

Министерство образования и науки Российской Федерации  
Федеральное государственное автономное образовательное  
учреждение высшего образования  
«КАЗАНСКИЙ (ПРИВОЛЖСКИЙ) ФЕДЕРАЛЬНЫЙ  
УНИВЕРСИТЕТ»

ИНСТИТУТ ФИЗИКИ  
КАФЕДРА ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Направление: 03.03.02 – «физика»

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА  
РОЛЬ ФЛУКТУАЦИЙ В СВЕРХПРОВОДНИКАХ С  
НЕТРИВИАЛЬНЫМ КУПЕРОВСКИМ СПАРИВАНИЕМ

Студент 4 курса

группы 06-511

«\_\_» \_\_\_\_\_ 2019 г. \_\_\_\_\_ (Ф.М. Сираев)

Научный руководитель:

к.ф.-м.н., доцент,

«\_\_» \_\_\_\_\_ 2019 г. \_\_\_\_\_ (М.В. Авдеев)

Заведующий кафедрой:

д.ф.-м.н., профессор,

«\_\_» \_\_\_\_\_ 2019 г. \_\_\_\_\_ (Ю.Н. Прошин)

Казань – 2019

# Содержание

<b>Введение</b> . . . . .	3
<b>Глава 1. Учёт флуктуационных поправок в основные уравнения теории необычной сверхпроводимости</b> . . . . .	12
1.1. Статистическая сумма в представлении функционального интеграла . . . . .	12
1.2. Грассмановы числа. Основные понятия и правила . . . . .	13
1.3. Свободная энергии сверхпроводника . . . . .	15
<b>Глава 2. Влияние флуктуаций на фазовые диаграммы сверхпроводников с нетривиальным куперовским спариванием</b> . . . . .	22
2.1. Введение . . . . .	22
2.2. Суперобменное взаимодействие . . . . .	24
2.3. Конкуренция суперобменного и косвенного, типа РККИ, взаимодействий . . . . .	27
2.4. Обсуждение результатов . . . . .	30
<b>Заключение</b> . . . . .	33
<b>Список литературы</b> . . . . .	34

# Введение

Явление сверхпроводимости было открыто более века назад в 1911г. Камерлинг-Оннесом [1] в Лейденской криогенной лаборатории. В ходе экспериментов по изучению поведения электрического сопротивления ртути при низких температурах, обнаружилось его резкое падение до нуля при температуре 4.15 К. Такое состояние вещества, при котором оно полностью теряет электрическое сопротивление при охлаждении до некоторой критической температуры  $T_c$  было названо сверхпроводимостью. Однако характерной особенностью сверхпроводящего состояния является не только полное отсутствие электрического сопротивления, но и идеальный диамагнетизм. В 1933 г. Мейсснером и Оксенфельдом [2] было экспериментально обнаружено, что сверхпроводник полностью выталкивает из себя внешнее магнитное поле. Первая феноменологическая теория электродинамики сверхпроводников, правильно описывающая диамагнетизм и поведение сверхтекучей компоненты электронной жидкости была предложена в работе Фрица и Хайнца Лондонов в 1935 году [3]. Однако теория Лондонов основывалась на классической физике и не учитывала квантовых аспектов этого удивительного явления. Первая феноменологическая квантовая теория была впервые предложена только в 1950 г. Гинзбургом и Ландау [4] и основана на теории фазовых переходов второго рода [5]. Согласно этой теории при фазовом переходе второго рода происходит изменение симметрии системы при достижении некоторой критической температуры  $T_c$ , ниже которой для сверхпроводящего состояния симметрия оказывается понижена и, таким образом, сверхпроводящая фаза становится более упорядоченной относительно нормального состояния. В качестве количественной меры, характеризующей такое упорядоченное состояние в теории фазовых переходов второго рода выступает параметр порядка (ПП), который отличен от нуля при  $T < T_c$  и обращается в нуль в точке фазового перехода. В качестве ПП в теории ГЛ выступает волновая функция  $\Psi(\mathbf{r})$  сверхпроводящего конденсата, а теория строится на разложении свобод-

ной энергии сверхпроводника по степеням  $\Psi$  вблизи критической температуры. Таким образом область применения теории Гинзбурга-Ландау ограничивается областью температур  $T_c - T \ll T_c$ , а с другой стороны ограничена в области непосредственной близости к точке перехода, где существенную роль начинают играть флуктуационные эффекты.

Для понимания микроскопической природы сверхпроводимости важным оказалось открытие в 1950 г. изотопического эффекта [6]. Было показано, что критическая температура сверхпроводящего перехода  $T_c$  зависит от массы изотопа атома металла  $M_a$  как

$$T_c M_a^{1/2} = \text{const},$$

что свидетельствовало о том, что формирование сверхпроводимости связано с колебаниями кристаллической решётки. В том же году независимо была опубликована работа [7], в которой было указано на роль притяжения электронов через поле фононов в возникновении сверхпроводимости. Развивая эти идеи, в 1957 г. Бардину, Куперу и Шрифферу удалось построить первую микроскопическую теорию сверхпроводимости (БКШ) [8]. В этой теории показано, что наличие сколь угодно малого притяжения между электронами приводит к их связанному состоянию – к образованию куперовских пар. При этом электроны, составляющие куперовскую пару, имеют энергию, близкую к энергии Ферми, противоположно направленные импульсы и проекции спинов ( $|\mathbf{k}, \uparrow\rangle$  и  $|\mathbf{-k}, \downarrow\rangle$ ). Куперовские пары могут находиться в одном квантовом состоянии, образуя сверхпроводящий конденсат, при этом возбуждённые состояния такой системы отделены от основного конечной величиной энергетической щели, что приводит к возможности бездиссипативного протекания тока.

Несмотря на длинную историю изучения, явление сверхпроводимости до сих пор привлекает к себе внимание. По данной теме год от года выходят всё новые статьи, как теоретические, так и экспериментальные. Особое место среди них занимают работы посвящённые проблеме сверхпроводников с нетриви-

альным куперовским спариванием и, в частности, проблеме высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП). Богатая физика в таких системах и возможность работы при температурах выше кипения жидкого азота делают подобные соединения перспективными в различных технических приложениях, начиная со сверхпроводящих магнитов и кабелей и заканчивая приложениями в сверхпроводящей электронике и спинтроники. Стоит отметить, что теоретически, нет ограничений на верхнюю границу критической температуры: сверхпроводимость возможна и при комнатных температурах. Первые работы, посвящённые возможности наблюдения сверхпроводимости при высоких температурах были опубликованы Гинсбургом [9] и Литтлом [10] в 1964 году. На это также оптимистично указывают результаты недавних экспериментов. Так, в 2015 г. сверхпроводимость была найдена в соединении серы и водорода ( $\text{H}_3\text{S}$ ) с критической температурой  $T_c = 203 \text{ K}$  при давлении 90 ГПа [11]. Совсем недавно, в 2019 г. в соединении  $\text{LaH}_{10}$  [12] при давлении 150 ГПа удалось зафиксировать сверхпроводящий переход при критической температуре  $T_c = 250 \text{ K}$  ( $-23^\circ\text{C}$ ), что на сегодняшний день остаётся рекордным значением. При этом, высокая критическая температура в этих соединениях была предсказана на основе электрон-фононного механизма спаривания и современных теоретических методов расчета структуры вещества.

Однако, купраты интересны не только с точки зрения их высоких температур сверхпроводящего перехода, но и своей необычной сверхпроводимостью. Свое название необычные сверхпроводники получили из-за того, что механизм спаривания в данных системах отличен от электрон-фононного. Вместе с тем, материалы, составляющие их основу, проявляют свойства изоляторов, а сверхпроводимость начинает наблюдаться только после их легирования. Такие материалы отличаются очень сложными фазовыми диаграммами, ключевой особенностью которых является конкуренция между упорядоченными состояниями.

Экспериментальное подтверждение существования необычной сверхпроводимости было опубликовано в 1986 году в работе Карла Александра Мюллера

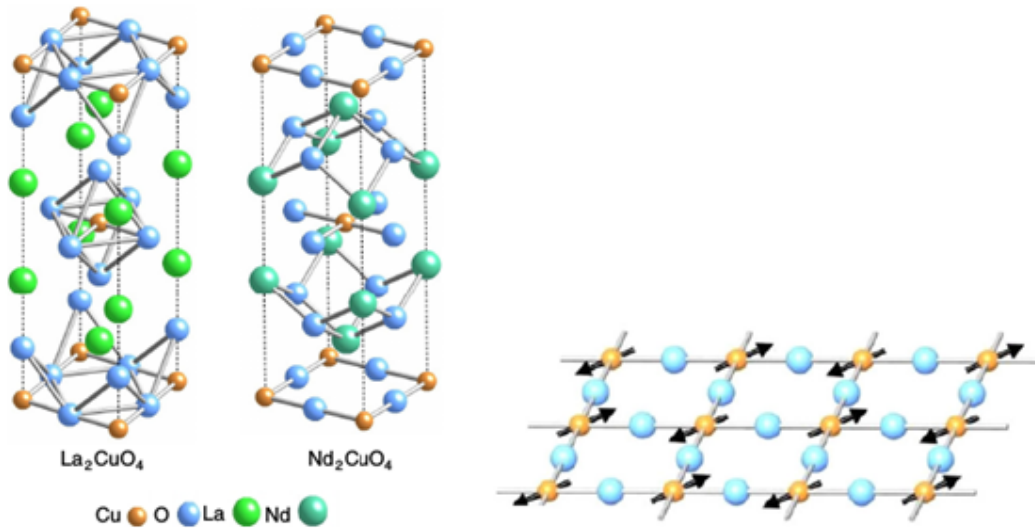


Рис. 1. Структура сверхпроводников  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  и  $\text{Nd}_2\text{CuO}_4$ , а также структура плоскости  $\text{CuO}$  в этих соединениях. Рисунок взят из обзора [18]

ра и Йоханнеса Георга Беднорца [13] для соединения  $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$ . И уже в 1987 году были получены соединения  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$  с критической температурой  $T_c = 93\text{ K}$  [14], что превышает температуру кипения жидкого азота. Позже ВТСП была обнаружена для многих соединений купратов [15–17].

Главной отличительной особенностью купратов является наличие медь-кислородных плоскостей в элементарной ячейке. Элементарные ячейки для двух типов купратов изображены на рис. 1. Экспериментально установлено, что за явление сверхпроводимости ответственны именно плоскости  $\text{CuO}$ . Поэтому, несмотря на существенное различие общей химической формулы, в ряде задач можно ограничиться рассмотрением только этих плоскостей, не конкретизируя о каком именно соединении идёт речь. На рис. 2 приведена фазовая диаграмма купратов, построенная на основе результатов многочисленных экспериментов. Родительские соединения купратов являются диэлектриками. При температуре ниже температуры Нееля спины меди упорядочены антиферромагнитно (рис. 1). Экспериментально обнаружено, что состояние купратов зависит от концентрации носителей тока в расчёте на одну элементарную ячейку в плоскости (рис. 2). При допировании дырками или электронами антиферромагнитный порядок разрушается и система может переходить в сверхпроводящее

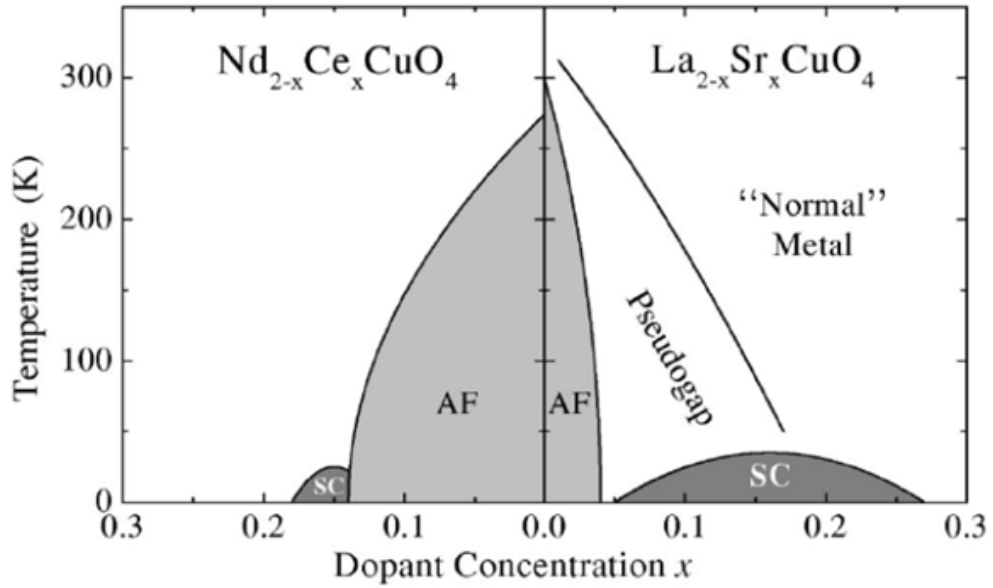


Рис. 2. Фазовая диаграмма слоистых купратов. Рисунок взят из обзора [18]

состояние. Для описания сверхпроводников необходимо знать механизм куперовского спаривания. Для обычных сверхпроводящих металлов основным является электрон-фононный механизм. Однако весь массив экспериментальных данных невозможно объяснить основываясь лишь на одном этом механизме. Для правильного теоретического описания купратов необходимо привлечение нетривиальных (отличных от электрон-фононного) механизмов куперовского спаривания. Возможные механизмы необычной сверхпроводимости в купратах давно и широко обсуждается в литературе [19–21]. Многие авторы [18–20] сходятся в том, что суперобменный и спин-флуктуационный механизмы спаривания являются основными в купратах. Одним из главных аргументов считается то, что в случае суперобменного и спин-флуктуационного взаимодействия рассчитанная зависимость щели от волнового вектора имеет  $d$ -тип симметрии, что соответствует экспериментальным данным. Однако и они не могут объяснить всех особенностей поведения этих систем в различных экспериментальных условиях. Есть работы, подчеркивающие роль электрон-фононного взаимодействия в формировании сверхпроводящей щели [22]. Прежде всего, это работы по расчету изотоп-эффекта [23]. Известно, что значения критических температур

дырочно и электронно допированных купратов сильно отличаются (рис. 2). Это обстоятельство трудно объяснить с позиций о доминировании суперобменного взаимодействия спинов в этих соединениях. Таким образом, в отличие от металлов, где сверхпроводимость возникает в результате притяжения электронов через поле фононов, в купратах не получается выделить одно доминирующее взаимодействие, пренебрегая остальными [24, 25].

Современные теории описания сверхпроводимости в металлах или ВТСП купратах в большинстве случаев основаны на понятии квазичастиц, введённом Ландау. Согласно его гипотезе, свойства многочастичных взаимодействующих систем при низких температурах определяется спектром некоторых низкоэнергетических, долгоживущих возбуждений (квазичастиц) [26]. Еще одной основой теории многочастичных систем стало приближения среднего поля (MF), которое позволило достичь значительного прогресса в теории фазовых переходов и, в частности, в теории сверхпроводимости. Отметим в этой связи, что теория БКШ основана на этом приближении. Успех теории БКШ для обычных сверхпроводников объясняется тем, что флуктуации дают небольшие поправки по отношению к результатам приближения среднего поля.

Тем не менее, как было отмечено выше, необычные сверхпроводники это как правило материалы с сильными электронными корреляциями, где могут взаимодействовать и конкурировать сверхпроводящий и магнитный ПП. Проблема учёта флуктуационных поправок в подобных квазидвумерных сверхпроводниках с необычной сверхпроводимостью, оценка их роли на критическую температуру, а также влияние их на особенности сверхпроводящего параметра порядка представляет на сегодняшний день отдельную достаточно важную и актуальную проблему. Последовательный учёт флуктуационных поправок означает выход за рамки приближения среднего поля, которое на сегодняшний день является основным рабочим приближением при исследовании необычной и высокотемпературной сверхпроводимости. Несмотря на значительные успехи в этой области [18, 19, 27–29], эта проблема до сих пор привлекает повышенное



внимание как экспериментаторов, так и теоретиков.

Свойства высокотемпературных и органических сверхпроводников, низкоразмерных и аморфных сверхпроводящих систем, изучаемых сегодня, выявляют отклонения от предсказаний, полученных на основе теории среднего поля. В первую очередь это проявляется в поведении физических величин при приближении температуры к критической, когда  $T > T_c$ . При этом сверхпроводящий переход оказывается намного более “размазанным”. Появление флуктуаций выше критической температуры приводит к возникновению сверхпроводящих эффектов, в то время как система все ещё находится в нормальной фазе, иногда далеко за пределами  $T_c$ . Такое поведение часто наблюдается в экспериментальных работах. Например, в работе [30] было показано, что в сверхтонких купратах  $Y_{1-x}Ca_xBa_2Cu_3O_7$  плотность сверхпроводящих электронов оставалась ненулевой при температурах выше критической: переход оказывался размытым (рис. 3).

Ещё один пример влияния флуктуаций на сверхпроводящие системы можно найти в работе [31] по измерению эффекта Нернста в купратах. Эксперименты показали, что эффект Нернста, теоретически описанный вблизи температуры перехода, наблюдается и при температуре намного выше критической. Похожие результаты были получены также в работах [32–35]. Один из наиболее ярких примеров явления в ВТСП купратах, не находящего объяснения в рамках приближения среднего поля – существование псевдощелевого состояния. Этой теме посвящены обзоры теоретических [36] и экспериментальных [37] работ. Однако полного понимания данного явления до сих пор нет.

Таким образом, задача о влиянии флуктуаций в сверхпроводящих системах является актуальной как для объяснения широкого спектра экспериментальных данных, так и для поиска новых явлений, остающихся за рамками стандартных приближений.

Основная цель настоящей работы – это обобщение теории сверхпроводимости учитывающей флуктуационные явления в необычных квазидвумерных

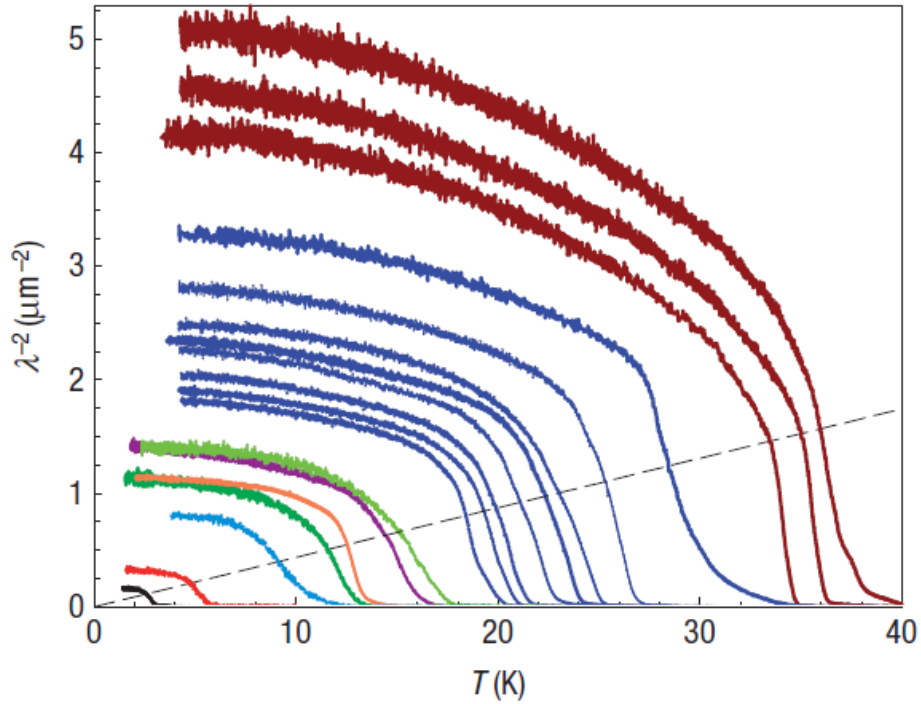


Рис. 3. Зависимость плотности сверхпроводящих электронов от температуры. (сверхпроводящая плотность обратно пропорциональна квадрату глубины проникновения магнитного поля  $n_s \sim \lambda^{-2}$ ). Графики одного цвета соответствуют одной плёнке с различными уровнями легирования. Рисунок взят из работы [30]

сверхпроводниках с нетривиальным куперовским спариванием и анализ имеющихся современных экспериментальных данных, на базе построенной теории. Для достижения цели были поставлены и решены следующие важные задачи:

- Анализ и обзор современной литературы по проблеме необычной сверхпроводимости и роли флуктуационных явлений в рассматриваемых материалах.
- Вывод методами квантовой теории поля функционала свободной энергии сверхпроводящей системы, с учётом флуктуационных поправок. Вывод уравнения самосогласования на сверхпроводящий параметр порядка.
- Численный расчёт критической температуры сверхпроводящего перехода, а также угловой зависимости ПП в двумерных системах с различными потенциалами куперовского спаривания.

- Анализ и оценка недавних экспериментальных данных [30] в рамках полученных результатов.

Выпускная квалификационная работа состоит из введения, двух глав и заключения. Во введении приведён обзор по ключевым теоретическим и экспериментальным работам по проблеме необычной сверхпроводимости. Обозначена мотивация и актуальность настоящей работы, а также ставятся её цели и задачи. В первой главе приводится последовательный вывод уравнения самосогласования на сверхпроводящий параметр порядка с учётом флуктуационных поправок. Вывод приводится на основе вариационной теории возмущений в представлении функциональных интегралов по грассмановым полям. Приводятся необходимые математические сведения из теории грассмановых чисел. Во второй главе, в рамках развитой теории, последовательно вычисляется критическая температура сверхпроводящего перехода для различных видов спаривательного взаимодействия, а также рассчитывается угловая зависимость сверхпроводящего параметра порядка на контуре Ферми при различных значениях электронной концентрации. На основе полученных результатов обсуждаются недавние экспериментальные данные.

В заключении проводится анализ и оценка полученных результатов и сравнение их экспериментальными данными.

# Глава 1

## Учёт флуктуационных поправок в основные уравнения теории необычной сверхпроводимости

В данной главе приводится последовательный вывод уравнения самосогласования на сверхпроводящий параметр порядка с учётом флуктуационных поправок. Все дальнейшие выкладки и расчёты производятся с помощью математического аппарата функциональных интегралов в совокупности с методом вариационной теории возмущений, предложенных Ричардом Фейнманом. Здесь мы рассматриваем только механизмы синглетного сверхпроводящего спаривания.

### 1.1. Статистическая сумма в представлении функционального интеграла

Одним из способов описания многочастичной физической системы является метод термодинамических потенциалов. Для описания сверхпроводимости удобным оказывается потенциал свободной энергии Гельмгольца  $F$  [38]. Связь между свободной энергией и статистической суммой системы имеет вид

$$Z = e^{-\beta F} = \text{Tr}(e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}}), \quad (1.1)$$

где  $\beta$  – обратная температура,  $\hat{\mathcal{H}}$  – гамильтониан системы, а знак  $\text{Tr}$  обозначает операцию взятия следа матрицы. Гамильтониан сверхпроводящих электронов в импульсном представлении (напомним, что здесь рассматривается только синглетное спаривание) через операторы вторичного квантования будет иметь вид

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} \left[ c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} + c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow} \right] + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \quad (1.2)$$

$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$  – потенциал взаимодействия в импульсном пространстве,  $\varepsilon_{\mathbf{k}}$  – закон дисперсии квазичастиц,  $c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger$ ,  $c_{\mathbf{k}\alpha}$  – операторы рождения и уничтожения ферми-частиц с импульсом  $\mathbf{k}$  и проекцией спина  $\alpha$ . Для расчётов мы будем пользоваться формализмом функциональных интегралов [39]. Данный подход позволяет записать статистическую сумму (доказательство для формализма бозе- и ферми-систем приведено в [40]) в виде

$$Z = \int \mathcal{D}\bar{\psi}\mathcal{D}\psi e^{-S(\bar{\psi},\psi)},$$

$$S = \int_0^\beta d\tau \sum_{\mathbf{k},\alpha} \bar{\psi}_{\mathbf{k},\alpha} [\partial_\tau + \varepsilon_{\mathbf{k}}] \psi_{\mathbf{k},\alpha} + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \bar{\psi}_{\mathbf{k}\uparrow} \bar{\psi}_{-\mathbf{k}\downarrow} \psi_{-\mathbf{k}'\downarrow} \psi_{\mathbf{k}'\uparrow} \quad (1.3)$$

где  $S$  – термодинамическое действие,  $\tau$  – мнимое время,  $N$  – число узлов кристаллической решётки и  $\bar{\psi}, \psi$  – два сопряжённых грассмановых поля<sup>1</sup> (см., например, монографию [41]). Соответственно, свободную энергию  $F$  можно представить в виде

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln \int \mathcal{D}\bar{\psi}\mathcal{D}\psi e^{-S(\bar{\psi},\psi)}.$$

Для того чтобы продвинуться дальше необходимо привести минимально необходимые математические свойства и правила работы с грассмановыми числами.

## 1.2. Грассмановы числа. Основные понятия и правила

Грассмановы числа, это математические объекты, основным свойством которых является их антикоммутативность, т.е.:

$$\eta_i \eta_j = -\eta_j \eta_i, \quad (1.4)$$

откуда, в частности, следует

$$\eta_i \eta_i = 0. \quad (1.5)$$

Аналогично комплексным числам, для каждого грассманова числа  $\eta$  определено своё сопряжённое число  $\bar{\eta}$ . Однако при повторном сопряжении, в отличие от

<sup>1</sup> для краткости мы опускаем зависимость грассмановых полей от мнимого времени  $\tau$ .

обычных комплексных чисел, грассманоно число меняет знак  $\bar{\eta}_i = -\eta_i$  и, таким образом, комбинация  $\bar{\eta}\eta$  при сопряжении  $\overline{(\bar{\eta}\eta)} = -\eta\bar{\eta} = \bar{\eta}\eta$  остаётся инвариантной.

Другим важным понятием в теории грассмановых чисел является операция взятия производной от произведения полинома  $\eta_1\eta_2\dots\eta_N$ . Производная в грассмановой алгебре требует модификации: существует понятие левой  $\overleftarrow{\partial}$  и правой  $\overrightarrow{\partial}$  производных, соответственно. При этом, при взятии левой (правой) производной от полинома, вначале нужно с учётом знака переставить в самое левое (правое) положение соответствующую переменную, и затем взять по ней производную, аналогично, как это делается в обычном дифференциальном исчислении. В качестве примеров взятия левой и правой производных приведём следующие выражения

$$\begin{aligned}\overleftarrow{\partial}_{\eta_2}\eta_1\eta_2\eta_3 &= -\overleftarrow{\partial}_{\eta_2}\eta_2\eta_1\eta_3 = -\eta_1\eta_3, \\ \overrightarrow{\partial}_{\eta_1}\eta_1\eta_2\eta_3 &= \overrightarrow{\partial}_{\eta_1}\eta_2\eta_3\eta_1 = \eta_2\eta_3.\end{aligned}$$

С учётом свойств грассмановых чисел (1.4) и (1.5) любую функцию можно представить в виде конечного ряда Тейлора. Так, например, для функции  $e^{-\eta}$  справедливо разложение

$$e^{-\eta} = 1 - \eta + \frac{1}{2}\eta\eta - \frac{1}{3!}\eta\eta\eta \dots,$$

которое в силу свойства (1.5) сводится к простому тождеству  $e^{-\eta} = 1 - \eta$ . Существует также определение для интеграла по грассмановой переменной. Постулируются следующие правила

$$\int d\eta = 0, \quad \int \eta d\eta = 1. \quad (1.6)$$

Рассмотрим гауссов интеграл следующего вида

$$\iint d\bar{\eta} d\eta \exp\{-\bar{\eta}A\eta\}$$

и, воспользовавшись свойствами (1.6), легко показать, что

$$\iint d\bar{\eta} d\eta \exp(-\bar{\eta} A \eta) = A \int d\bar{\eta} \bar{\eta} \int d\eta \eta = A, \quad (1.7)$$

где  $A$  – некоторое число. В многомерном случае, когда  $\hat{A}$  является эрмитовой матрицей, а  $\boldsymbol{\eta}$  вектором в пространстве грассмановых чисел, то гауссов интеграл (1.7) сводится к следующему выражению

$$\int \mathcal{D}\bar{\eta} \mathcal{D}\eta \exp(-\bar{\eta} \hat{A} \eta) = \det \hat{A} = e^{\text{Tr} \ln \hat{A}}, \quad (1.8)$$

где символ  $\mathcal{D}\eta$  обозначает для краткости произведение  $\prod_{i=1}^N d\eta_i$ . В дальнейшем данные свойства помогут в описании фермионных полей. Аналогично, бозонные поля описываются “обычными” комплексными числами.

### 1.3. Свободная энергии сверхпроводника

Вычисление статистической суммы (1.3), и соответственно, свободной энергии системы мы будем производить в рамках вариационной теории возмущений, предложенной Ричардом Фейнманом. Первый шаг данного метода сводится к перераспределению истинного термодинамического действия системы следующим образом

$$S = S_{MF} + (S - S_{MF}) = S_{MF} + S_{int}, \quad (1.9)$$

$$S_{MF} = \int_0^\beta d\tau \sum_{\mathbf{k}, \alpha} \bar{\psi}_{\mathbf{k}, \alpha} [\partial_\tau + \varepsilon_{\mathbf{k}}] \psi_{\mathbf{k}, \alpha} + \sum_{\mathbf{k}} (\bar{\psi}_{\mathbf{k}\uparrow} \bar{\psi}_{-\mathbf{k}\downarrow} \Delta_{\mathbf{k}} + \text{h.c.}), \quad (1.10)$$

$$S_{int} = \int_0^\beta d\tau \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \bar{\psi}_{\mathbf{k}\uparrow} \bar{\psi}_{-\mathbf{k}\downarrow} \psi_{-\mathbf{k}'\downarrow} \psi_{\mathbf{k}'\uparrow} - \sum_{\mathbf{k}} (\bar{\psi}_{\mathbf{k}\uparrow} \bar{\psi}_{-\mathbf{k}\downarrow} \Delta_{\mathbf{k}} + \text{h.c.}), \quad (1.11)$$

где мы фактически прибавили и вычли некоторое квадратичное “среднеполевое” действие с введёнными вариационными источником  $\Delta_{\mathbf{k}}$  и стоком  $\Delta_{\mathbf{k}}^*$  куперовских пар. Как будет показано ниже, данные вариационные параметры

определяются из условия экстремума свободной энергии. Вводя для удобства вектора

$$\psi_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \psi_{\mathbf{k}\uparrow} \\ \bar{\psi}_{-\mathbf{k}\downarrow} \end{pmatrix}, \quad \bar{\psi}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \bar{\psi}_{\mathbf{k}\uparrow} & -\psi_{-\mathbf{k}\downarrow} \end{pmatrix},$$

среднеполевое действие  $S_{MF}$  можно записать в виде

$$S_{MF} = \bar{\psi}_{\mathbf{k}}[-\hat{G}_{MF}^{-1}]\psi_{\mathbf{k}}, \quad \hat{G}_{MF}^{-1} = \begin{pmatrix} -\partial_{\tau} - \varepsilon_{\mathbf{k}} & -\Delta_{\mathbf{k}} \\ \Delta_{\mathbf{k}}^* & \partial_{\tau} - \varepsilon_{-\mathbf{k}} \end{pmatrix},$$

где  $\hat{G}_{MF}$  соответствует функции Грина для сверхпроводящей системы в приближении среднего поля. Поправка же  $S_{int} = S - S_{MF}$  является неким “эффективным” возмущением. Таким образом статистическую сумму можно представить в виде

$$Z = \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{-S_{MF}-S_{int}} = \frac{\int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{-S_{MF}} e^{-S_{int}}}{\int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{-S_{MF}}} \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{-S_{MF}}. \quad (1.12)$$

Поскольку действие  $S_{MF}$  квадратично, то мы можем сразу взять соответствующий интеграл (см. формулу (1.8))

$$Z = e^{-F\beta} = \langle e^{-S_{MF}} \rangle_{MF} e^{\text{Tr} \ln[-\hat{G}_{MF}^{-1}]}, \quad (1.13)$$

где обозначение  $\langle \dots \rangle_{MF}$  обозначает взятие среднего по действию  $S_{MF}$

$$\langle A \rangle_{MF} = \frac{\int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi A e^{-S_{MF}}}{\int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{-S_{MF}}}.$$

Выражение (1.13) является формально точным. Однако вычисление среднего от экспоненты представляет сложность. Здесь мы подходим ко второму важному шагу вариационной теории возмущений. Получим выражение для разложения среднего от экспоненты. Для этого удобно представить среднее в следующем виде:

$$\langle e^{-S_{int}} \rangle = \langle e^{-\lambda S_{int}} \rangle \Big|_{\lambda=1}, \quad \langle e^{-\lambda S_{int}} \rangle = e^{f(\lambda)},$$

где  $f(\lambda) = \ln \langle e^{-\lambda S_{int}} \rangle$ . Разложим функцию в ряд Тейлора вблизи нуля:

$$f(\lambda) = f(0) + \left. \frac{df}{d\lambda} \right|_{\lambda=0} \lambda + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2 f}{d\lambda^2} \right|_{\lambda=0} \lambda^2 + O(\lambda^3),$$



где соответствующие первая и вторая производные легко вычисляются

$$\frac{df}{d\lambda} = \langle -S_{int} \rangle_{MF}, \quad \frac{d^2f}{d\lambda^2} = \langle S_{int} S_{int} \rangle_{MF} - \langle S_{int} \rangle_{MF}^2 \quad (1.14)$$

и, соответственно

$$f(\lambda) = -\langle S_{int} \rangle \lambda + \frac{1}{2} \left( \langle S_{int}^2 \rangle - \langle S_{int} \rangle^2 \right) \lambda^2 + O(\lambda^3)$$

Таким образом, в первом приближении мы получаем следующее выражение

$$\langle e^{-S_{int}} \rangle \approx e^{-\langle S_{int} \rangle}. \quad (1.15)$$

Следующий порядок даёт

$$\langle e^{-S_{int}} \rangle \approx e^{-\langle S_{int} \rangle + \frac{1}{2}(\langle S_{int}^2 \rangle - \langle S_{int} \rangle^2)}. \quad (1.16)$$

Первый случай (1.15) соответствует приближению среднего поля, а второй (1.16) даёт интересующую нас флуктуационную поправку. Зная статистическую сумму системы, согласно (1.1) мы можем записать выражение для свободной энергии. Следовательно, в приближении среднего поля (MF) свободная энергия имеет вид

$$F_{MF} = \frac{1}{\beta} \text{Tr} \ln \left[ -\hat{G}_{MF}^{-1} \right] - \frac{1}{\beta} \langle S_{int} \rangle, \quad (1.17)$$

а с учётом флуктуационной поправки (FC)

$$F_{FC} = \frac{1}{\beta} \text{Tr} \ln \left[ -\hat{G}_{MF}^{-1} \right] - \frac{1}{\beta} \langle S_{int} \rangle + \frac{1}{2\beta} \left( \langle S_{int}^2 \rangle - \langle S_{int} \rangle^2 \right), \quad (1.18)$$

$$F_{FC} = F_{MF} + \delta F_{FC}. \quad (1.19)$$

Полученные выражения (1.17) и (1.18) являются приближёнными. Однако даже они являются сложными для вычисления. Сделаем упрощение: мы изучаем переход в сверхпроводящее состояние и производим вычисления вблизи критической температуры. Параметр порядка при этом будет являться малым, поэтому для получения линеаризованного уравнения самосогласования на вариационный параметр порядка достаточно разложить свободную энергию до второго

порядка по источникам. В самом общем виде можно записать

$$F = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \Delta_{\mathbf{k}_1}^* K(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \Delta_{\mathbf{k}_2} + O(|\Delta|^4), \quad (1.20)$$

где ядро  $K$  несёт в себе информацию о симметрии ПП и о величине критической температуры. Установим явный вид  $K(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$ . Первое слагаемое можно получить, разложив матричный логарифм в ряд Тейлора. Для этого выделим малое слагаемое, представив:

$$\hat{G}_{MF}^{-1} = \hat{G}_0^{-1} + \hat{\Delta} = \hat{G}_0^{-1}(\hat{1} + \hat{G}_0 \hat{\Delta}),$$

$$\hat{G}_0^{-1} = \begin{pmatrix} -\partial_\tau - \varepsilon_{\mathbf{k}} & 0 \\ 0 & \partial_\tau - \varepsilon_{-\mathbf{k}} \end{pmatrix}, \quad \hat{\Delta} = \begin{pmatrix} 0 & -\Delta_{\mathbf{k}} \\ \Delta_{\mathbf{k}}^* & 0 \end{pmatrix}.$$

Для дальнейших расчётов удобно перейти в частотное представление с помощью разложения в ряд Фурье по мацубаровским частотам:

$$\psi_{\mathbf{k},\alpha}(\tau) = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_{\omega} \psi_{\mathbf{k},\alpha}(\omega) e^{-i\omega\tau},$$

$$\hat{G}_0^{-1} = \begin{pmatrix} i\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} & 0 \\ 0 & -i\omega - \varepsilon_{-\mathbf{k}} \end{pmatrix}.$$

В случае ферми-систем  $\omega = \pi T(2n + 1)$ , где  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ . Тогда разлагая логарифм до второго порядка по  $\Delta$  и отбросив не зависящее от  $\Delta$  слагаемое получим:

$$\text{Tr} \ln (-\hat{G}_{MF}^{-1}) = \text{Tr} \ln \left[ -\hat{G}_0^{-1} \left( 1 + \hat{G}_0 \hat{\Delta} \right) \right] = \sum_{\mathbf{k}\omega} \frac{|\Delta_{\mathbf{k}}|^2}{\omega^2 + \varepsilon_{\mathbf{k}}^2} + O(\Delta^4). \quad (1.21)$$

Следующее слагаемое  $\langle S_{int} \rangle$  задаётся формулой (1.11):

$$\int_0^\beta d\tau \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle \bar{\psi}_{\mathbf{k}\uparrow} \bar{\psi}_{-\mathbf{k}\downarrow} \psi_{-\mathbf{k}'\downarrow} \psi_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle - \int_0^\beta d\tau \sum_{\mathbf{k}} (\langle \bar{\psi}_{\mathbf{k}\uparrow} \bar{\psi}_{-\mathbf{k}\downarrow} \rangle \Delta_{\mathbf{k}} + \langle \psi_{\mathbf{k}\uparrow} \psi_{-\mathbf{k}\downarrow} \rangle \Delta_{\mathbf{k}}^*)$$

Для расчёта первого слагаемого воспользуемся теоремой Вика[42], которое позволяет, в случае усреднения по квадратичному действию, представить средние от произведения следующим образом:

$$\langle ABCD \rangle = \langle AB \rangle \langle CD \rangle + \langle AD \rangle \langle BC \rangle - \langle AC \rangle \langle BD \rangle$$

Знак минус появляется из-за нечётного числа перестановок грассмановых переменных. Для большего числа слагаемых правило остаётся тем же, однако увеличивается количество слагаемых. Для произведения  $n$  функций среднее разбивается на  $n!!$  слагаемых. Среднее от произведения двух полей соответствуют нормальным и аномальным функциям Грина [43]:

$$-\langle \psi_{\mathbf{k}\alpha} \bar{\psi}_{\mathbf{k}'\alpha} \rangle = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \mathcal{G}_{\mathbf{k}\alpha},$$

$$\langle \psi_{\mathbf{k}\uparrow} \psi_{-\mathbf{k}'\downarrow} \rangle = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \mathcal{F}_{\mathbf{k}},$$

$$\langle \bar{\psi}_{-\mathbf{k}\downarrow}, \bar{\psi}_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \mathcal{F}_{\mathbf{k}}^\dagger.$$

Тогда среднее от выражения (1.11), учитывая отсутствие триплетных слагаемых, запишется в виде

$$\frac{1}{\beta} \langle S_{int} \rangle = \frac{1}{N\beta^2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\omega\omega'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \mathcal{F}_{\mathbf{k}}^\dagger(\omega) \mathcal{F}_{\mathbf{k}'}(\omega') + \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}\omega} \left( \mathcal{F}_{\mathbf{k}}^\dagger(\omega) \Delta_{\mathbf{k}} + \Delta_{\mathbf{k}}^* \mathcal{F}_{\mathbf{k}}(\omega) \right).$$

Вычисление флуктуационной поправки  $\delta F_{FC}$  в (1.18) является куда более сложной задачей из-за большого количества слагаемых при разложении по теореме вика. Однако в пределе, когда  $N \rightarrow \infty$ , отличными от нуля останутся лишь несколько диаграмм. Приведём здесь лишь окончательное выражение

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\beta} (\langle S_{int}^2 \rangle - \langle S_{int} \rangle^2) &= \frac{1}{N\beta^2} \sum_{1,2} \mathcal{F}_{\mathbf{k}_1}^\dagger(\omega_1) \Phi(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \mathcal{F}_{\mathbf{k}_2}(\omega_2) \\ &+ \frac{1}{N\beta^2} \sum_{1,2} V_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \mathcal{F}_{\mathbf{k}_1}^\dagger(\omega_1) \Delta_{\mathbf{k}_2} \mathcal{G}_{\mathbf{k}_2}(\omega_2) \mathcal{G}_{-\mathbf{k}_2}(-\omega_2) \\ &+ \frac{1}{N\beta^2} \sum_{1,2} V_{\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1} \mathcal{F}_{\mathbf{k}_1}(\omega_1) \Delta_{\mathbf{k}_2}^* \mathcal{G}_{\mathbf{k}_2}(\omega_2) \mathcal{G}_{-\mathbf{k}_2}(-\omega_2) \\ &+ \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}\omega} \mathcal{G}_{\mathbf{k}}(\omega) |\Delta_{\mathbf{k}}|^2 \mathcal{G}_{-\mathbf{k}}(-\omega), \end{aligned} \tag{1.22}$$

где функция  $\Phi$  имеет следующий вид

$$\Phi(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \frac{1}{N\beta} \sum_{\mathbf{k}\omega} V_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}} \mathcal{G}_{\mathbf{k}}(\omega) \mathcal{G}_{-\mathbf{k}}(-\omega) V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_2}.$$

Поскольку нам необходимо выделить лишь квадратичную по  $\Delta$  часть в свободной энергии, достаточно взять нормальные функции грин в нулевом порядке, а аномальные в первом порядке по  $\Delta$

$$\mathcal{G}_{\mathbf{k}\alpha}(\omega) = \frac{1}{i\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}}, \quad \mathcal{F}_{\mathbf{k}}(\omega) = \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{\omega^2 + \varepsilon_{\mathbf{k}}^2}, \quad \mathcal{F}_{\mathbf{k}}^\dagger(\omega) = \frac{\Delta_{\mathbf{k}}^*}{\omega^2 + \varepsilon_{\mathbf{k}}^2}.$$

При вычислении сумм по мацубаровским частотам мы используем известное соотношение

$$T \sum_{\omega} \frac{1}{\omega^2 + \varepsilon^2} = \frac{1}{2\varepsilon} \tanh \frac{\varepsilon}{2T}.$$

Собирая все слагаемые вместе мы можем записать выражение для свободной энергии

$$F_{MF(FC)} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \Delta_{\mathbf{k}_1}^* K_{MF(FC)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \Delta_{\mathbf{k}_2}, \quad (1.23)$$

где ядро для в приближении среднего поля имеет вид

$$K_{MF}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}_1}} \tanh \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}_1}}{2T} \left[ N \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} + \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}_2}} \tanh \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}_2}}{2T} \right], \quad (1.24)$$

а с учётом флуктуационных поправок

$$\begin{aligned} K_{FC}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) &= -(V_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} + \Phi(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)) \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}_1}} \tanh \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}_1}}{2T} \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}_2}} \tanh \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}_2}}{2T}, \\ \Phi(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}' \mathbf{k}_2} \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}'}} \tanh \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}'}}{2T}, \end{aligned} \quad (1.25)$$

что существенно отличается от ядра в случае приближения среднего поля. Как говорилось выше, параметр порядка  $\Delta_{\mathbf{k}}$  находится из условия экстремума свободной энергии

$$\frac{\delta F}{\delta \Delta_{\mathbf{k}}^*} = 0.$$

Таким образом мы приходим к уравнению самосогласования:

$$\sum_{\mathbf{k}_2} K(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \Delta_{\mathbf{k}_2} = 0. \quad (1.26)$$

Данное уравнение имеет нетривиальное решение лишь при условии  $\det K = 0$ , которое эквивалентно равенству нулю какого либо собственного значения матрицы. Как только получено выражение для ядра, проблема сводится к нахождению собственных значений и собственных векторов. В действительности нам

нужно знать только самое наименьшее собственное значение и величину  $T_c$ , когда оно меняет знак. Сверхпроводящий параметр порядка определяется как соответствующий собственный вектор в непосредственной близости от температуры перехода  $(T_c - T)/T_c \ll 1$ . Разложение по собственным значениям позволяет представить свободную энергию сверхпроводящей системы в виде :

$$F = \sum_i |C_i|^2 \lambda_i = |C_0|^2 \lambda_0.$$

Константы  $|C_i|^2$ , пропорциональные величине  $|\Delta_i|^2$ , оказываются неопределёнными, однако их значение не влияет на переход в сверхпроводящее состояние. Разложение свободной энергии по ПП до четвёртого порядка позволяет установить физический смысл собственного значения. Так, представив свободную энергию в виде:

$$F = |C_0|^2 \lambda_0 + \frac{\beta}{2} |C_0|^4,$$

где  $\beta$  в первом приближении не зависит от температуры. Проведя вариацию по ПП приходим к уравнению

$$-\frac{\lambda_0}{\beta} = |C_0|^2 \propto n_{SC}. \quad (1.27)$$

Это говорит о том, что величина собственного значения  $\lambda$  оказывается пропорциональной концентрации сверхпроводящих электронов.

## Глава 2

# Влияние флуктуаций на фазовые диаграммы сверхпроводников с нетривиальным куперовским спариванием

В данной главе, в рамках развитой теории, мы последовательно вычисляем критическую температуру сверхпроводящего перехода для различных видов спаривательного взаимодействия, а также рассчитываем угловую зависимость сверхпроводящего параметра порядка на контуре Ферми. На основе полученных результатов обсуждается недавние экспериментальные данные.

### 2.1. Введение

В дальнейших вычислениях мы будем использоваться двумерную модель сверхпроводника с квадратной кристаллической решёткой. Тогда все суммы по импульсам можно представить в виде:

$$\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow N \oint_F \frac{dl}{|\nabla \varepsilon_{\mathbf{k}}| (2\pi)^2} \int_{-\varepsilon_c}^{\varepsilon_c} d\varepsilon \approx \frac{N}{M} \sum_{i=0}^{M-1} \frac{k_F(i)}{v_F(i) 2\pi} \int_{-\varepsilon_c}^{\varepsilon_c} d\varepsilon, \quad (2.1)$$

где суммирование происходит по контуру Ферми,  $\varepsilon_c$  – энергия, на которой мы обрезаем интегрирование, а число разбиений мы полагаем  $M = 1000$  везде в дальнейших расчётах. При этом ядро  $K_{ij}$  будет представлять двумерную симметричную матрицу размером  $M \times M$ . Далее мы используем следующий закон дисперсии

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = -2t(\cos k_x + \cos k_y) - 4t' \cos k_x \cos k_y - \mu, \quad (2.2)$$

где  $t$  – интеграл перескока между ближайшими соседями, и  $t' < 0$  – интеграл перескока между вторыми соседями,  $\mu$  – химический потенциал. Везде далее мы полагаем  $t = 1$ . Так, для данного закона дисперсии (2.2) на рис. 2.1 приве-

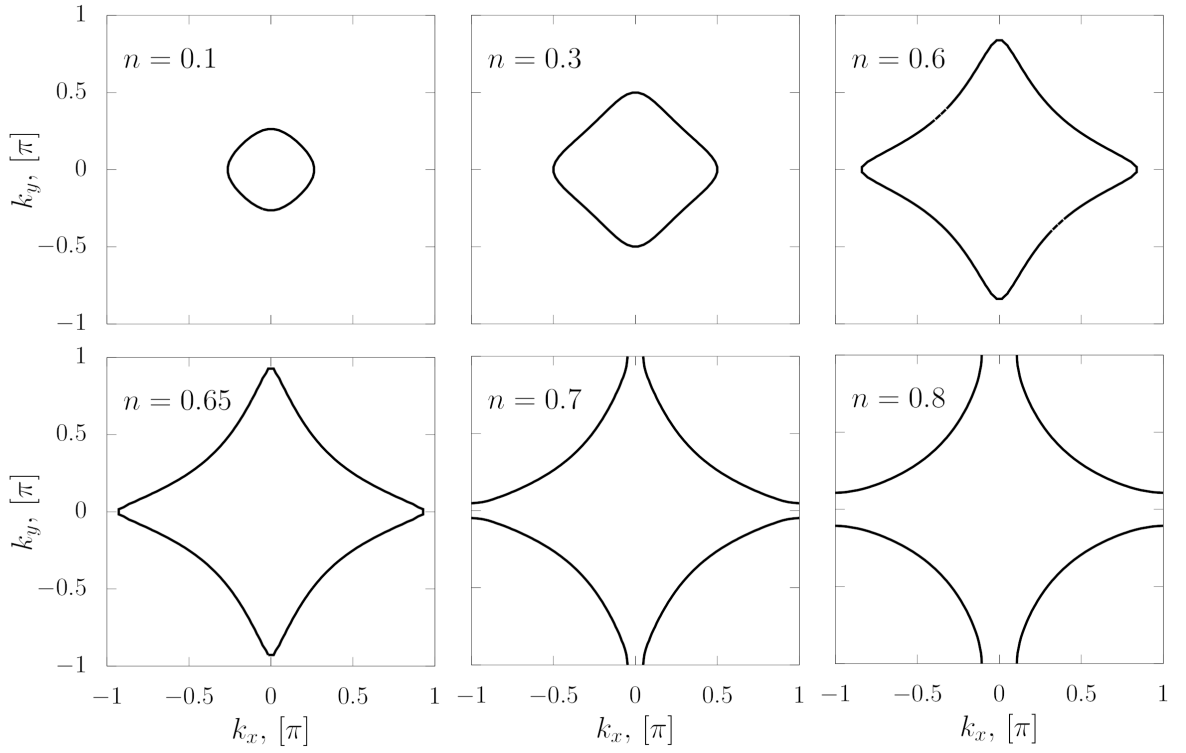


Рис. 2.1. Контур Ферми при различных электронных концентрациях  $n$ . Интеграл перескока между вторыми соседями  $t' = -0.35$ .

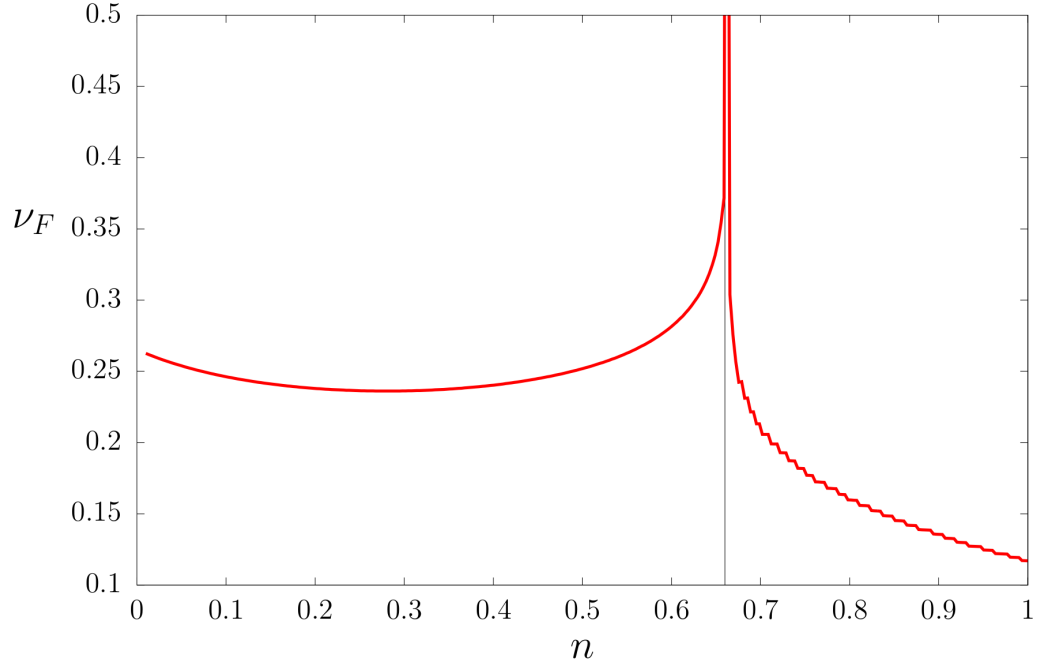


Рис. 2.2. Зависимость плотности состояний  $\nu_F$  от электронной концентрации  $n$ . Интеграл перескока между вторыми соседями  $t' = -0.35$ .

дён вид Ферми контура при различных электронных концентрациях  $n$  (число электронов на один узел решётки). Хорошо видно, что при значении  $n \approx 0.65$  Ферми контур начинает “рваться”, а плотность состояний  $\nu_F$  при данном  $n$  имеет резкий пик, так называемую сингулярность Ван Хофа (рис. 2.2).

Далее мы отдельно рассмотрим два вида спаривательного взаимодействия: Это суперобменный механизм и совместное действие суперобменного с косвенным взаимодействием типа Рудермана-Киттеля-Касуя-Иосиды (РККИ).

## 2.2. Суперобменное взаимодействие

Спаривательный потенциал обусловленный суперобменным механизмом имеет следующий простой вид

$$V_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} = -J(\cos(k_{1x} - k_{2x}) + \cos(k_{1y} - k_{2y})), \quad (2.3)$$

где  $J$  – константа суперобменного взаимодействия (далее мы полагаем  $J = 1$ ). Данный спаривательный механизм достаточно хорошо изучен [44] и, в случае приближения среднего поля, приводит к  $d$ - типу симметрии ПП вблизи половинного заполнения зоны. Для сравнения результатов полученных с использованием теории среднего поля и с учётом флуктуационных поправок мы вначале строим зависимость критической температуры  $T_c$  от электронной концентрации  $n$  для обоих подходов. Критическая температура определяется как точка, в которой обращается в нуль самое наименьшее собственное значение ядра  $\hat{K}$ , а параметр порядка при этом, с точностью до константы, равен соответствующему собственному вектору. На рис. 2.3 показаны результаты такого расчёта. Во-первых хорошо видно, что оба подхода дают один и тот же результат, т.е. флуктуационный вклад, *рассмотренный в данном приближении*, не приводит к перенормировке критической температуры. Во-вторых, в зависимости  $T_c(n)$  имеется хорошо выраженный пик при значении  $n \approx 0.65$ . Такой пик связан с тем, что при  $n \approx 0.65$  контур Ферми начинает “рваться”, плотность состояний



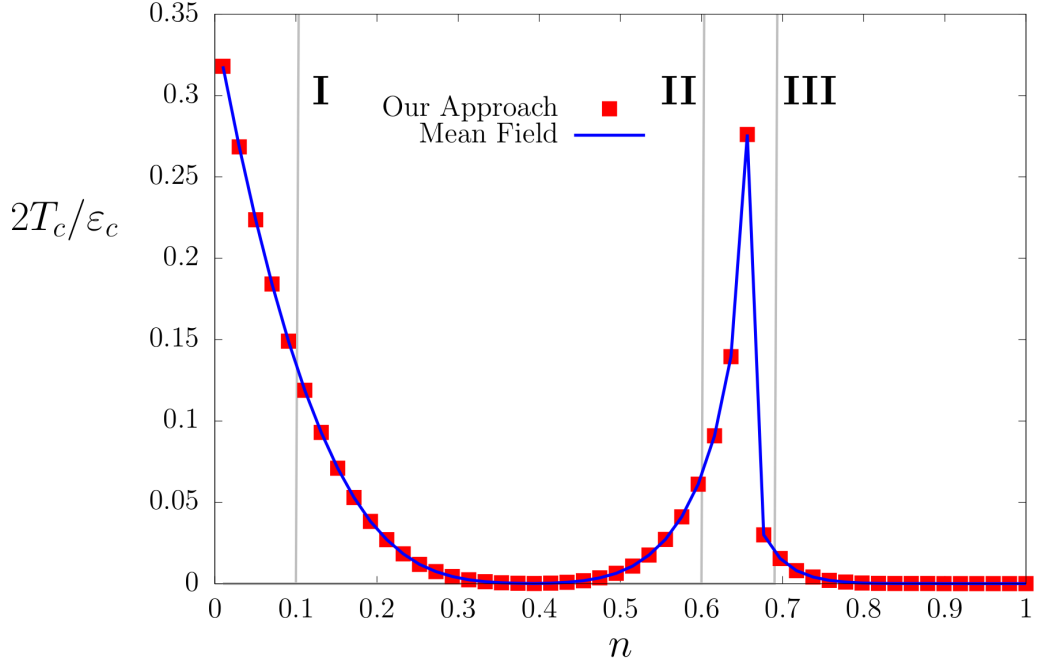


Рис. 2.3. Зависимость критической температуры для суперобменного спаривательного взаимодействия от концентрации электронов  $n$  в приближении среднего поля (синяя сплошная линия) и с учётом флуктуационных поправок (красные квадратики).

в этой точке имеет пик (возникает сингулярность Ван Хофа, см. рис. 2.2) и, как следствие, это приводит к увеличению  $T_c$ . При дальнейшем увеличении  $n$  плотность состояний быстро падает, что и приводит к резкому падению критической температуры. Здесь следует отметить, что в зависимости  $T_c(n)$  имеется небольшая область значений  $n$  в окрестности  $n = 0.4$ , где  $T_c$  падает до нуля. Наличие такой области интересно отражается на симметрии параметра порядка слева (срез I на рис. 2.3) и справа от неё (срезы II и III на рис. 2.3). Действительно, в области, где  $T_c$  ещё не обратилась первый раз в нуль, параметр порядка имеет s-тип симметрии: он нигде не меняет знак (см. рис. 2.4(I)), при этом заметны его осцилляции для обоих подходов, хотя они и дают различные амплитуды и находятся в противофазе. При этом период (расстояние между ближайшими пиками) в обоих случаях равен  $\pi/2$ . При больших значениях концентрации происходит смена симметрии параметра порядка с s-типа на d-тип (см. рис. 2.4(II),(III)). В этой области мы наблюдаем  $d_{x^2-y^2}$ -тип симметрии. Это хорошо согласуется с выводами работы [44], где было показано, что для случая

суперобменного взаимодействия ПП может иметь различный тип симметрии в зависимости от химического потенциала системы. Это говорит о качественном соответствии наших результатов. Во всех случаях хорошо видны количествен-

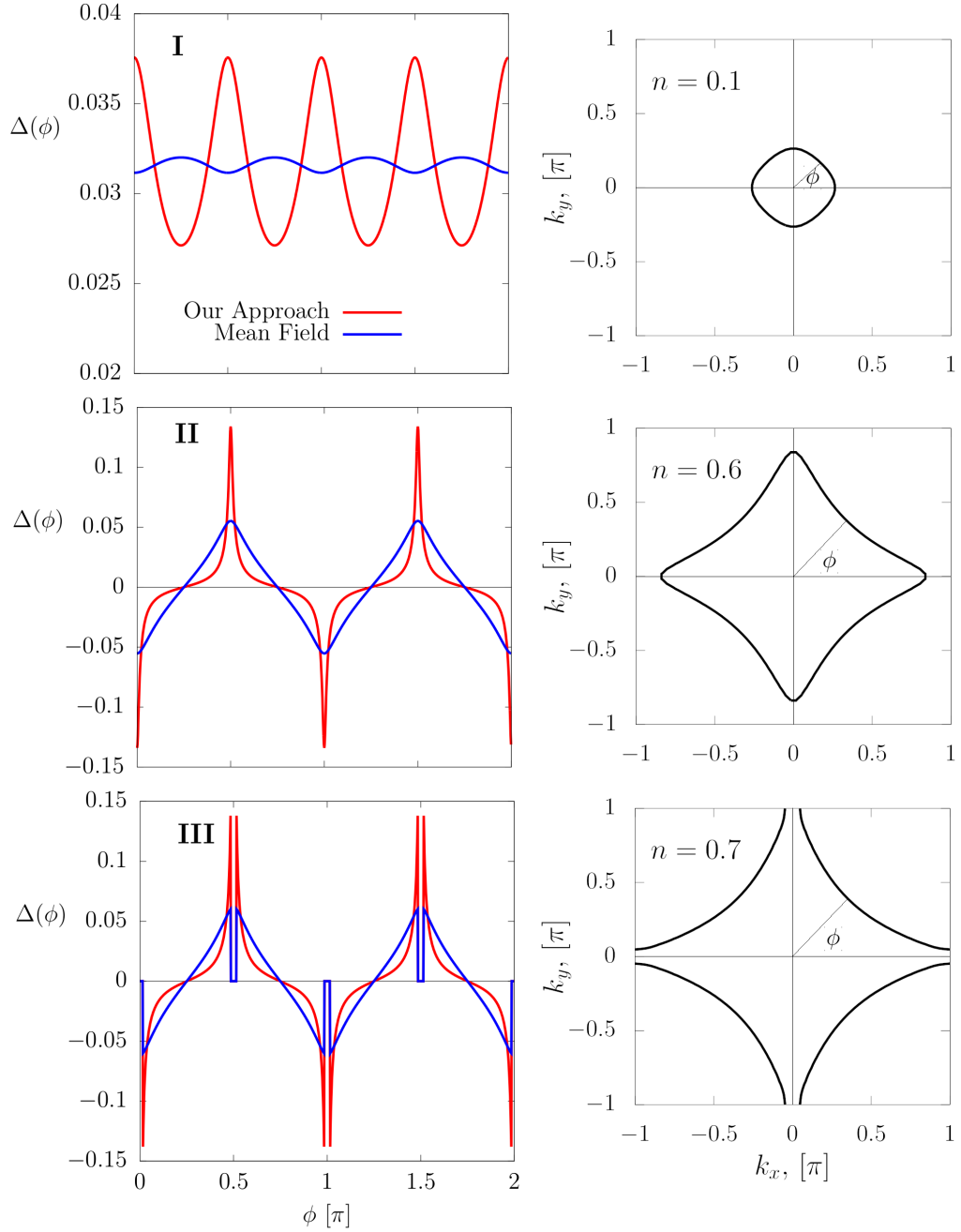


Рис. 2.4. Угловые зависимости параметра порядка для различных  $n$  рассчитанные по стандартной схеме среднего поля (сплошная синяя линия) и с учётом флуктуационных поправок (сплошная красная линия). В левой колонке приведены контуры Ферми при соответствующих концентрациях  $n$ , а угол  $\phi$  отсчитывается от центра зоны Бриллюэна, т.е. в точке  $(0,0)$ .

ные отличия в поведении  $\Delta(\phi)$  при двух обсуждаемых подходах. В случае учёта

флуктуационных поправок параметр порядка имеет ярко выраженные пики в точках  $0, \pi/2, \pi$  и  $3\pi/2$  и более подавленное поведение между ними, чем в случае среднего поля.

Таким образом учёт флуктуационных поправок приводит к появлению высших гармоник в зависимости параметра порядка от волнового вектора на поверхности Ферми.

### 2.3. Конкуренция суперобменного и косвенного, типа РККИ, взаимодействий

Рассмотренный ранее суперобменный потенциал можно назвать простым для решения уравнения БКШ на параметр порядка в приближении среднего поля. Действительно, в случае приближения среднего поля линеаризованное уравнение на ПП становится сепарабельным и явный вид ПП можно представить в виде  $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta_x \cos k_x + \Delta_y \cos k_y$ . Более интересным является решение в случае более сложного потенциала, когда одновременно конкурируют между собой как суперобменный механизм, так и косвенное РККИ взаимодействие. В этом случае спаривательный потенциал имеет вид

$$V_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} = -2J(\cos(k_{1x} - k_{2x}) + \cos(k_{1y} - k_{2y})) + \frac{1.5J}{2 + \Delta_{sp} + \cos(k_{1x} - k_{2x}) + \cos(k_{1y} - k_{2y})}, \quad (2.4)$$

где  $J$  – константа обменного взаимодействия, а  $\Delta_{sp}$  – параметр спиновой щели (в дальнейшем мы полагаем  $J = 0.5, \Delta_{sp} = 0.1$ ) [44]. Второе слагаемое в правой части (2.4) соответствует косвенному взаимодействию носителей тока через спиновую восприимчивость. Оно получено в духе работ [45, 46] из общей формулы для динамической спиновой восприимчивости [47] в пределе  $\omega \rightarrow 0$ .

Как и ранее, вначале построим зависимость критической температуры  $T_c$  от электронной концентрации  $n$  в приближении среднего поля. Результаты численных расчётов приведены на рис. 2.5. Хорошо видно, что качественное поведение

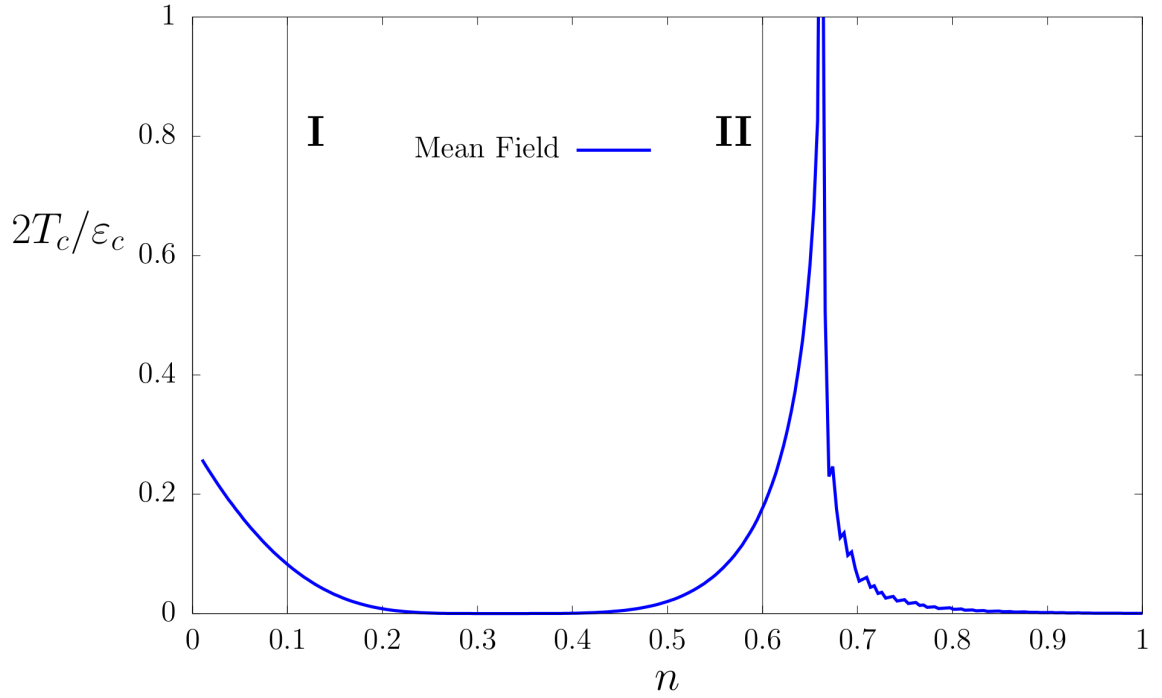


Рис. 2.5. Зависимость критической температуры от концентрации электронов в приближении среднего поля в случае совместного суперобменного и косвенного, типа РККИ, взаимодействия,  $J = 1/2$ ,  $\Delta_{sp} = 0.1$ ,  $t' = -0.35$

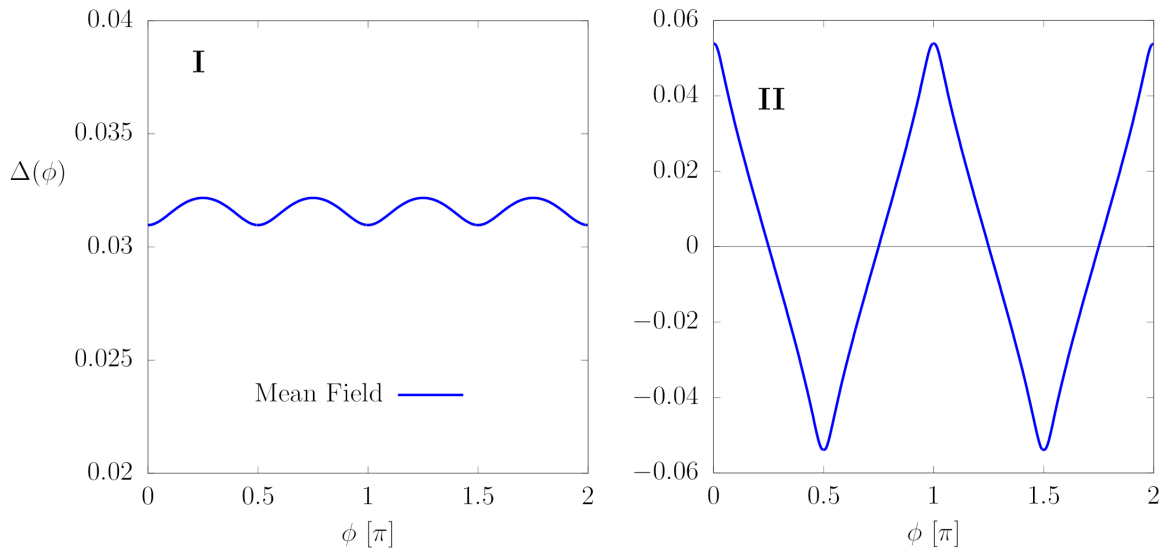


Рис. 2.6. Угловая зависимость сверхпроводящего ПП в приближении среднего поля в случае совместного суперобменного и косвенного, типа РККИ, взаимодействия, при  $n = 0.1$  (срез I) и при  $n = 0.6$  (срез II). Остальные параметры те же, что и на рис. 2.5.

функции  $T_c(n)$  совпадает со случаем описанным ранее для суперобменного взаимодействия. Здесь мы также наблюдаем характерный пик, обусловленный син-

гулярностью Ван Хофа при  $n \approx 0.65$  и последующее резкое понижение критической температуры. При этом имеется область  $n \in [0.25, 0.44]$ , где сверхпроводимость оказывается полностью подавлена. Аналогично случаю, рассмотренному ранее, симметрия ПП скачком изменяется при переходе через эту область. Если при малой концентрации  $n < 0.2$  параметр порядка имел  $s$ -тип симметрии, то в области значений  $n > 0.45$  он приобретает  $d$ -тип симметрии, что хорошо видно из рис. 2.6.

В случае теории, учитывающей флуктуационные поправки, при данном “испорченном” потенциале сверхпроводящего спаривания, температурная зависимость собственных значений ядра  $\hat{K}$  наблюдает качественные отличия от подхода, предсказываемой теорией среднего поля. Так, если в приближении среднего поля, наименьшее собственное значение  $\lambda$  ядра  $K$  меняло свой знак при достижении критической температуры  $T_c$ , то в температурной зависимости  $\lambda(T)$  вычисленной в рамках предложенной нами теории, имеется интересная особенность. Оказывается, что влияние флуктуаций, с одной стороны, “размывает” фазовый переход, а с другой стороны, температурная зависимость собственного значения, которое отвечает правильной симметрии, ведёт себя (в непосредственной окрестности  $T_c$ ) как

$$\lambda(T) = \begin{cases} T - T_c - \delta T & \text{при } T < T_c, \\ -\delta T e^{-\alpha(T-T_c)} & \text{при } T > T_c, \end{cases} \quad (2.5)$$

где степень  $\alpha$  характеризует степень размытия сверхпроводящего перехода. Для наглядности изобразим температурную зависимость наименьшего собственного значения ядра  $\hat{K}$  для концентраций  $n = 0.1$  и соответствующие ему собственные вектора при  $T < T_c$  и  $T > T_c$  (рис.2.7). Помимо размытия сверхпроводящего перехода наблюдается ещё одна особенность. При переходе через  $T_c$  скачком происходит смена симметрии ПП. И этот эффект проявляет универсальный характер. Так, для малого допирования, при  $n = 0.1$  мы наблюдаем смену симметрии при переходе через точку  $T_c$  с  $s$ -типа на  $d$ -тип симметрии. Для концентрации

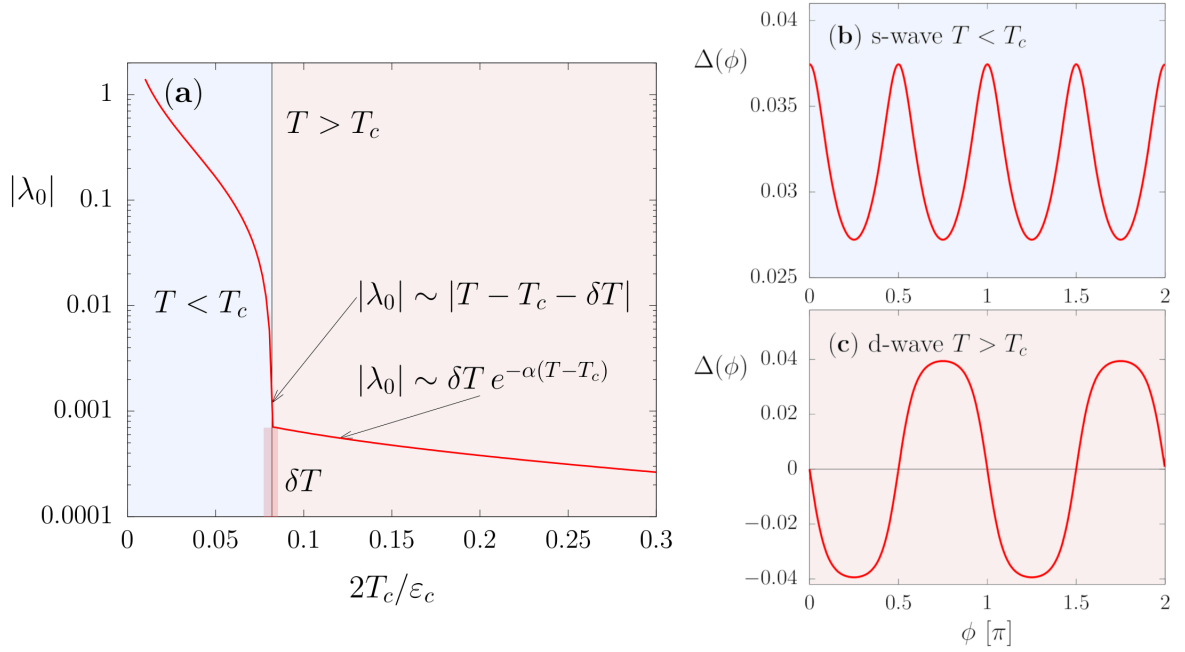


Рис. 2.7. Температурная зависимость наименьшего собственного значения ядра  $\hat{K}$  для концентраций  $n = 0.1$  (а); соответствующие собственные вектора при  $T < T_c$  (b)  $T > T_c$  (c)

$n = 0.6$  происходит смена симметрии с  $d_{x^2-y^2}$ - на  $d_{xy}$ -тип (рис. 2.8). Однако здесь собственным значением будет  $\lambda_1$ , поскольку ему отвечает собственный вектор с типом симметрии, совпадающим с результатом среднего поля, поскольку в пределе они должны совпадать.

Таким образом учёт флуктуационных поправок приводит к размытию сверхпроводящего перехода, сопровождающегося резкой сменой симметрии параметра порядка.

## 2.4. Обсуждение результатов

Учёт флуктуационных поправок при описании сверхпроводящих систем приводит к появлению эффектов, остающихся за рамками теории среднего поля. Однако отклонения от МФ наблюдаются и на экспериментах. Яркий пример, работа И. Хетеля [30] 2007 года, где проводилось исследование температурной зависимости концентрации сверхпроводящих электронов в ультратонких купратах  $Y_{1-x}Ca_xBa_2Cu_3O_7$ . Экспериментально получено, что сверхпроводящий пе-

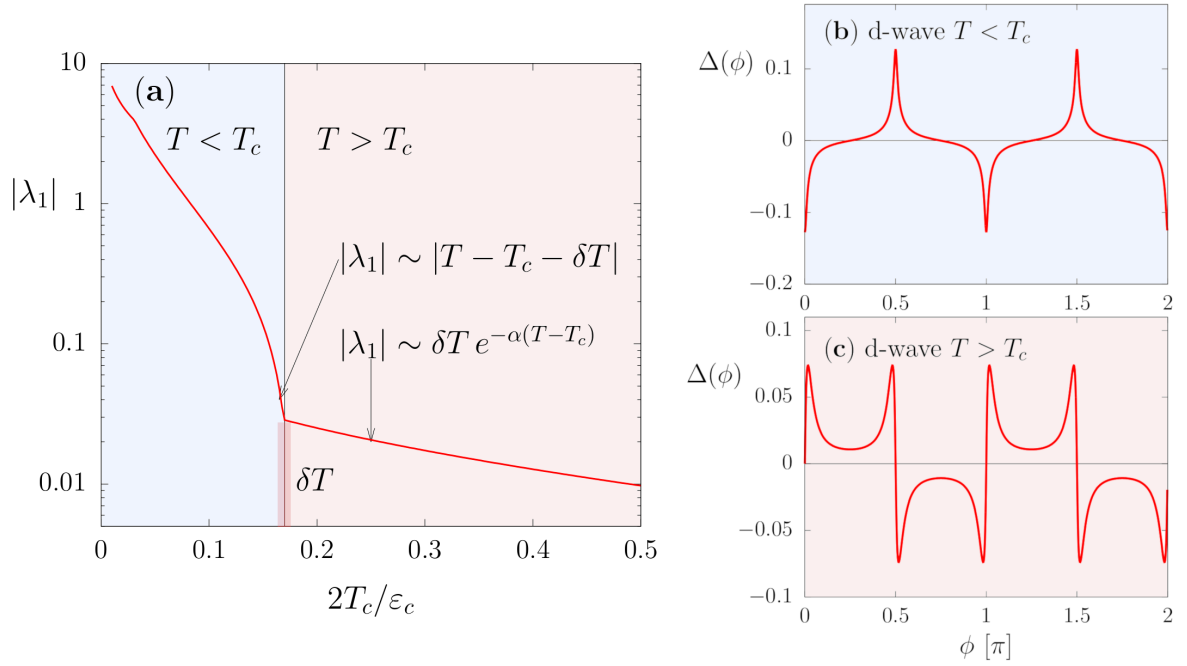


Рис. 2.8. (а) Температурная зависимость собственного значения  $\lambda_1$  ядра  $\hat{K}$  для концентраций  $n = 0.6$ ; соответствующие собственные вектора при (b)  $T < T_c$  и (c)  $T > T_c$

переход в таких системах оказывается размытым. Анализ данных из этой работы (рис. 3) показывает, что при переходе через  $T_c$  концентрация сверхпроводящих электронов меняет степенной вид зависимости на экспоненциальный (рис. 2.9).

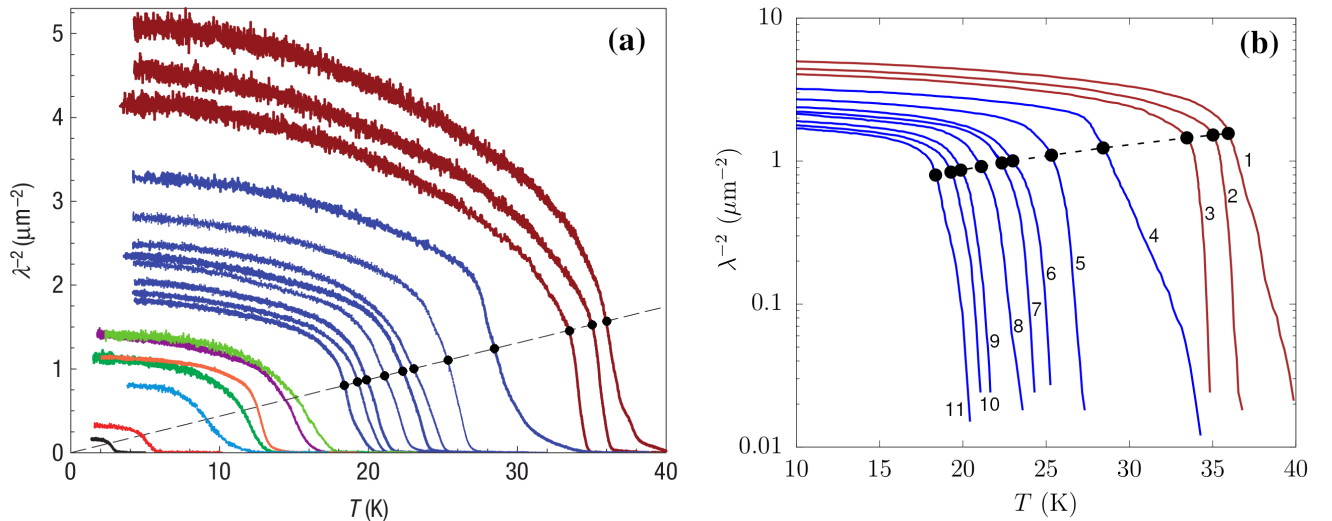


Рис. 2.9. (а) Экспериментальные результаты по измерению концентрации сверхпроводящих электронов в ультратонких купратах из работы [30]; (b) результаты в логарифмическом по оси ординат масштабе.

Ранее нами была получена температурная зависимость собственного значения вблизи  $T_c$  в случае одновременной конкуренции между суперобменного механизма и косвенное РККИ взаимодействия. В ней также наблюдался переход от степенной зависимости к экспоненциальной (рис. 2.8). Вместе с тем, в предыдущей главе нами было установлено, что собственное значение ядра разложения оказывается пропорциональным концентрации сверхпроводящих электронов (ур. 1.27). Таким образом предсказанное нашей моделью экспоненциальная зависимость концентрации от температуры находит экспериментальное подтверждение.



## Заключение

Основной идеей данной работы был поиск эффектов, остающихся за рамками приближения среднего поля в двумерных системах. Для этого методами функциональных интегралов были получены уравнения самосогласования для обоих подходов. Для анализа рассматривались различные встречающиеся в литературе потенциалы куперовского спаривания. Данные работы позволяют сделать вывод о том, что флуктуации играют существенную роль в описании сверхпроводящих систем. В частности приводят к появлению высших гармоник в зависимости параметра порядка от волнового вектора на поверхности Ферми. Вместе с тем для сложных потенциалов взаимодействия флуктуационные поправки приводят к появлению размытия сверхпроводящего перехода. Это не находит объяснения в рамках приближения среднего поля, однако коррелирует результатами экспериментов.

## Список литературы

1. Kamerlingh Onnes, H. The Resistance of Pure Mercury at Helium Temperatures. [Text] / H. Kamerlingh Onnes // Commun. Phys. Lab. Univ. Leiden. — 1911. — Vol. 12. — P. 1.
2. Meissner, W. Ein neuer Effekt bei Eintritt der Supraleitfähigkeit [Text] / W. Meissner, R. Ochsenfeld // Naturwiss. — 1933. — Vol. 21. — P. 787.
3. London, F. The Electromagnetic Equations of the Superconductor [Text] / F. London, H. London // Proceedings of the Royal Society of London. Series A - Mathematical and Physical Sciences. — 1935. — Vol. 149, no. 866. — P. 71–88.
4. Гинзбург, В. Л. Феноменологическая теория сверхпроводимости [Текст] / В. Л. Гинзбург, Л. Д. Ландау // ЖЭТФ. — 1950. — Т. 20. — С. 1064.
5. Ландау, Л. Д. Теоретическая физика : учеб. пособие для ун-тов в 10 т. Т. 5: Статистическая физика. Ч. 1. [Текст] / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. — [Б. м.] : М. : Наука ; Физматлит, 1955. — С. 608.
6. Maxwell, E. Isotope Effect in the Superconductivity of Mercury [Text] / E. Maxwell // Phys. Rev. — 1950. — Vol. 78. — P. 477–477.
7. Fröhlich, H. Theory of the Superconducting State. I. The Ground State at the Absolute Zero of Temperature [Text] / H. Fröhlich // Phys. Rev. — 1950. — Vol. 79. — P. 845–856.
8. Bardeen, J. Theory of Superconductivity [Text] / J. Bardeen, L. N. Cooper, J. R. Schrieffer // Phys. Rev. — 1957. — Vol. 108. — P. 1175–1204.
9. Ginzburg, V.L. On surface superconductivity [Text] / V.L. Ginzburg // Phys. Letters. — 1964. — Vol. 13.
10. Little, W. A. Possibility of Synthesizing an Organic Superconductor [Text] / W. A. Little // Phys. Rev. — 1964. — Vol. 134. — P. A1416–A1424.
11. Conventional superconductivity at 203 K at high pressures in the sulfur hydride system [Text] / A. P. Drozdov, M. I. Erements, I. A. Troyan, et al //

- Nature. — 2015. — Vol. 525. — P. 73.
12. Superconductivity at 250 K in lanthanum hydride under high pressures [Text] / A. Drozdov, P. Kong, V. Minkov [et al.] // Nature. — 2019. — Vol. 569. — P. 528–531.
  13. Bednorz, J. G. Possible high  $T_c$  superconductivity in the Ba – La – Cu – O system [Text] / J. G. Bednorz, K. A. Muller // Phys. B - Condensed Matter. — 1986. — Vol. 64. — P. 189.
  14. Wu, M. K. Superconductivity at 93 K in a new mixed-phase YbBaCuO compound system at ambient pressure [Text] / M. K. Wu, et al // Jpn. J. Appl. Phys. — 1987. — P. 908.
  15. A New High- $T_c$  Oxide Superconductor without a Rare Earth Element [Text] / H. Maeda, Y. Tanaka, M. Fukutomi, T. Asano // Jpn. J. Appl. Phys. — 1988. — Vol. 27. — P. 209.
  16. Sheng, Z. Z. Bulk superconductivity at 120 K in the Tl–Ca/Ba–Cu–O system [Text] / Z. Z. Sheng, A. M. Hermann // Rev. Mod. Phys. — 1988. — Vol. 332. — P. 138.
  17. Dai, P. Superconductivity and its Applications [Text] / P. Dai, et al // Physica C. — 1995. — Vol. 243, no. 3-4. — P. 201–206.
  18. Scalapino, D. J. A common thread: The pairing interaction for unconventional superconductors [Text] / D. J. Scalapino // Rev. Mod. Phys. — 2012. — Vol. 84. — P. 1383–1417.
  19. Anderson, P. W. The Theory of Superconductivity in High- $T_c$  Cuprates [Text] / P. W. Anderson. — [S. l.] : Princeton : Princeton University Press, 1997. — P. 454.
  20. Plakida, N. M. Spin fluctuations and high-temperature superconductivity in cuprates [Text] / N. M. Plakida // Physica C. — 2016. — Vol. 531. — P. 39.
  21. Максимов, Е. Г. О возможных механизмах высокотемпературной сверхпроводимости [Текст] / Е. Г. Максимов, О. В. Долгов // УФН. — 2007. — Т. 177, № 9. — С. 983–988.

22. Ishihara, S. Interplay of electron-phonon interaction and electron correlation in high-temperature superconductivity [Text] / S. Ishihara, N. Nagaosa // Physical Review B. — 2004. — Vol. 69, no. 14. — P. 144520.
23. Овчинников, С. Г. Эффективный гамильтониан для ВТСП-купратов с учетом электрон-фононного взаимодействия в режиме сильных корреляций [Текст] / С. Г. Овчинников, Е. И. Шнейдер // ЖЭТФ. — 2005. — Т. 128. — С. 974.
24. Eremin, M. V. On the superconducting gap dispersion in hole-doped cuprates [Text] / M. V. Eremin, M. A. Malakhov // JETP Letters. — 2017. — Vol. 107. — P. 710.
25. Eremin, M. V. On the dependence of the superconducting gap on the wave vector in  $\text{Pr}_{0.89}\text{LaCe}_{0.11}\text{CuO}_4$  [Text] / M. V. Eremin, D. S. Kochergin, M. A. Malakhov // JETP Letters. — 2018. — Vol. 108. — P. 796–800.
26. Ландау, Л. Д. Теория ферми-жидкости [Текст] / Л. Д. Ландау // ЖЭТФ. — 1956. — Т. 30. — С. 1058–1064.
27. Anderson, O. K. Electrons, phonons, and their interaction in  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  [Text] / O. K. Anderson, et.al // Physica C. — 1991. — Vol. 185-189. — P. 147–155.
28. Lee, P. A. Doping a Mott insulator: Physics of high-temperature superconductivity [Text] / P. A. Lee, N. Nagaosa, X. Wen // Reviews of modern physics. — 2006. — Vol. 78, no. 1. — P. 17.
29. Plakida, N. High-Temperature Cuprate Superconductors: Experiment, Theory, and Applications [Text] / N. Plakida. — [S. l.] : Springer Science & Business Media, 2010. — Vol. 166.
30. Hetel, I. Quantum critical behaviour in the superfluid density of strongly underdoped ultrathin copper oxide films [Text] / I. Hetel, T. R. Lemberger, M. Randeria // Nature. — 2007. — Vol. 3. — P. 700–702.
31. Diamagnetism and Cooper pairing above  $T_c$  in cuprates [Text] / L. Li, Y. Wang, S. Komiyama [et al.] // Phys. Rev. B. — 2010. — Vol. 81, no. 5. —

- P. 054510.
32. Entropy of Vortex Cores Near the Superconductor-Insulator Transition in an Underdoped Cuprate [Text] / C. Capan, K. Behnia, J. Hinderer [et al.] // Phys. Rev. Lett. — 2002. — Vol. 88. — P. 056601.
  33. Nernst Effect and Disorder in the Normal State of High- $T_c$  Cuprates [Text] / F. Rullier-Albenque, R. Tourbot, H. Alloul [et al.] // Phys. Rev. Lett. — 2006. — Vol. 96. — P. 067002.
  34. Total Suppression of Superconductivity by High Magnetic Fields in  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.6}$  [Text] / F. Rullier-Albenque, H. Alloul, C. Proust [et al.] // Phys. Rev. Lett. — 2007. — Vol. 99. — P. 027003.
  35. Length scale for the superconducting Nernst signal above  $T_c$  in  $\text{Nb}_{0.15}\text{Si}_{0.85}$  [Text] / A. Pouret, H. Aubin, J. Lesueur [et al.] // Physical Review B. — 2007. — Vol. 76.
  36. Садовский, М. В. Псевдощель в высокотемпературных сверхпроводниках [Текст] / М. В. Садовский // УФН. — 2001. — Т. 171, № 5. — С. 539–564.
  37. Timusk, T. The pseudogap in high-temperature superconductors: an experimental survey [Text] / T. Timusk, B. Statt // Reports on Progress in Physics. — 1999. — Vol. 62, no. 1. — P. 61.
  38. Ландау, Л. Д. Теоретическая физика: учеб. пособие для ун-тов в 10 т. Т. 8: Электродинамика сплошных сред [Текст] / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. — [Б. м.] : М. : Наука ; Физматлит, 1982. — С. 620.
  39. Feynman, R. P. Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics [Text] / R. P. Feynman // Rev.Mod.Phys. — 1948. — Vol. 20. — P. 367.
  40. Изюмов, Ю. А. Электронная структура соединений с сильными корреляциями [Текст] / Ю. А. Изюмов, В. И. Анисимов. — [Б. м.] : М.– Ижевск: Ижевский институт компьютерных исследований, 2008. — С. 376.
  41. Березин, Ф.А. Метод вторичного квантования [Текст] / Ф.А. Березин. — [Б. м.] : М.: Наука, 1986. — С. 318.
  42. Зи, Э. Квантовая теория поля в двух словах [Текст] / Э. Зи. — [Б. м.] : М.

- Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2009. — С. 632.
43. Лифшиц, Е. М. Теоретическая физика: учеб. пособие для ун-тов в 10 т. Т. 9: Статистическая физика. Ч. 2. [Текст] / Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский. — [Б. м.] : М. : Наука ; Физматлит, 1951. — С. 480.
44. Ерёмин, М. В. Феноменологическая теория сверхпроводимости [Текст] / М. В. Ерёмин, И.А. Ларионов // ЖЭТФ. — 1995. — Т. 62. — С. 192–196.
45. Pao, C. Anisotropic superconductivity in the 2D Hubbard model: Gap function and interaction weight [Text] / C. Pao, N. E. Bickers // Physical review letters. — 1994. — Vol. 72, no. 12. — P. 1870.
46. Millis, A. J. Phenomenological model of nuclear relaxation in the normal state of  $YBa_2Cu_3O_7$  [Text] / A. J. Millis, H. Monien, D. Pines // Physical Review B. — 1990. — Vol. 42, no. 1. — P. 167.
47. Ерёмин, М. В. Динамическая спиновая восприимчивость дырочных ВТСП в модели синглетно-коррелированной зоны проводимости [Текст] / М. В. Ерёмин, А. А. Алеев, И. М. Ерёмин // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 2008. — Т. 133, № 4. — С. 862–875.