Физика низких температур, 1996, т. 22, № 7, с. 835–836

Антиферромагнитные спиновые флуктуации в купратных сверхпроводниках

С. П. Кручинин

Институт теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова НАН Украины, Украина, 252143, г. Киев, ул. Метрологическая, 14,б
E-mail:kruchitp@gluk.apc.org

Статья поступила в редакцию 21 марта 1994 г., после переработки 10 апреля 1996 г.

Рассмотрен механизм спаривания, основанный на антиферромагнитных спиновых флуктуациях в высокотемпературных сверхпроводниках. Получены уравнения для сверхпроводящей щели и термодинамического потенциала вблизи T_c. Приведены оценки параметра $\Delta C/(\gamma T_c)$ для соединения $La_{1,85}Sr_{0,15}CuO_4$.

Розглянуто механізм спарювання, який базується на антіферомагнітних спінових флуктуаціях у високотемпературних надпровідниках. Отримано рівняння для надпровідної щілини і термодинамічного потенціалу біля T_c. Наведено оцінки параметра $\Delta C/(\gamma T_c)$ для сполуки $La_{1,85}Sr_{0,15}CuO_4$.

Основной вопрос теории сверхпроводимости — механизм, обеспечивающий спаривание электронов. В БКШ-теории это — электрон-фононное взаимодействие. В некоторых последних теоретических моделях постулируется механизм антиферромагнитных спиновых флуктуаций [1–3], электронное рассеяние на них может быть причиной спаривания электронов [4]. Спиновые флуктуации играют важную роль в сверхпроводниках с тяжелыми фермионами [5]. В работах [2,6] проведены расчеты сверхпроводящей щели, критической температуры, температурной зависимости сопротивления и многих других величин, но не рассмотрена термодинамика. Интересно рассчитать скачок теплоемкости вблизи T_c и параметр $R = \Delta C/(\gamma T_c)$, который в теории БКШ равен 1,42.

Введем гамильтониан, учитывающий антиферромагнитные спиновые флуктуации, следуя работе Пайнса [1]:

$$H = H_0 + H_{\text{int}} , \qquad (1)$$

где H_0 — гамильтониан свободных электронов. Взаимодействие описывается гамильтонианом

$$H_{\text{int}} = \frac{I}{\Omega} \sum_{q} g(\mathbf{q}) s(\mathbf{q}) S(-\mathbf{q}) , \qquad (2)$$

где Ω — объем ячейки; $g(\mathbf{q})$ — константа взаимодействия;

$$s(\mathbf{q}) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta,\mathbf{k}} \Psi^{+}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\alpha} \sigma_{\alpha\beta} \Psi_{\mathbf{k},\beta} \qquad (3)$$

— оператор спиновой плотности; $\sigma_{\alpha,\beta}$ — матрица Паули; $\Psi^{+}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\alpha}$ — оператор рождения электрона с импульсом $\mathbf{k} + \mathbf{q}$ и проекцией спина α; $\Psi_{\mathbf{k},\beta}$ — оператор рождения дырки с импульсом $\mathbf{k}$ и проекцией спина β; $S(-\mathbf{q})$ — оператор спиновых флуктуаций, который задается коррелятором $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ [2].

Отметим, что эксперименты по ЯМР указывают на то, что спаренные состояния имеют симметрию $d_{x^2-y^2}$.

Необходимо рассчитать большую статистическую сумму

$$e^{-\beta\Omega(\mu,\beta,g)} \equiv \text{Tr}\, e^{-\beta(H-\mu N)} , \qquad (4)$$

где μ — химический потенциал; g — константа связи; $\beta = 1/kT$; $\Omega(\mu, \beta, g)$ — термодинамический потенциал. Удобно применить формализм континуального интегрирования для системы ферми-частиц. Статистическую сумму можно записать в виде континуального интеграла [7]:

© С. П. Кручинин, 1996

$$e^{-\beta\Omega} = N^* \int \prod_n dS(n)\, d\Psi_\alpha^+(n,\tau)\, d\Psi_\alpha(n,\tau)\, \exp\left[-\int_0^B d\tau\, L(\tau)\right], \qquad (5)$$

где N^* — нормировочный множитель; $S(n)$ — оператор спиновых флуктуаций в решеточном представлении; n — номер узла решетки; $\Psi_\alpha^+(n, t)$ — оператор рождения электрона на n-м узле; $\Psi_\alpha(n, t)$ — оператор рождения дырки на n-м узле; L — Лагранжиан системы, который приводится в [9]. Используя метод билокального оператора [8] для расчета большой статсуммы, в пределе слабой связи (нижайший порядок по g^2) удалось получить уравнение для щели и уравнение для термодинамического потенциала вблизи T_c. Детальные расчеты представлены в [9], окончательный вид уравнения для щели следующий:

$$\Delta(\mathbf{k}) = \frac{g^2}{2}\int \frac{d^2p}{(2\pi)^2}\left\{\mathrm{Re}\,\chi(\mathbf{k}-\mathbf{p}, \varepsilon(\mathbf{p})-\mu)\,\frac{\mathrm{th}\,[\varepsilon(\mathbf{p})-\mu]\beta/2}{\varepsilon(\mathbf{p})-\mu} + \right.$$

$$\left. + 2\int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi}\,\mathrm{ctg}\left(\frac{\beta\omega}{2}\right)\mathrm{Im}\,\chi(\mathbf{k}-\mathbf{p}, \omega)\,\frac{[\varepsilon(\mathbf{p})-\mu]^2 - \omega^2 + \sigma^2}{[(\varepsilon(\mathbf{p})-\mu)^2 + \omega^2 + \sigma^2] + 4\sigma^2\omega^2}\right\}\Delta(\mathbf{p}), \qquad (6)$$

где $\varepsilon(\mathbf{p})$ описывает спектр электронов; σ — время жизни спиновых флуктуаций [2].

Из уравнения (6) легко получить уравнение для щели, которое рассматривается в [2]. Приведем формулу для скачка термодинамического потенциала вблизи T_c:

$$\Omega(\Delta) - \Omega(0) = \frac{V}{8}\int \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2}\,\frac{\Delta^4(\mathbf{k})}{[\varepsilon(k)-\mu]^2}\left\{\frac{\beta}{2}\left[1 - \mathrm{th}^2\,\frac{\beta(\varepsilon(k)-\mu)}{2}\right] - \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{k})-\mu}\,\mathrm{th}\,\frac{\beta[\varepsilon(\mathbf{k})-\mu]}{2}\right\}, \qquad (7)$$

где $\Omega(\Delta)$ и $\Omega(0)$ — термодинамические потенциалы при $T < T_c$ и $T > T_c$ соответственно; V — двумерный объем (площадь купратной плоскости). Несмотря на наличие факторов $[\varepsilon(k) - \mu]$ в знаменателе функции (7), легко проверить, что сингулярности на поверхности Ферми отсутствуют. Формула (7) при $T \simeq T_c$ может служить основной для вычисления различных термодинамических величин. Скачок теплоемкости определялся по формуле

$$\Delta C = -T\frac{\partial^2 \Delta\Omega}{\partial T^2}, \qquad (8)$$

где $\Delta\Omega = \Omega(\Delta) - \Omega(0)$.

Количественно оценен параметр R. Необходимые данные для определения коррелятора спиновых флуктуаций взяты из [2]. Для соединений $La_{1,85}Sr_{0,15}CuO_4$ параметр R составил 1,8. Из результатов расчета видно, что этот параметр значительно больше, чем дает теория БКШ. Полученный скачок теплоемкости ближе к сверхпроводникам с сильной связью, у которых $R \simeq 2$, что коррелирует с экспериментом [10,11].

В дальнейшем планируется рассчитать теплоемкость антиферромагнитных спиновых флуктуаций и провести более детальные компьютерные расчеты.

1. D. Pines, *Physica* **C185–189**, 120 (1991).
2. P. Monthoux, A. V. Balatsky, and D. Pines, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 3448 (1991).
3. T. Moriya, V. Takahashi, and K. Ueda, *Physica* **C185–189**, 114 (1991).
4. B. G. Levi, *Physics Today* **5**, 17 (1993).
5. K. Miyake and S. Schmitt-Rink, *Phys. Rev.* **B34**, 6554 (1986).
6. P. Monthoux and D. Pines, *Phys. Rev.* **B47**, 6069 (1993).
7. В. Н. Попов, *Континуальные интегралы в квантовой теории поля и статистической физике*, Атомиздат, Москва (1976).
8. J. Cornwall, R. Jackiv, and E. Tomoulis, *Phys. Rev.* **D10**, 2428 (1974).
9. S. P. Kruchinin, *Preprint ITP 94-20E*, p. II (1994).
10. S. Gumbatov, M. Pashaev, Aljanov et al., in: *«Materials and Mechanisms of Superconductivity. High-Temperature Superconductivity»*, Grenoble (1994), p. 265.
11. N. Phillips, R. A. Fisher, J. E. Gordon, S. Kim, and A. M. Stacy, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 357 (1990).

Antiferromagnetic spin fluctuations in cuprate superconductors

S. P. Kruchinin

The mechanism of pairing in high-temperature superconductors based on the antiferromagnetic spin fluctuations is considered. The equations for the superconducting gap and the thermodynamic potential near T_c have been obtained. The value of the parameter $\Delta C/(\gamma T_c)$ for the compounds $La_{1,85}Sr_{0,15}CuO_4$ are given.