznelson)*)

Теория сильных корреляций ($U > W$)

- DMFT – q-independent self-energy, $d \gg 1$, (*Georges, Kotliar ...*)
- DMFT +LDA (*Anisimov*) , DMFT + $\Sigma(p)$ (*Sadovskii , Nekrasov*)
- Quantum MC, Lanczos ED (*Scalapino, Dagotto, Maekawa*)

- Quantum cluster theories – (*Maier*)
- DCA – dynamical cluster approximation (*Hettler, Jarrel et al.*)
- CDMFT – Cellular DMFT (*Kotliar et al.*)
- VCA – variational cluster approximation (*Potthoff et al.*)
- Two-Particle Self-Consistent approach (TPSC) (*Tremblay et al.*)
- Diagram technique for HOs (involved) (*Zaitsev, Izyumov et al.*)
- Equation of motion method for HOs
(Mori-type projection technique)
(*Plakida, Mancini, Prelovsek, M. Eremin, Sherman,*)

A. Georges, G.~Kotliar, W.~Krauth,
and M.~Rozenberg, Rev. Mod. Phys. 68, 13 (1996).
Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion
systems and the limit of infinite dimensions.

G.~Kotliar, S. Y.~ Savrasov, K.~Haule, V.S.~Oudovenko,
O.~Parcollet, and C.A.~Marianetti, Rev. Mod. Phys.78,
865 (2006). cond-mat/0511085.

Electronic structure calculations with dynamical mean-field
theory

K. Haule and G. Kotliar, Phys. Rev. B
76, 104509 (2007).

Strongly correlated superconductivity:

A plaquette dynamical mean-field theory study

Y. Vilks and A.-M. Tremblay, J. Phys. Chem. Solids (UK) **56**, 1769 (1995); Y. Vilks and A.-M. Tremblay, J. Phys I (France) **7**, 1309 (1997);
Y. Vilks, L. Chen, and A.-M. Tremblay, Phys. Rev. B **49**, 13267 (1994).
Theory of spin and charge fluctuations in the Hubbard model
A.-M.S. Tremblay, B. Kyung and D. Sénéchal,
Fiz. Nizk. Temp. (Low Temp. Phys., Ukraine) 32, 561 (2006);
Pseudogap and high-temperature superconductivity from weak to strong coupling. Towards quantitative theory

Рассмотрим уравнение движения для оператора уничтожения электрона в модели Хаббарда

$$i(da_{i\sigma}/dt) = [a_{i\sigma}, H] = -t \sum_j a_{j\sigma} + U a_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}}.$$

Появляется новый оператор – уничтожение двойки и рождение электрона со спином $-\sigma$:

$$a_{i,\sigma} n_{i,-\sigma} = a_{i,\sigma} a_{i,-\sigma}^+ a_{i,-\sigma} = a_{i,-\sigma}^+ a_{i,-\sigma} a_{i,\sigma} \equiv X_i^{-\sigma 2}$$

Необходимо ввести новый набор операторов, действующих в однократно- и двукратно заполненных подзонах модели Хаббарда:

$$a_{i\sigma} = a_{i\sigma} (1 - n_{i,-\sigma}) + a_{i\sigma} (n_{i,-\sigma}) = X_i^{0\sigma} + X_i^{-\sigma 2},$$

При этом удобно ввести ператоры Хаббарда в атомном базисе состояний: $X_i^{\alpha\beta} = |i\alpha\rangle \langle i\beta|$

Операторы $X_i^{\alpha\beta} = |\alpha\rangle\langle\beta|$ описывают переходы из состояния $|\beta\rangle$ в состояние $|\alpha\rangle$ на узле i между 4 состояниями:

$$|\alpha\rangle = |0\rangle, |\sigma\rangle = |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle, \text{ and } |2\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle$$

Коммутационные соотношения имеют вид

$$[X_i^{\alpha\beta}, X_j^{\gamma\delta}]_{\pm} = \delta_{ij} (\delta_{\beta\gamma} X_i^{\alpha\delta} \pm \delta_{\delta\alpha} X_i^{\gamma\beta})$$

например: $[X_i^{0\sigma}, X_j^{\sigma'0}]_+ = \delta_{ij} (\delta_{\sigma'\sigma} X_i^{00} + X_i^{\sigma'\sigma})$

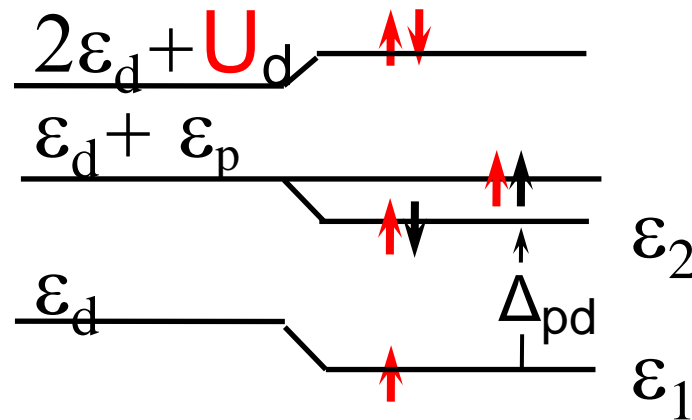
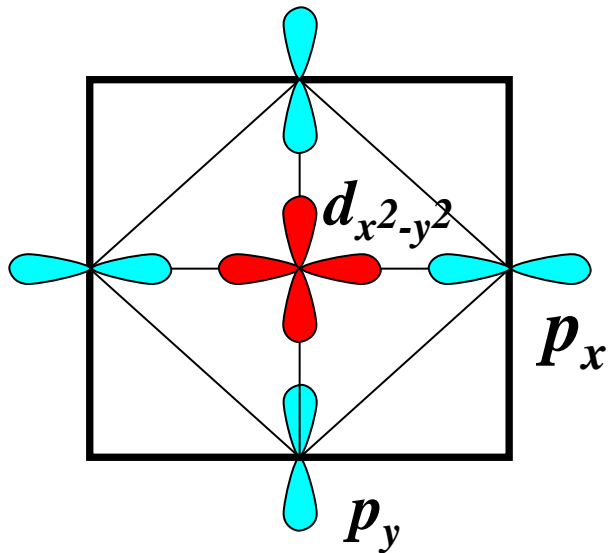
Операторы могут быть представлены матрицами 4x4 :

$$X_i^{22} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad X_i^{\uparrow\uparrow} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad X_i^{\downarrow\downarrow} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad X_i^{00} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Условие полноты $X_i^{22} + X_i^{\uparrow\uparrow} + X_i^{\downarrow\downarrow} + X_i^{00} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \equiv \hat{\mathbf{I}}$

Оператор числа частиц $N_i = \sum_{\sigma} X_i^{\sigma\sigma} + 2 X_i^{22}$

p - d модель Хаббарда для плоскости $\text{Cu}^{2+} - [\text{O}^{2-}]_2$



Кулоновское отталкивание двух d -дырок $U_d \approx 8$ eV больше разности энергий для состояний $\text{Cu } 3d^9$ (ϵ_d) и $\text{O } 2p^6$ (ϵ_p): $\Delta_{pd} = \epsilon_p - \epsilon_d \approx 3$ eV. В отсутствии легирования возникает изолятор со щелью Δ_{pd} , который описывается моделью Хаббарда с $U_{\text{eff}} = \Delta_{pd}$ для однодырочных d -состояний $\epsilon_1 = \epsilon_d - \mu$ и двухдырочных синглетных (p - d) состояний $\epsilon_2 = 2\epsilon_1 + \Delta_{pd}$,

Для сравнения различных механизмов сверхпроводимости рассматриваем модель Хаббарда

$$H = \varepsilon_1 \sum_{i,\sigma} X_i^{\sigma\sigma} + \varepsilon_2 \sum_i X_i^{22} + \sum_{i \neq j, \sigma} \{ t_{ij}^{11} X_i^{\sigma 0} X_j^{0\sigma} + t_{ij}^{22} X_i^{2\sigma} X_j^{\sigma 2} + \sigma t_{ij}^{12} (X_i^{2\bar{\sigma}} X_j^{0\sigma} + \text{H.c.}) \} + H_{c,ep}, \quad (\bar{\sigma} = -\sigma)$$

с учетом межузельного кулоновского отталкивания $V(ij)$ и электрон-фононного взаимодействия $g(i,j)$

$$H_{c,ep} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(ij) N_i N_j + \sum_{i,j} g(i,j) N_i u_j.$$

Оператор числа частиц:
$$N_i = \sum_{\sigma} X_i^{\sigma\sigma} + 2 X_i^{22}$$

Одноузельные энергии:
$$\varepsilon_1 = -\mu, \quad \varepsilon_2 = U - 2\mu$$

В уравнениях движения для X-операторов,
 например, $X_i^{\sigma 2} = a_{i,\sigma}^+ n_{i,-\sigma} = a_{i,\sigma}^+ a_{i,\sigma} a_{i,-\sigma}$

$$i \frac{d}{dt} X_i^{\sigma 2} = [X_i^{\sigma 2}, H] = (\varepsilon_1 + U) X_i^{\sigma 2} + \sum_{m, \sigma'} \left(t_{im}^{22} B_{i\sigma\sigma'}^{22} X_m^{\sigma' 2} - \sigma t_{im}^{21} B_{i\sigma\sigma'}^{21} X_m^{0\bar{\sigma}'} \right) - \sum_m X_i^{02} \left(t_{im}^{11} X_m^{\sigma 0} + \sigma t_{im}^{21} X_m^{2\bar{\sigma}} \right) + \sum_m X_i^{\sigma 2} (V_{im} N_m + g_{im} u_m)$$

появляется **кинематическое взаимодействие** –
 рассеяние на спиновых и зарядовых флуктуациях

F. Dyson
 (1956)

$$B_{i\sigma\sigma'}^{22} = (N_i/2 + S_i^z) \delta_{\sigma'\sigma} + S_i^\sigma \delta_{\sigma'\bar{\sigma}},$$

$$B_{i\sigma\sigma'}^{21} = (N_i/2 + S_i^z) \delta_{\sigma'\sigma} - S_i^\sigma \delta_{\sigma'\bar{\sigma}},$$

$$N_i = \sum_\sigma X_i^{\sigma\sigma} + 2X_i^{22}, \quad S_i^\sigma = X_i^{\sigma\bar{\sigma}}$$

- Уравнение Дайсона для функции Грина

Рассмотрим матричную одноэлектронную функцию Грина

$$G_{ij\sigma}(t - t') = -i\theta(t - t') \langle \{ \hat{X}_{i\sigma}(t), \hat{X}_{j\sigma}^\dagger(t') \} \rangle \equiv \langle \langle \hat{X}_{i\sigma}(t) | \hat{X}_{j\sigma}^\dagger(t') \rangle \rangle$$

от операторов Хаббарда для двух зон в представлении Намбу

$$\hat{X}_{i\sigma}, \quad \hat{X}_{i\sigma}^\dagger = (X_i^{2\sigma} \quad X_i^{\bar{\sigma}0} \quad X_i^{\bar{\sigma}2} \quad X_i^{0\sigma})$$

Уравнения движения для X-операторов запишем в виде

$$[\hat{X}_{i\sigma}, H] = \sum_l E_{il\sigma} \hat{X}_{l\sigma} + \hat{Z}_{i\sigma}^{(ir)}, \quad \langle \{ \hat{Z}_{i\sigma}^{(ir)}, \hat{X}_{j\sigma}^\dagger \} \rangle = 0$$

где линейный член определяет энергию возбуждений и сверхпроводящую щель в среднем поле

Спектр в приближении среднего поля

$$E_{ij\sigma} = \langle \{ [\hat{X}_{i\sigma}, H], \hat{X}_{j\sigma}^\dagger \} \rangle Q^{-1} = \sum_{\mathbf{k}} \exp[i\mathbf{k}(\mathbf{i} - \mathbf{j})] E_\sigma(\mathbf{k}),$$

$$\hat{Q} = \langle \{ \hat{X}_{i\sigma}, \hat{X}_{i\sigma}^\dagger \} \rangle = \begin{pmatrix} Q_2 & 0 \\ 0 & Q_1 \end{pmatrix} \quad \begin{array}{l} Q_2 = n/2 \\ Q_1 = 1 - n/2 \end{array}$$

$$E_\sigma(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \hat{\varepsilon}(\mathbf{k}) & \hat{\Delta}_\sigma(\mathbf{k}) \\ \hat{\Delta}_\sigma^*(\mathbf{k}) & -\hat{\varepsilon}_{\bar{\sigma}}(\mathbf{k}) \end{pmatrix}$$

Используя уравнение для функции Грина

$$i d/dt' \langle\langle \hat{Z}_{i\sigma}^{(ir)}(t) | \hat{X}_{j\sigma}^\dagger(t') \rangle\rangle$$

получаем уравнение Дайсона

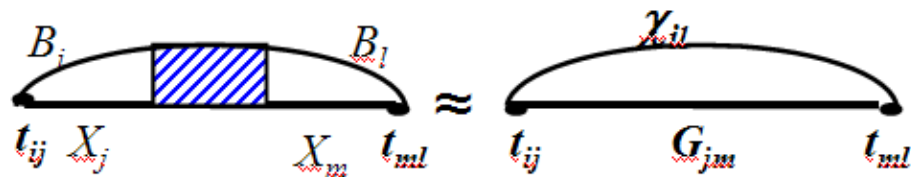
$$G_\sigma(\mathbf{k}, \omega) = [\omega \tilde{\tau}_0 - E_\sigma(\mathbf{k}) - Q \Sigma_\sigma(\mathbf{k}, \omega)]^{-1} Q$$

где массовый оператор – многочастичная ФГ

$$Q \Sigma_\sigma(\mathbf{k}, \omega) = \langle\langle \hat{Z}_{\mathbf{k}\sigma}^{(ir)} | \hat{Z}_{\mathbf{k}\sigma}^{(ir)\dagger} \rangle\rangle_\omega^{(pp)} Q^{-1}.$$

вычисляется в приближении взаимодействующих мод в предположении независимого распространения фермионных и бозонных возбуждений на разных узлах:

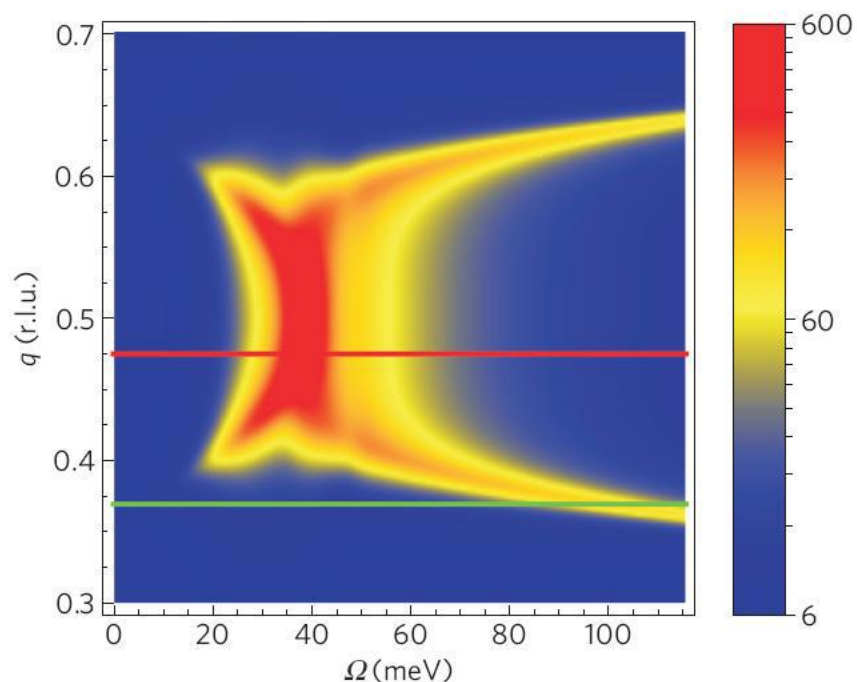
$$\langle B_{1'}(t) X_1(t) | B_{2'} X_2 \rangle \simeq \langle X_1(t) X_2 \rangle \langle B_{1'}(t) B_{2'} \rangle_{(1' \neq 1)}$$



В приближении взаимодействующих мод пренебрегается перенормировкой вершины.

Для электрон-фононной системы поправки малы по параметру (ω_{ph} / μ) .

Для спин-флуктуационного взаимодействия существует аналогичный параметр (ω_{sf} / μ) ,



где $\omega_{sf} = \omega [\mathbf{Q} = (\pi, \pi)]$
= 30 - 40 мэВ

– энергия спиновых
возбуждений вблизи
максимума спектральной
функции

Спектр в приближении среднего поля в нормальной фазе

$$\tilde{\varepsilon}_{1,2}(\mathbf{k}) = (1/2)[\omega_2(\mathbf{k}) + \omega_1(\mathbf{k})] \mp (1/2)\Lambda(\mathbf{k}),$$

$$\Lambda(\mathbf{k}) = \{[\omega_2(\mathbf{k}) - \omega_1(\mathbf{k})]^2 + 4|W(\mathbf{k})|^2\}^{1/2},$$

$$\omega_1(\mathbf{k}) = 4t \alpha_1 \gamma(\mathbf{k}) + 4t' \beta_1 \gamma'(\mathbf{k}) - \mu,$$

$$\omega_2(\mathbf{k}) = \Delta + 4t \alpha_2 \gamma(\mathbf{k}) + 4t' \beta_2 \gamma'(\mathbf{k}) - \mu,$$

$$|W(\mathbf{k})| = 4t \alpha_{12} \gamma(\mathbf{k}) + 4t' \beta_{12} \gamma'(\mathbf{k})$$

где $\gamma(\mathbf{k}) = (1/2)(\cos k_x + \cos k_y)$, $\gamma'(\mathbf{k}) = \cos k_x \cos k_y$,

$$\alpha_{1(2)} = Q_{1(2)} [1 + C_1 / \bar{Q}_{1(2)}^2],$$

$$\alpha_{12} = \sqrt{Q_1 Q_2} [1 - C_1 / Q_1 Q_2],$$

$$\beta_{1(2)} = Q_{1(2)} [1 + C_2 / Q_{1(2)}^2],$$

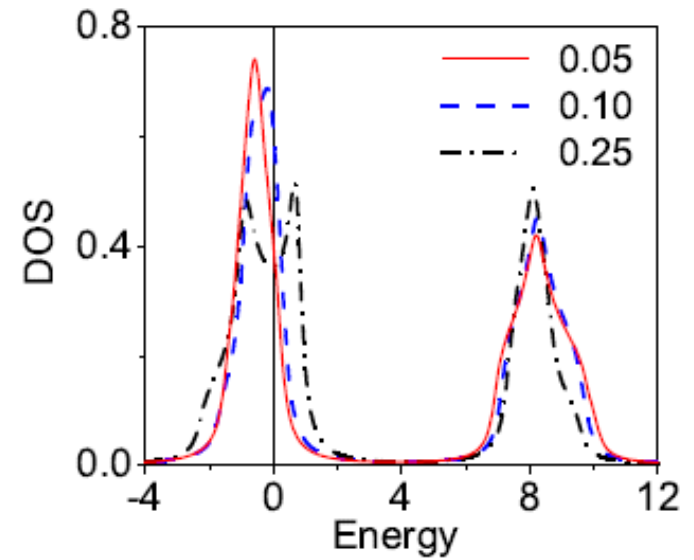
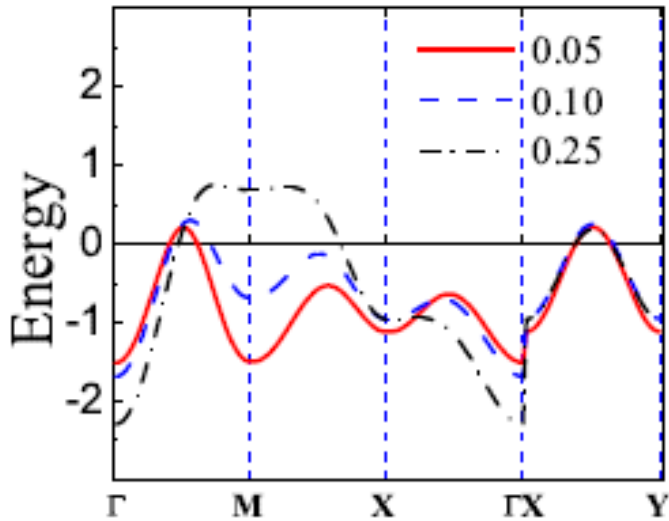
$$\beta_{12} = \sqrt{Q_1 Q_2} [1 - C_2 / Q_1 Q_2]$$

Перенормировка
спектра за счет АФМ
корреляций

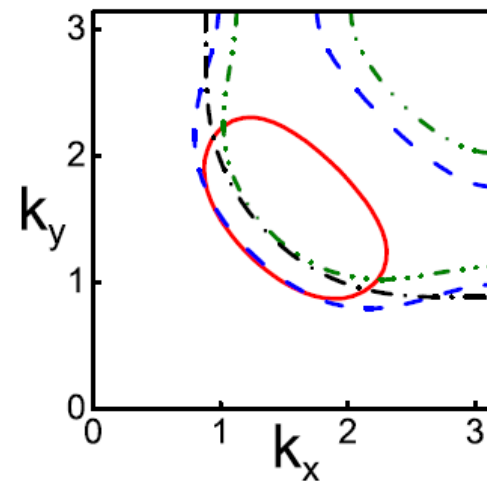
$$C_1 < 0, C_2 > 0$$

$$C_1 = \langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i \pm a_x / a_y} \rangle, \quad C_2 = \langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i \pm a_x \pm a_y} \rangle$$

Electronic spectra and density of states in MFA



Fermi surface in MFA: $\epsilon(k_F) = 0$



Псевдощель обусловленная антиферромагнитными корреляциями в модели Хаббарда

Самосогласованная система уравнений для электрон-спинового рассеяния:

Функция Грина
$$G_{1(2)}(\mathbf{q}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_{1(2)}(\mathbf{q}) - \Sigma(\mathbf{q}, i\omega_n)}$$

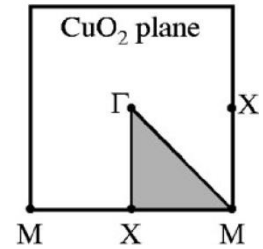
Массовый оператор:
$$\Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) = -\frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}} \sum_m [G_1(\mathbf{q}, i\omega_m) + G_2(\mathbf{q}, i\omega_m)] \times \lambda(\mathbf{q}, \mathbf{k} - \mathbf{q} | i\omega_n - i\omega_m). \quad (3)$$

Взаимодействие
$$\lambda(\mathbf{q}, \mathbf{k} - \mathbf{q} | i\omega_\nu) = -|t(\mathbf{q})|^2 \chi_s(\mathbf{k} - \mathbf{q}) F_s(i\omega_\nu)$$

Спиновая
восприимчивость

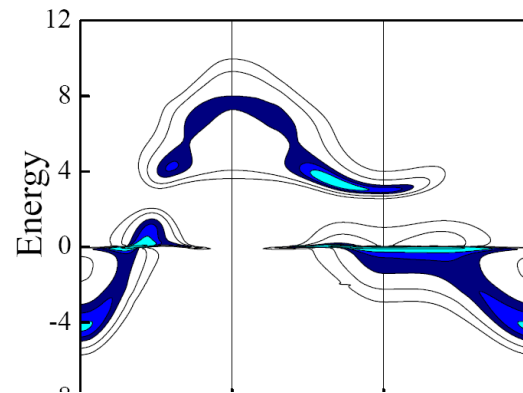
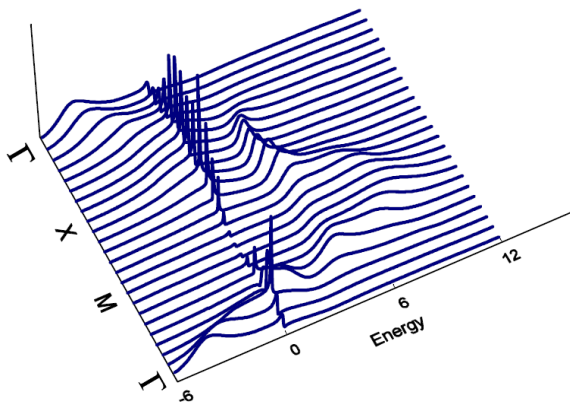
$$\chi_s(\mathbf{q}) \simeq \frac{\chi_0}{1 + \xi^2 \mathbf{p}^2} \quad \begin{array}{l} \mathbf{p} = \mathbf{q} - \mathbf{Q} \\ \mathbf{Q} = (\pi, \pi) \end{array}$$

Спектральная функция $A(k, \omega)$ и дисперсионные кривые в зоне Бриллюэна $\Gamma (0,0) \rightarrow M(\pi,\pi) \rightarrow X(\pi,0) \rightarrow \Gamma (0,0)$

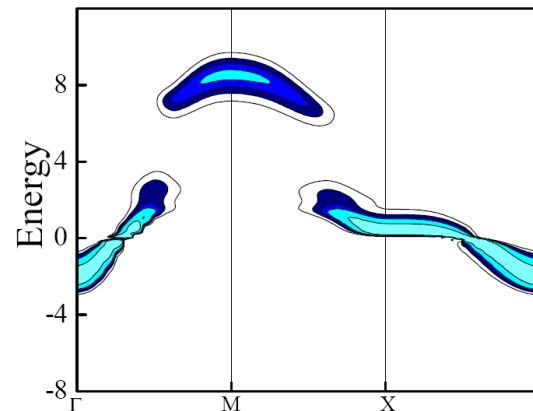
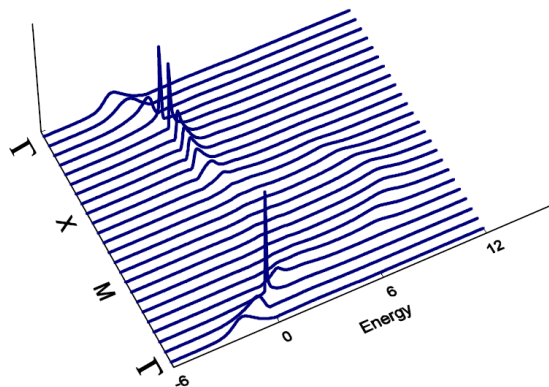


$U = 8 t, T \approx 0.03 t \approx 150 \text{ K}$

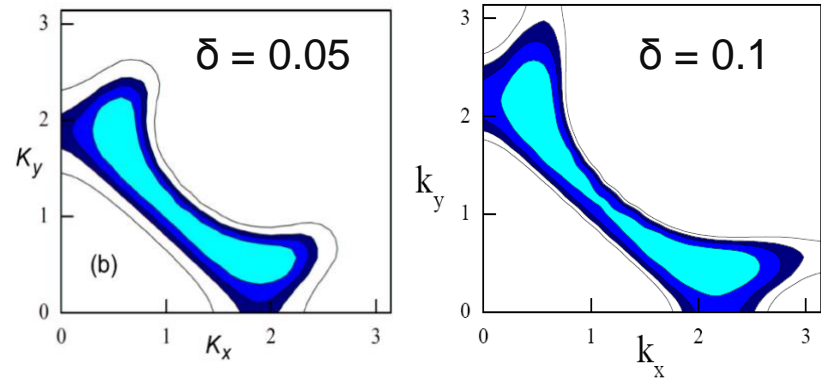
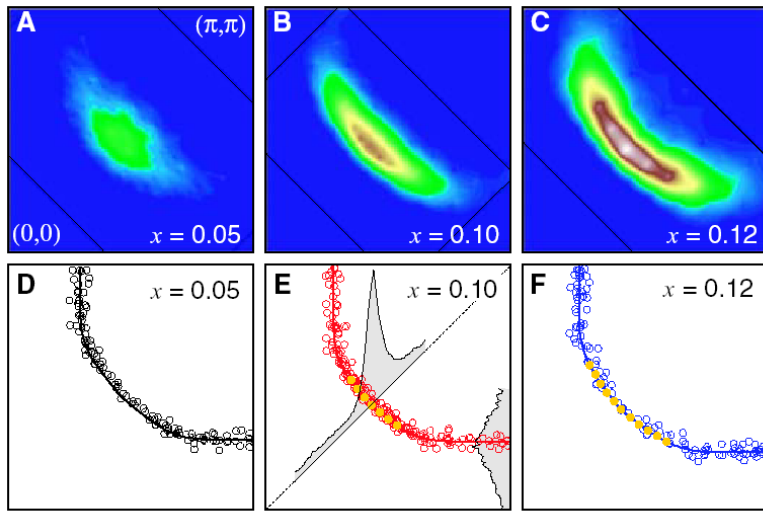
$\delta = 0.1$



$\delta = 0.3$



Fermi surface measured by the maxima of the spectral function, $A(k_F, 0) = 0$, reveals “destruction” of the FS – “arc-type” FS



Cupric oxychloride $\text{Ca}_{2-x}\text{Na}_x\text{CuO}_2\text{Cl}_2$

K. M. Shen, Science 307 901 (2005).

N.M. Plakida, V.S. Oudovenko, JETP 97, 331 (2007).

- Сверхпроводимость в кулоновских системах

Приближение ферми - жидкости

Weak Coulomb repulsion may induce superconductivity with large orbital moments L due to many-body effects:

W. Kohn and J. M. Luttinger, Phys. Rev. Lett. 15, 524 (1965).

D. V. Efremov, M. S. Mar'enko, M. A. Baranov, M. Yu. Kagan,
J. Exp. Theor. Phys. **90**, 861 (2000).

M.Yu. Kagan, D.V. Efremov, M.S. Marienko, V.V. Val'kov.
JETP Lett. **93** 725 (2011).

M. Yu. Kagan, V. V. Val'kov, V. A. Mitskan, M. M. Korovushkin,
J. Exp. Theor. Phys. **144**, 837 (2013).

PHYSICAL REVIEW B 81, 224505 (2010)

**Superconductivity in the repulsive Hubbard model:
An asymptotically exact weak-coupling solution**

S. Raghu,¹ S. A. Kivelson,¹ and D. J. Scalapino^{1,2}

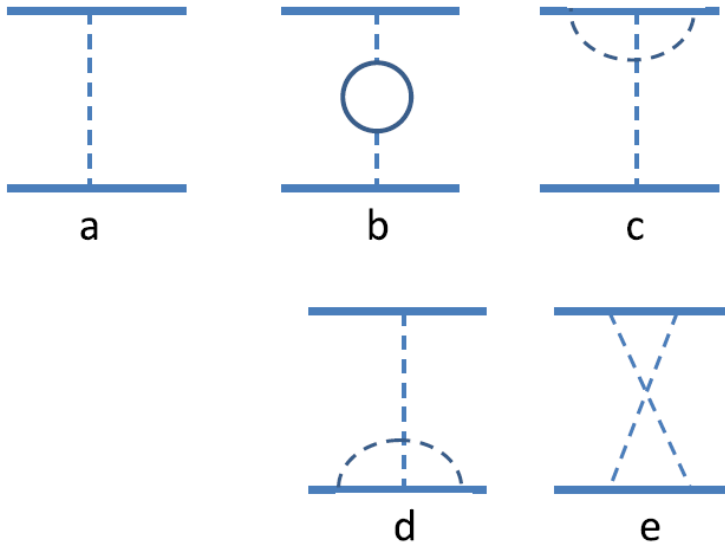
The results we have obtained are asymptotically exact in the limit $U/t \rightarrow 0$, so long as the conventional RG treatment of the Fermi liquid is valid. In this limit, T_c tends rapidly to zero, so the present results cannot be directly associated with a mechanism of “high-temperature superconductivity.”

Unconventional High-Temperature Superconductivity from Repulsive Interactions: Theoretical Constraints

A. S. Alexandrov and V. V. Kabanov

It is shown that the Cooper pairing in p and d states *is not possible* with the realistic Coulomb repulsion between fermions at relevant temperatures in any dimensions.

$$\lambda\Delta(\mathbf{p}) = \frac{\Omega}{(2\pi\hbar)^d} \oint \frac{dS}{v_F(S)} K(\mathbf{p}, \mathbf{p}')\Delta(\mathbf{p}')$$



$$v(\mathbf{q}) = \text{constant.}$$

e.g., Hubbard U, gives no contribution for p -, d -pairing in the first order diagram (a)

$$\begin{aligned}
 K(\mathbf{p}, \mathbf{p}') &= v(\mathbf{p} - \mathbf{p}') + v(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \sum_{\mathbf{k}} [2v(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \\
 &\quad - v(\mathbf{k} + \mathbf{p}') - v(\mathbf{k} - \mathbf{p})] Q(\mathbf{p} - \mathbf{p}', \mathbf{k}) \\
 &\quad - \sum_{\mathbf{k}} v(\mathbf{p} - \mathbf{k}) v(\mathbf{k} + \mathbf{p}') Q(\mathbf{p} + \mathbf{p}', \mathbf{k})
 \end{aligned}$$

Screened Coulomb interaction (2D) $v(\mathbf{q}) = 2\pi e^2 / \Omega(q + \kappa)$

PHYSICAL REVIEW B 85, 024516 (2012)

Effects of longer-range interactions on unconventional superconductivity

S. Raghu,^{1,2} E. Berg,³ A. V. Chubukov,⁴ and S. A. Kivelson¹

We show that T_c is generally suppressed in some pairing channels as longer range interactions increase in strength, but *superconductivity is not destroyed*. Our results confirm that electron-electron interaction can lead to unconventional superconductivity under physically realistic circumstances.

▶ Сверхпроводимость в системах с сильной корреляцией электронов, $U \gg t$

Принято считать, что ВТСП в купратах обусловлена АФМ взаимодействием в t - J модели

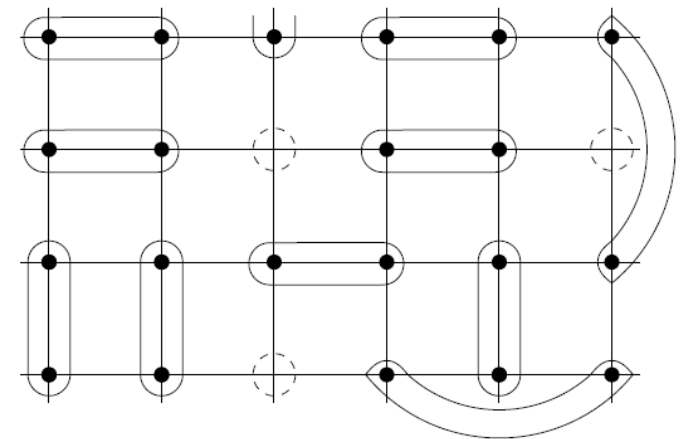
Resonating valence bond state
(RVB) - P.W. Anderson
(Science **235**, 1196 (1987))

Однако существует более сильное кинематическое взаимодействие порядка кинетической энергии электронов, $4t \gg J$, которое отсутствует в теориях среднего поля

$$H = H_t + H_J = -\sum_{i,j,\sigma} t_{i,j} \hat{c}_{i,\sigma}^+ \hat{c}_{j,\sigma} + J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$$

Resonating valence bond state:
синглет на связи $(i-j)$

Вариационный подход
(Zhang, Rice, Anderson)



$$r \text{ --- } r' = \frac{|\uparrow_r \downarrow_{r'}\rangle - |\downarrow_r \uparrow_{r'}\rangle}{\sqrt{2}}$$

$$H_{\text{eff}} = g_t T + g_J J \sum \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j.$$

$$g_t = 2\delta/(1 + \delta), \quad g_J = 4/(1 + \delta)^2$$

Slave- boson representation

$$\tilde{a}_{i\sigma}^+ = f_{i\sigma}^+ b_i.$$

Для исключения нефизических состояний необходимо учитывать локальное ограничение (local constraint)

$$q_i = b_i^+ b_i + \sum_{\sigma} f_{i\sigma}^+ f_{i\sigma} = 1.$$

которое обычно учитывается в приближении среднего поля

$$q = \langle q_i \rangle = 1$$

и оператор $\tilde{a}_{i\sigma}^+$ заменится ферми-оператором $\tilde{a}_{i\sigma}^+ = f_{i\sigma}^+ \langle b_i \rangle$

и кинетический вклад $\mathcal{H}_t = -t \delta \sum_{\sigma} f_{i\sigma}^{\dagger} f_{j\sigma}$
 $\langle ij \rangle$

- ▶ Кинематический спин-флуктуационный механизм ВТСП в системах с сильной корреляцией электронов, $U \gg t$

Уравнение для сверхпроводящей щели

$$\varphi_{\sigma}(\mathbf{k}, \omega) = \sum_{\mathbf{q}} \left\{ [J_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}] \langle X_{\mathbf{q}}^{\sigma 2} X_{-\mathbf{q}}^{\bar{\sigma} 2} \rangle + \int_{-\infty}^{+\infty} dz K^{(-)}(\omega, z | \mathbf{q}, \mathbf{k} - \mathbf{q}) \right\} [-(1/\pi) \text{Im} F_{\sigma}(\mathbf{q}, z)]$$

$$F_{\sigma}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\varphi_{\sigma}(\mathbf{q}, \omega)}{[\omega Z(\mathbf{q}, \omega)]^2 - [\varepsilon(\mathbf{q}) + X(\mathbf{q}, \omega)]^2 - |\varphi_{\sigma}(\mathbf{q}, \omega)|^2}$$

Первый член - приближение среднего поля, интегральный член – вклады неупругих процессов

$$K^{(-)}(\omega, z | \mathbf{q}, \mathbf{k} - \mathbf{q}) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\Omega \frac{\tanh \frac{z}{2T} + \coth \frac{\Omega}{2T}}{\omega - z - \Omega} \left\{ |t(\mathbf{q})|^2 \text{Im} \chi_{\text{sf}}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \Omega) - |g_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}|^2 \text{Im} \chi_{\text{ph}}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \Omega) \right\}$$

- Приближение среднего поля

$$\varphi_\sigma(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{q}} [J_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}] \langle X_{\mathbf{q}}^{\sigma 2} X_{-\mathbf{q}}^{\bar{\sigma} 2} \rangle,$$

В модели взаимодействия ближайших соседей
АФ обменное $J_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}$ и кулоновские $V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}$ взаимодействия

$$J_{\mathbf{q}} = 2J (\cos q_x + \cos q_y), \quad V_{\mathbf{q}} = 2V_1 (\cos q_x + \cos q_y)$$

Согласно численным оценкам для купратов

$$J = (0.13 - 0.15) \text{ eV} \quad \text{и} \quad V_1 = (0.1 - 0.2) \text{ eV} \quad (\text{Feiner 1996})$$

Если $J \leq V_1$ сверхпроводящее спаривание отсутствует,
в том числе нет решения в виде резонирующих валентных
связей (resonating valence bond state (RVB) - P.W. Anderson)
в рамках редуцированной модели Хаббарда, $t - J$ модели:

$$H_{tJ} = - \sum_{i \neq j, \sigma} t_{ij} \tilde{a}_{i\sigma}^+ \tilde{a}_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} (S_i S_j - \frac{1}{4} n_i n_j)$$

L.F. Feiner, J.H. Jefferson, and R.~Raimondi,
Phys. Rev. B 53, 8751 (1996).

Effective single-band models for high-Tc cuprates. I.
Coulomb interactions spin fluctuation

- Приближение БКШ

Рассматриваем решение вблизи энергии Ферми: $(\omega, z) \sim 0$
и пренебрегаем перенормировкой спектра: $\Sigma = 0$

$$K^{(-)}(\omega, z | \mathbf{q}, \mathbf{k} - \mathbf{q}) \simeq -\frac{1}{2} \tanh \frac{z}{2T} |g_{\mathbf{q}}|^2 \chi(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \Omega = 0)$$

Для сверхпроводящей щели d - симметрии

$$\varphi(\mathbf{k}) \propto \eta(\mathbf{k}) = (\cos k_x - \cos k_y)$$

уравнение для T_c принимает вид

$$1 = \sum_{\mathbf{q}} [\eta(\mathbf{q})]^2 \frac{1}{2\varepsilon(\mathbf{q})} \tanh \frac{\varepsilon(\mathbf{q})}{2T_c} \left\{ J - \widehat{V}_c - |\mathbf{t}(\mathbf{q})|^2 \widehat{\chi}_{sf} + \widehat{V}_{ep} \right\}$$

где проекции взаимодействий для d - симметрии

$$\widehat{V}_c = \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}} \cos k_x, \quad \widehat{\chi}_{sf} = \sum_{\mathbf{k}} \chi_{sf}(\mathbf{k}) \cos k_x, \quad \widehat{V}_{ep} = \sum_{\mathbf{k}} |g_{\mathbf{k}}|^2 \chi_{ph}(\mathbf{k}) \cos k_x$$

Модели взаимодействий

Кулоновское взаимодействие $V_c(\mathbf{k}) = u_c \frac{1}{|\mathbf{k}| + \kappa}$,

где $u_c = 1 \text{ eV}$, $1/\kappa = a/(4\delta)$

Спиновая восприимчивость:

$$\text{Im } \chi_{sf}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\chi_Q}{1 + \xi^2[1 + \gamma(\mathbf{q})]} \tanh \frac{\omega}{2T} \frac{1}{1 + (\omega/\omega_s)^2}$$

где $\gamma(\mathbf{k}) = (1/2)(\cos k_x + \cos k_y)$, $\omega_s \sim J$, $\xi(\delta) = (5 - 1.5) a$

Фононная восприимчивость

$$V_{ep}(\mathbf{k}, \omega) = g_{ep} \frac{\omega_0^2}{\omega_0^2 - \omega^2} \frac{1}{k^2 + \kappa_1^2}, \quad g_{ep} = 2 \text{ eV}$$

где $\xi_{ch} = 1/\kappa_1 = a/(2\delta)$, $\omega_0 = 0.04 \text{ eV} = 500 \text{ K}$

Параметры взаимодействий ($\delta = 0.10$)

Параметр гибридизации (дисперсия электронов):

$$t(\mathbf{k}) = 4t \gamma(\mathbf{k}) + 4t' \cos k_x \cos k_y, \quad t = 0.4 \text{ eV}, \quad t' = -0.2 t$$

Межузельное кулоновское отталкивание:

$$\widehat{V}_c = u_c \sum_{\mathbf{k}} \frac{\cos k_x}{k + \kappa} = 0.22t \approx 0.9 \text{ eV}, \quad V_{c0} = 1.05 t$$

Спин-флуктуационное взаимодействие

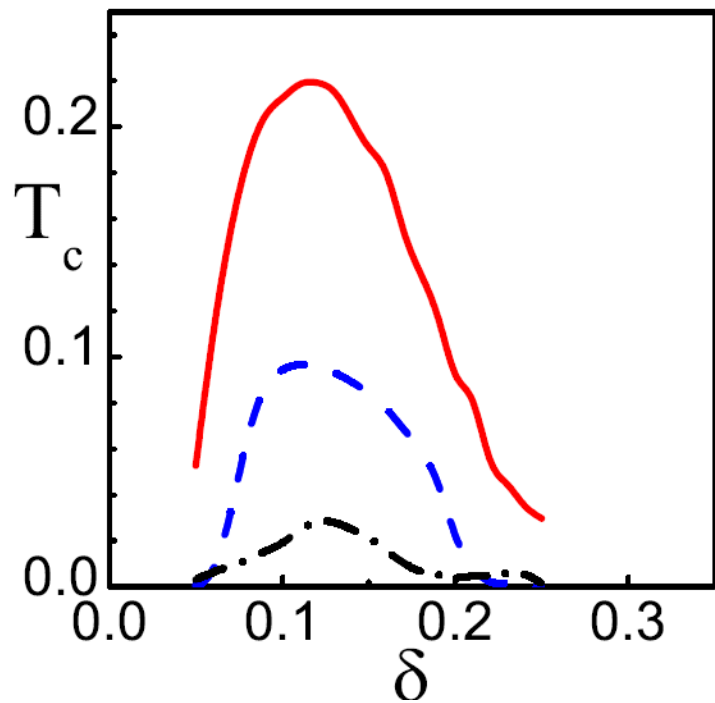
$$\widehat{\chi}_{sf} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\chi_Q \cos k_x}{1 + \xi^2 [1 + \gamma(\mathbf{q})]} = -1.05/t \approx 2.5 (1/\text{eV}),$$

$$\langle |t(\mathbf{k})|^2 \rangle_{\text{BZ}} \widehat{\chi}_{sf} \approx 4 t^2 \widehat{\chi}_{sf} = -4t \approx 1.6 \text{ eV},$$

Электрон-фононное взаимодействие

$$\widehat{V}_{ep}^d = g_{ep} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\cos k_x}{k^2 + \kappa_1^2} = 1.4 t \approx 0.6 \text{ eV}, \quad \frac{\widehat{V}_{ep}^d}{\widehat{V}_{ep}^s} \approx 0.5$$

Температура СП перехода в приближении БКШ



— СФ + ЭФ + V_c

- - - СФ

- . - . ЭФ

Высокие температура СП

($T_c^{\max} \simeq 900$ K)

обусловлены пренебрежением
перенормировки спектра:

параметр $Z_k = 1$

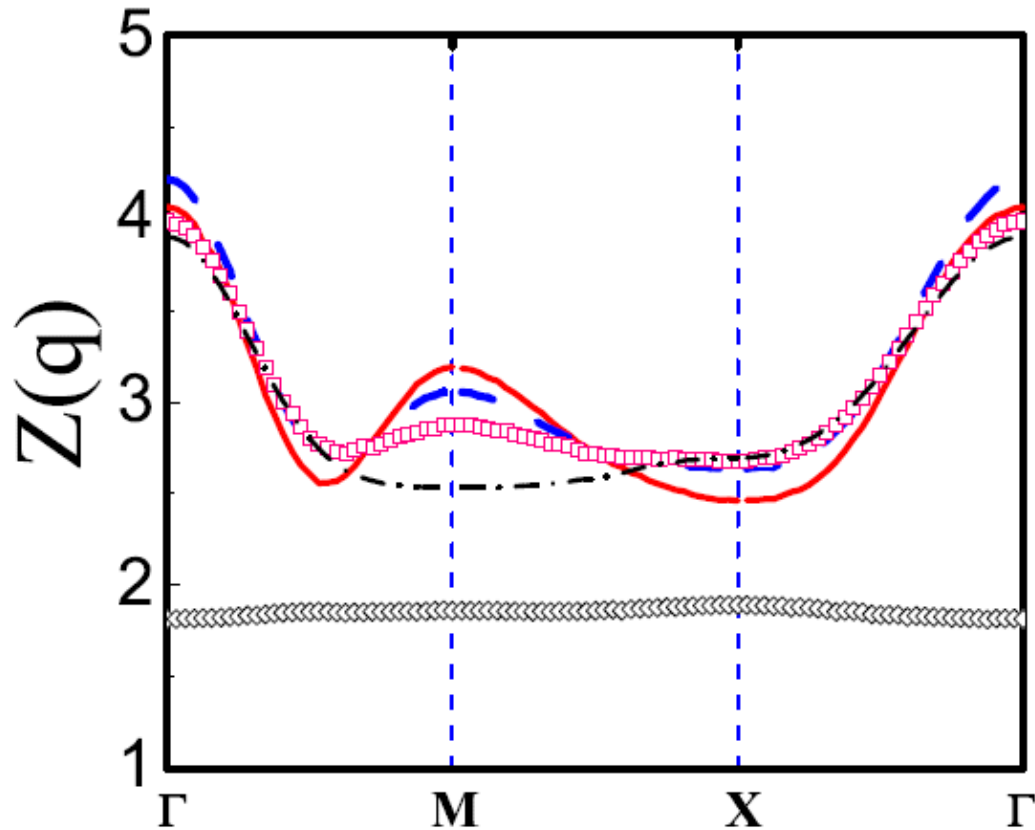
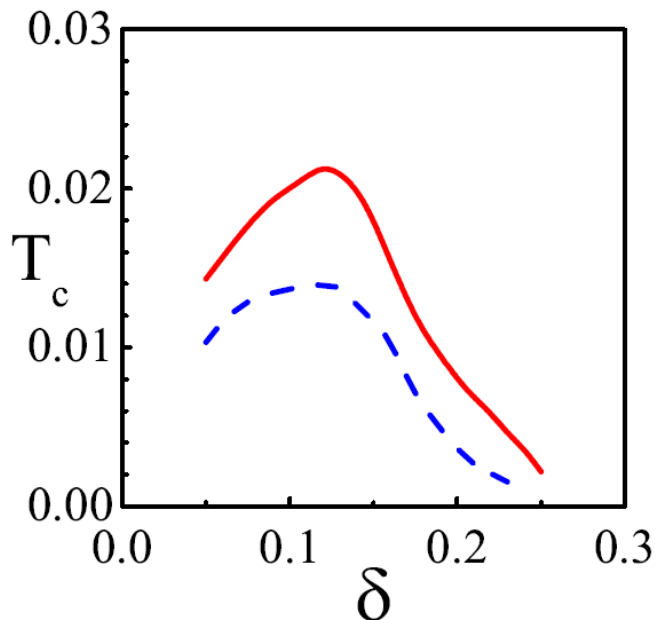


FIG. 6: (Color online) Doping dependence of the renormalization parameter $Z(\mathbf{q})$ along the symmetry directions $\Gamma(0,0) \rightarrow M(\pi,\pi) \rightarrow X(\pi,0) \rightarrow \Gamma(0,0)$ at $T \approx 140$ K for $\delta = 0.05$ (red solid line), $\delta = 0.10$ (blue dashed line), $\delta = 0.15$ (pink squares), $\delta = 0.25$ (black dash-dotted line), and $\delta = 0.35$ (black diamonds).

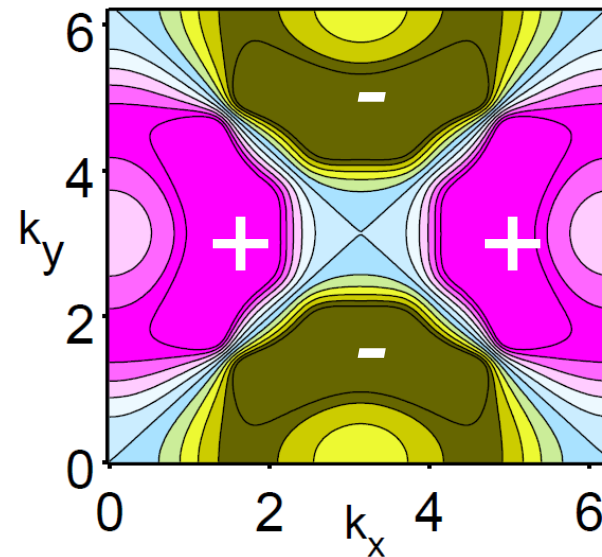
Температура и СП щель в приближении сильной связи

$$\varphi_{\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{T_c}{N} \sum_{\mathbf{q}} \sum_m \frac{\varphi_{\sigma}(\mathbf{q}, i\omega_m)}{[\omega_m Z_{\mathbf{q}}]^2 + [\varepsilon_2(\mathbf{q}) + X_{\mathbf{q}}]^2} \times \{J(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - V_c(\mathbf{k} - \mathbf{q}) + V_{cf}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) + V_{sf}(\mathbf{q}, \mathbf{k} - \mathbf{q}, \omega_n - \omega_m) + V_{ep}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \omega_n - \omega_m)\}$$



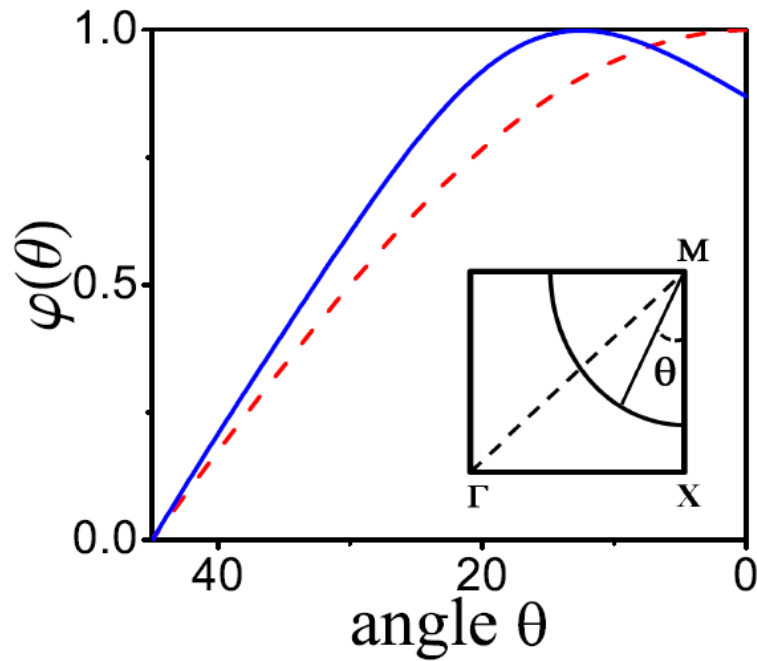
— $C\Phi + \text{Э}\Phi + V_c$

- - - $C\Phi$ ($T_c^{\max} \simeq 90 \text{ K}$)

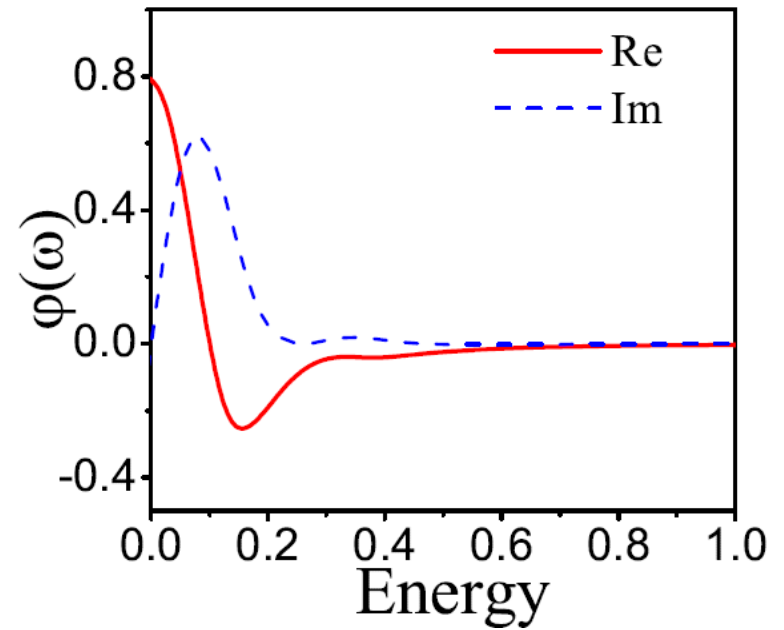


d -волновая
симметрия щели

СП щель в приближении сильной связи



Типичная угловая
зависимость d -волновой
щели



СП щель зависит от энергии
в области $\omega \sim 0.3 t \sim 2J$

- В модели Хаббарда при большой величине межузельного кулоновского отталкивания $V \gg J$ ($V \sim W$) сверхпроводимость должна исчезать.

Однако кластерные расчеты показывают устойчивость сверхпроводимости к этому взаимодействию в пределе сильных корреляций.

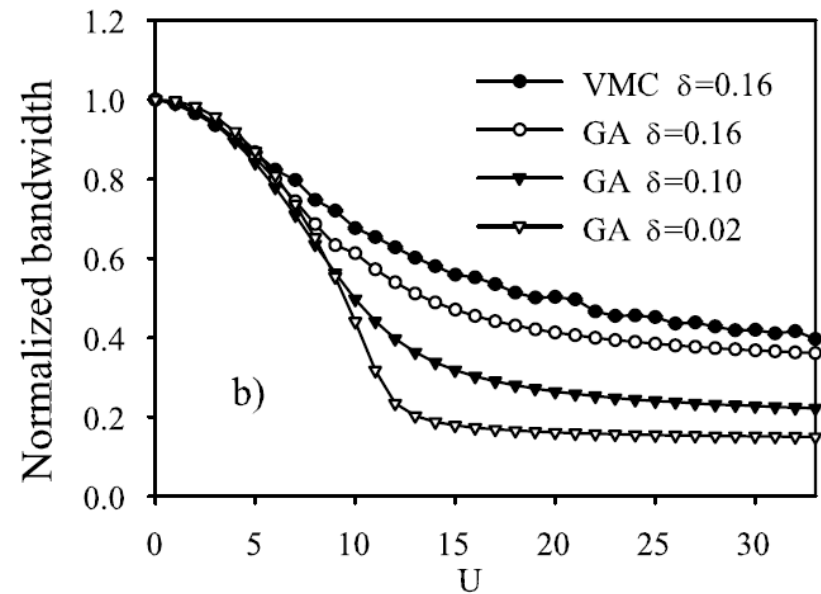
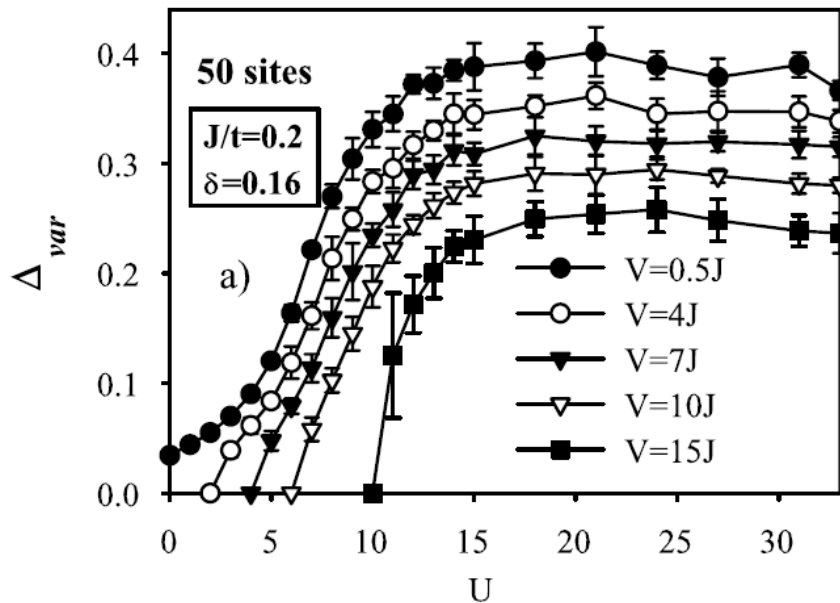
Increasing d -Wave Superconductivity by On-Site Repulsion

E. Plekhanov,¹ S. Sorella,^{1,3} and M. Fabrizio^{1,2}

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} (c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + \text{H.c.}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \\ + J \sum_{\langle ij \rangle} \left(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \frac{1}{4} n_i n_j \right) + V \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j,$$

Вариационный метод
Монте Карло

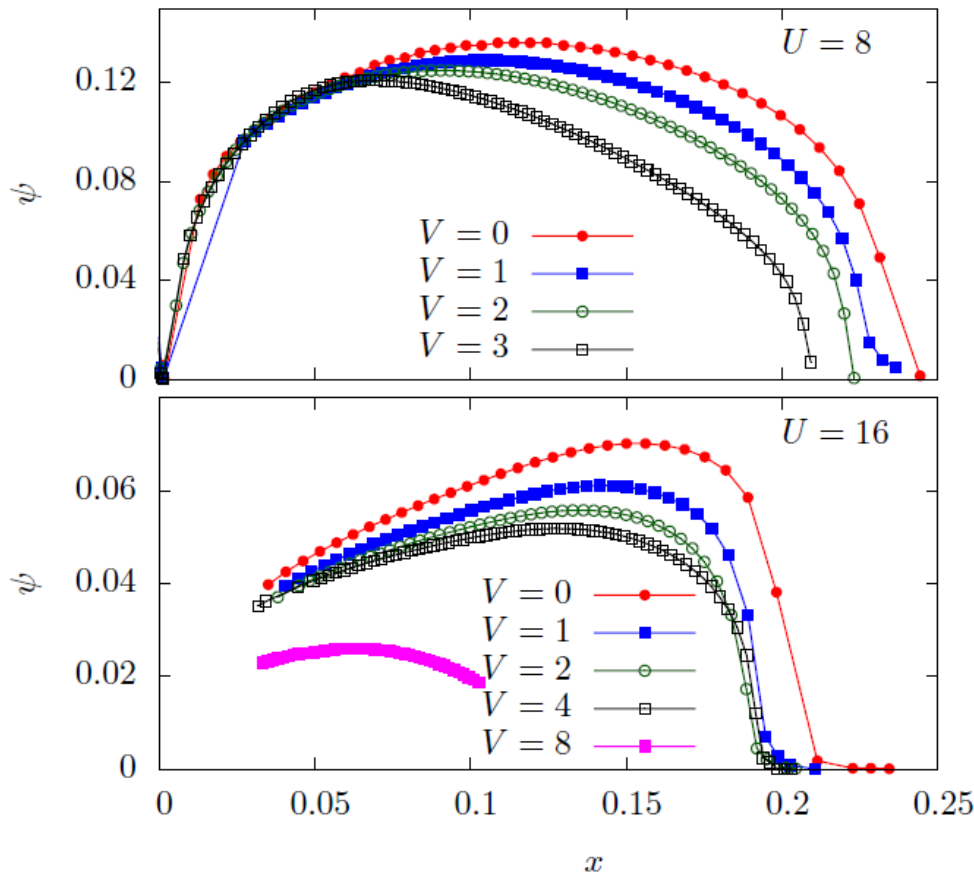
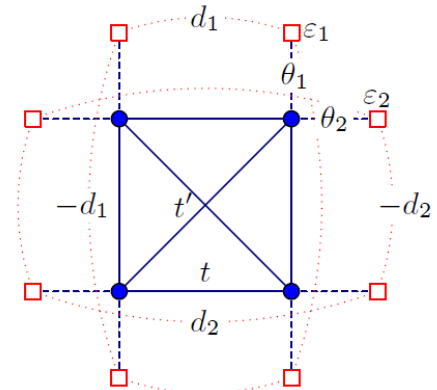
$$|\Psi\rangle = A \hat{P}_N \hat{P}_{\text{Jastrow}} \hat{P}_G |\Psi_{\text{BCS}}\rangle$$



Resilience of d -wave superconductivity to nearest-neighbor repulsion

D. Sénéchal,¹ A. Day,¹ V. Bouliane,¹ and A.-M. S. Tremblay^{1,2}

$$H = - \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + V \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j$$



Кластерный метод теории динамического среднего поля (Cellular DMFT)

$$\psi = \sum_{\langle i,j \rangle_x} c_{i\uparrow} c_{j\downarrow} - \sum_{\langle i,j \rangle_y} c_{i\uparrow} c_{j\downarrow} + \text{c.c.}$$

arXiv:1212.4503[cond-mat.]

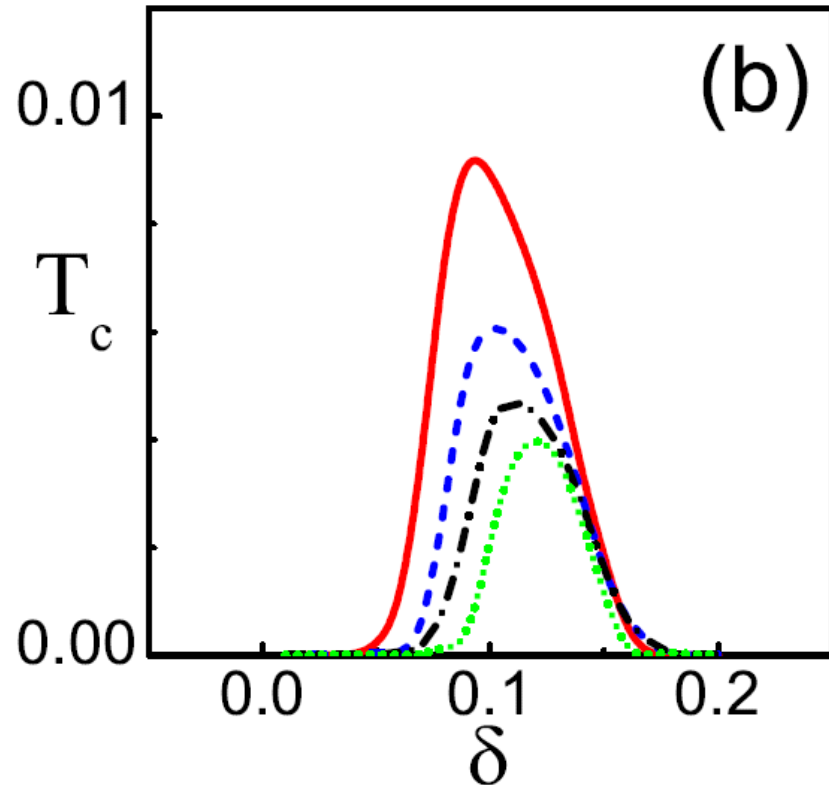
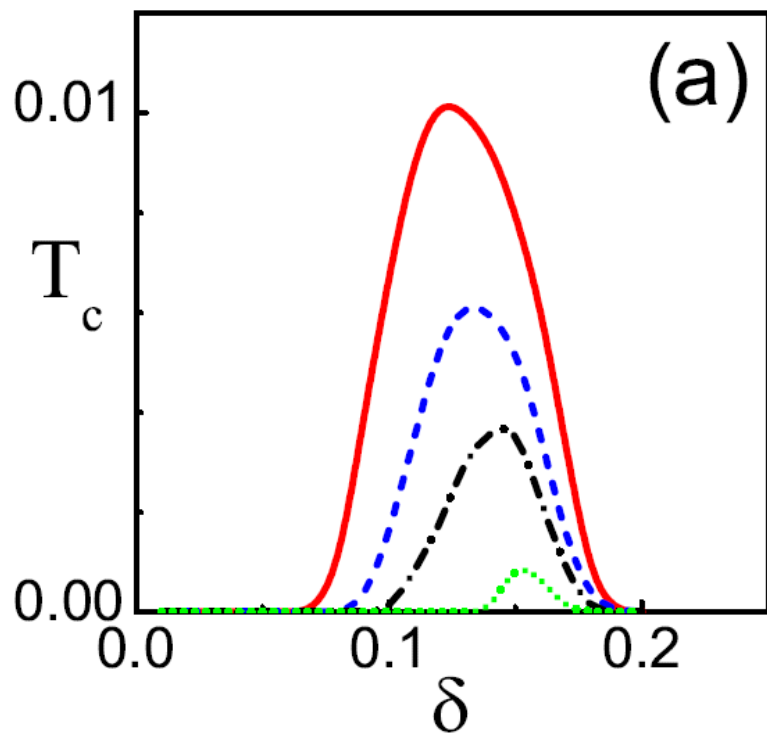


FIG. 6: (Color online) $T_c(\delta)$ for (a) $U = 8$ and (b) for $U = 16$ for $V = 0.0$ (bold red line), $V = 0.5$ (blue dashed line), $V = 1.0$ (black dash-dotted line), and $V = 2.0$ (green dotted line).

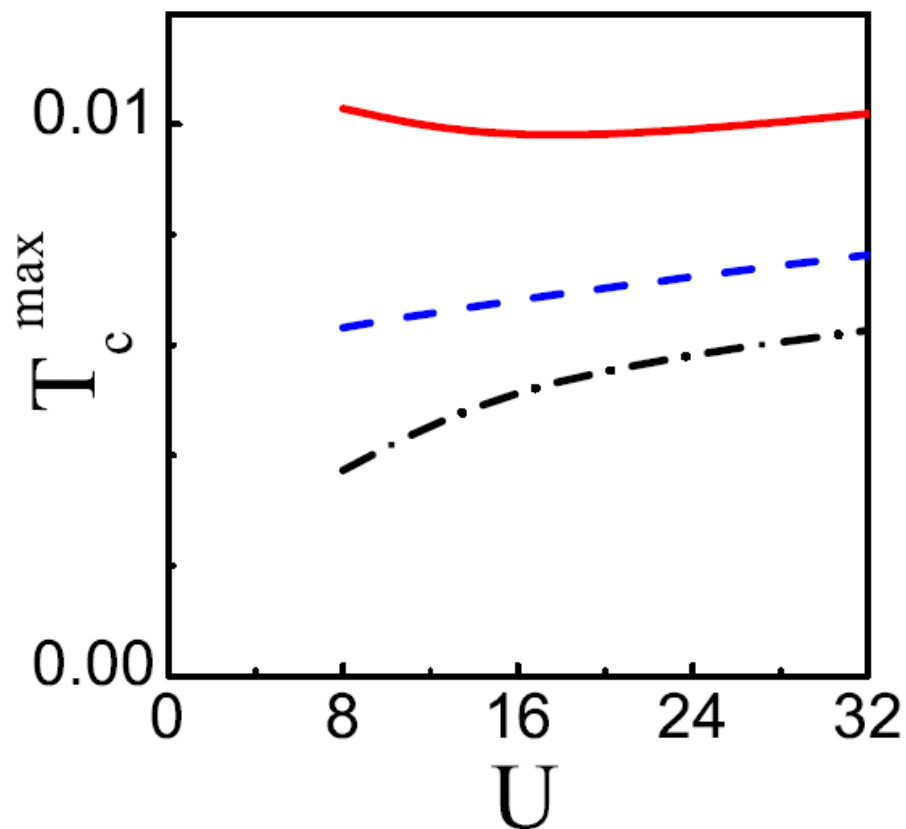


FIG. 7: (Color online) Maximum $T_c(\delta)$ as a function of U for $V = 0.0$ (bold red line), $V = 0.5$ (blue dashed line), and $V = 1.0$ (black dash-dotted line).

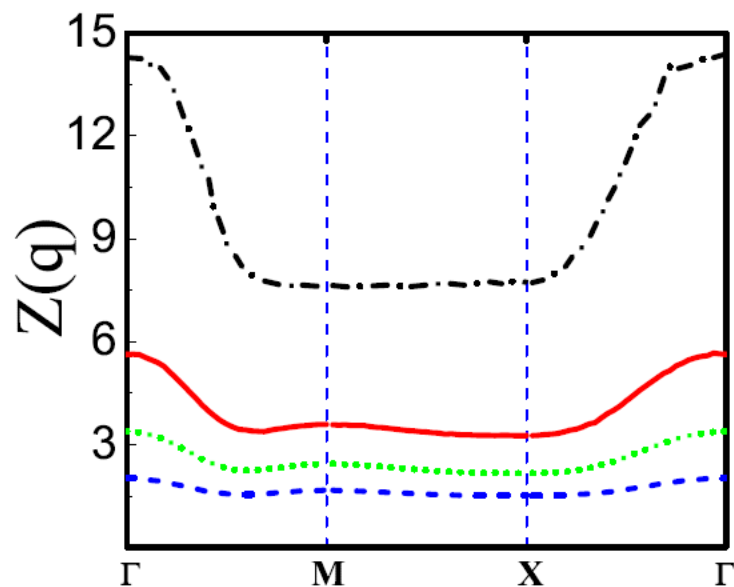
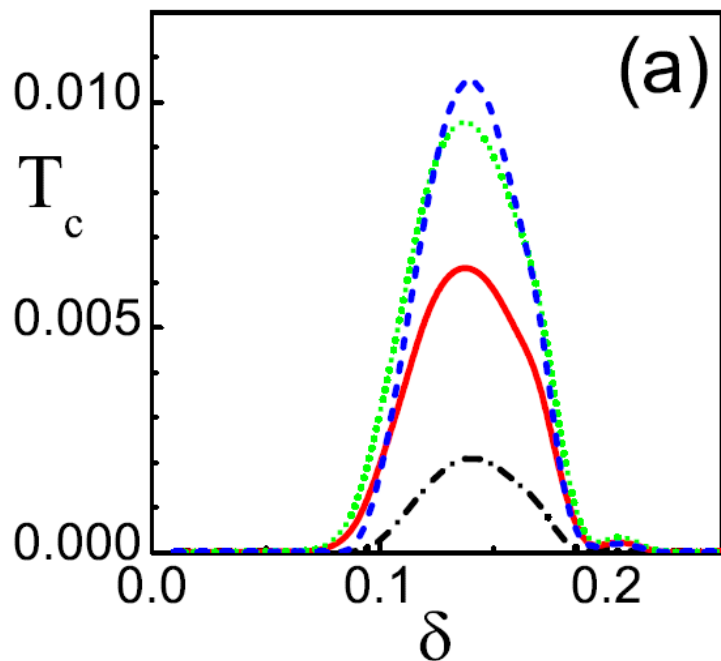


FIG. 8: (Color online) $T_c(\delta)$ dependence on spin-fluctuation contribution χ_{sf} in Eq. (50) for $\omega_s = 0.2$ (black dash-dotted line), $\omega_s = 0.4$ (bold red line), $\omega_s = 0.6$ (green dotted line), and $\omega_s = 1.0$ (blue dashed line) calculated for (a) finite $Z(\mathbf{q})$

Выводы

Высокотемпературная сверхпроводимость в медно-оксидных соединениях может быть описана как d -волновое спаривание носителей заряда (дырок или электронов) за счет обменного АФ и спин-флуктуационного взаимодействий, возникающих в модели с сильными электронными корреляциями.

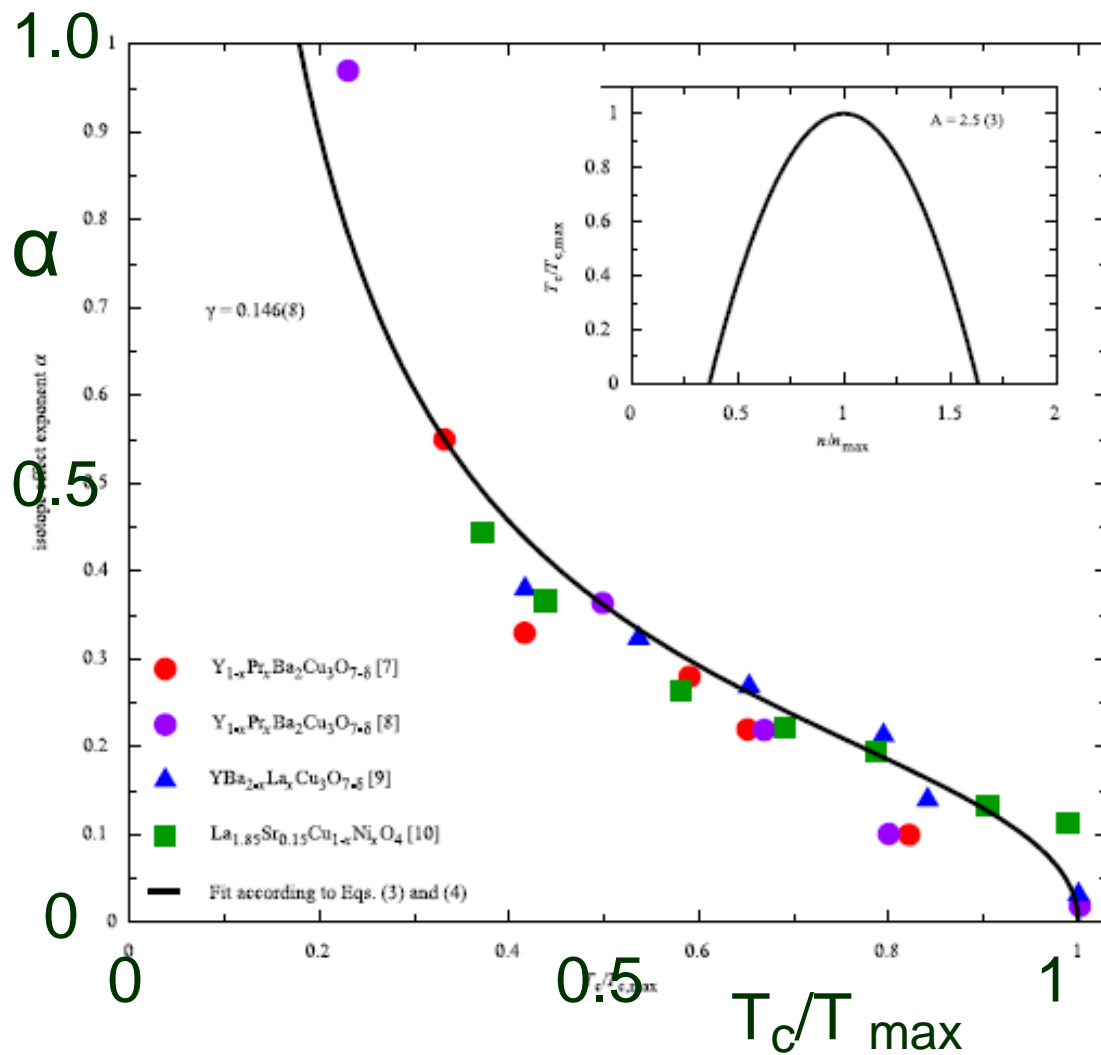
Кулоновское межузельное отталкивание дает малый вклад в d -волновом канале и компенсируется АФ притяжением ($J - V_C \ll J \sim 0.13$ эВ)

- Электрон-фононное взаимодействие в d -волновом канале дает вклад, много меньший спин-флуктуационного, обусловленного кинематическим взаимодействием.
- Кинематическое спин-флуктуационное взаимодействие возникает в сильно-коррелированных системах как купраты и приводит к ВТСП

- **Электрон-фононное спаривание в купратах:
Эксперимент**

Фононы в купратах:

- показывают лишь небольшое изменение при СП переходе (рассеяние нейтронов и оптические спектры) – константа связи $\lambda < 0.5$
- в нормальной фазе константа связи в перенормировке электронного спектра $\lambda \leq 1.5$ (поляронный эффект заметен)
- изотопический эффект для T_c незначителен

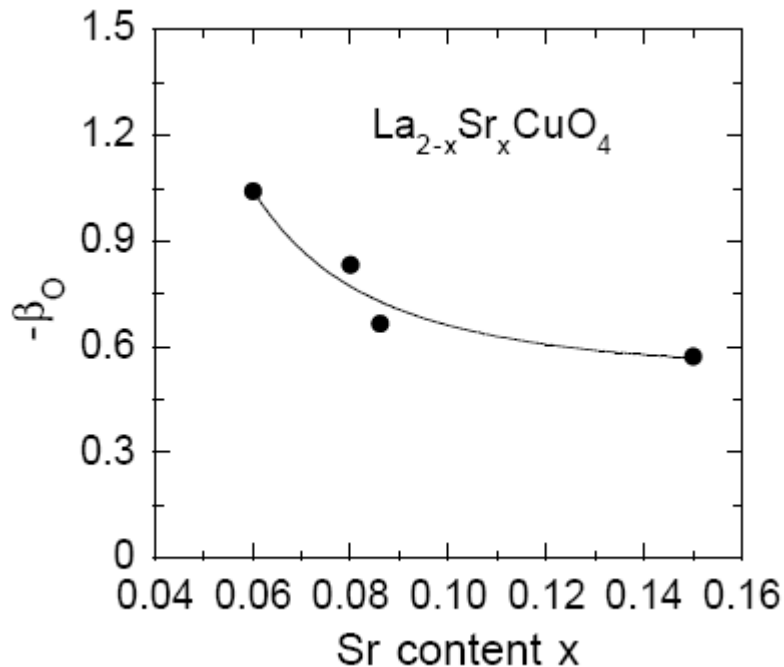


Изотоп-эффект
для T_c по
кислороду,
 $^{16}O \rightarrow ^{18}O$

$$\alpha_O = -\frac{\delta T_c / T_c}{\delta M / M} \simeq 8 \frac{\delta T_c}{T_c}$$

*S. Weyeneth and
K.A. Müller (2011)*

Magnetic penetration depth oxygen isotope effect



$$\rho_s^\alpha = c^2 / \lambda_\alpha^2 = 4\pi e^2 n_s / m_\alpha^*$$

$$\beta = -\frac{d \ln \lambda_{ab}^{-2}}{d \ln M} = \frac{d \ln m_{ab}^*}{d \ln M}$$

$$\frac{m^*}{m} = \exp(\gamma E_p / \hbar \omega) = \exp(2\beta)$$

$$\frac{m^*}{m} \approx 3.3 - 8, \quad E_p \approx 1.6 \text{ eV}$$

Guo-meng Zhao,
Phys. Scripta 83, 038302 (2011)

Superconducting T_c in BCS theory

$$k_B T_c = 1.13 \hbar \omega \exp(-1/\lambda),$$

$$\lambda = \tilde{N}(0)V = \lambda_0 \frac{m^*}{m} = \lambda_0 \exp(\gamma E_p / \hbar \omega).$$

T_c oxygen isotope effect for polarons

$$\alpha = -\frac{d \ln T_c}{d \ln M} = \frac{1}{2} - \frac{\beta}{\lambda}$$

$$\alpha \sim 0 \quad (\lambda \sim 2), \quad \alpha \sim -0.5 \quad (\lambda \leq 1)$$

which is in odd with experiments