

**АНАЛИЗ ИЗОТОПИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА
В СИЛЬНОКОРРЕЛИРОВАННЫХ СВЕРХПРОВОДНИКАХ
В РАМКАХ ДВУХОРБИТАЛЬНОЙ МОДЕЛИ АНДЕРСОНА-ХАББАРДА**

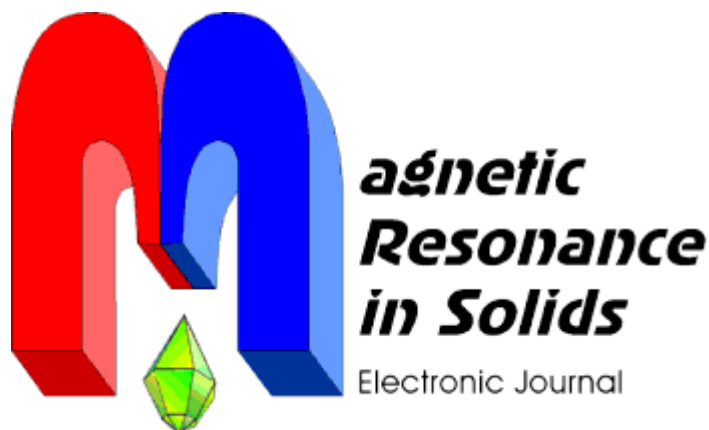
А.П. Ахтанин, А.А. Косов

Марийский государственный университет, 424001 Йошкар-Ола

**THE ISOTOPIC EFFECT
IN HIGHLY CORRELATED SUPERCONDUCTORS
IN THE ANDERSON-HUBBARD TWO-ORBITAL MODEL**

A.P. Achantin, A.A. Kosov

Mari State University, Yoshkar-Ola, Mari El, 424001 Russia



*Volume 6, No. 1,
pages 11-16, 2004*

<http://mrsej.ksu.ru>

**АНАЛИЗ ИЗОТОПИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА
В СИЛЬНОКОРРЕЛИРОВАННЫХ СВЕРХПРОВОДНИКАХ
В РАМКАХ ДВУХОРБИТАЛЬНОЙ МОДЕЛИ АНДЕРСОНА-ХАББАРДА**

А.П. Ахтанин, А.А. Косов
Марийский государственный университет, 424001 Йошкар-Ола

В рамках двухорбитальной модели Хаббарда получены формулы для квазичастичного спектра в энергетических зонах, гибридных андерсоновским взаимодействием. Переход к операторам Хаббарда, и диагонализация одноузельной части оператора Гамильтона позволили нам с помощью техники функций Грина учесть межузельное взаимодействие и изучить сверхпроводящие свойства модели. Предполагая, что эффективность гибридизации электронов связана с амплитудой локальных колебаний ионов, мы определили зависимость температуры сверхпроводящего перехода (T_c) от массы ионов (M) и величину изотопического эффекта $\alpha = (M/T_c) (dT_c/dM)$. Полученные зависимости параметра α от концентрации носителей тока и энергетических параметров электронных взаимодействий позволяют сделать вывод о том, что в некоторой области значений этих параметров величина изотопического эффекта может быть существенной.

**THE ISOTOPIC EFFECT
IN HIGHLY CORRELATED SUPERCONDUCTORS
IN THE ANDERSON-HUBBARD TWO-ORBITAL MODEL**

A.P. Ahtanin, A.A. Kosov
Mari State University, Yoshkar-Ola, Mari El, 424001 Russia

The two-orbital Hubbard model is used to obtain formula for the fermion excitation spectrum in the energy bands hybridized by Anderson's interaction. A transition to the Hubbard operators diagonalizes the one-site part of the Hamiltonian and allows us to use Green's function technique to take into account the interstitial hopping term, while studying the superconducting properties of the model. By proposing the dependence of the matrix element responsible for hybridization of p - and d - electronic states on the amplitude of local vibrations of ions, we determined a value of isotopic effect $\alpha = (M/T_c) (dT_c/dM)$ (M – mass of ions). The dependence of α upon carrier density and energy parameters determining the intra-atomic correlation is analyzed. It was concluded, that at some values of parameters the isotopic effect in T_c can be large enough and the model under consideration can be used for the description of the isotopic shift in T_c for a number of superconductors.

I. Введение

Теоретическое изучение явления сверхпроводимости в металлооксидных соединениях чрезвычайно сложно по многим причинам, в том числе из-за сложной природы внутриатомных электрон-электронных корреляций [1,2,3]. Вместе с тем интерес к проблеме возникновения сверхпроводимости в таких соединениях, как $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$, $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{CuO}_y$ и других, не ослабевает. На наш взгляд, одна из возможных причин, раскрывающих природу механизма сверхпроводимости, по-видимому, тесно связана с изучением изотопического эффекта в таких соединениях. В настоящей работе мы, исходя из предположения о том, что эффект гибридизации p - и d -электронных состояний зависит от амплитуды колебаний ионов меди в позициях Cu(II) , определили область значений параметра изотопического эффекта $\alpha = (M/T_c)(dT_c/dM)$.

II. Формулировка модели

Чтобы описать свойства сильно коррелированной системы электронов запишем следующий гамильтониан [4,5]:

$$H = H_0 + H_{\text{int}} = \sum H_{0i} + \sum t_{ij} C_{is}^+ C_{js} \quad (1)$$

$$H_{0i} = -\mu(n_{ia\uparrow} + n_{ia\downarrow} + n_{ic\uparrow} + n_{ic\downarrow}) + E(n_{ia\uparrow} + n_{ia\downarrow}) -$$

$$-H(n_{ia\uparrow} - n_{ia\downarrow} + n_{ic\uparrow} - n_{ic\downarrow}) + I \cdot n_{ia\uparrow} n_{ia\downarrow} + U(n_{ia\uparrow} + n_{ia\downarrow})(n_{ic\uparrow} + n_{ic\downarrow}) +$$

$$+ U_1 n_{ic\uparrow} n_{ic\downarrow} + \lambda Q(a_{i\uparrow}^+ C_{i\uparrow} + a_{i\downarrow}^+ C_{i\downarrow}) + \text{h.c.}$$

где C_{is}^+ , C_{is} и a_{is}^+ , a_{is} – полевые операторы, соответствующие p - и d -электронам на узле i с проекцией спина s ; $n_{ias} = a_{is}^+ a_{is}$ и $n_{ics} = C_{is}^+ C_{is}$ – операторы числа электронов; S_i и s_i – операторы спина p - и d -электронов; μ – химический потенциал; H – приложенное магнитное поле; E – одночастичная энергия d -электронов; I , U , и U_1 – энергетические параметры, определяющие внутриатомные корреляции; I – Хаббардовское взаимодействие локализованных электронов; U – межорбитальное кулоновское взаимодействие p - и d -электронов; U_1 – энергия отталкивания p -электронов на одном узле; λQ – оператор, ответственный за гибридизацию p - и d -электронных состояний.

Здесь мы предполагаем, что этот оператор пропорционален оператору смещения Q иона из положения равновесия. H_{int} описывает межузельное туннелирование p -электронов с транспортным интегралом t_{ij} .

Диагонализация одноячеечного гамильтониана H_{0i} , усреднение по колебательным состояниям иона (мы ограничились здесь моделью Эйнштейна при описании локальных колебаний иона) и переход к операторам Хаббарда X_p^q приводит к следующим результатам для волновых функций и энергетического спектра:

$$E_0 = 0, \psi_0 |0, 0\rangle \text{ – вакуум;}$$

$$E_{A,B} = -\mu + (E - 2H) / 2 \pm ((E/2)^2 + (\lambda^2 \langle Q^2 \rangle))^{1/2}$$

$$\psi_{A,B} = \cos(\alpha) |+, 0\rangle \pm \sin(\alpha) |0, +\rangle;$$

$$E_{C,D} = -\mu + (E + 2H) / 2 \pm ((E/2)^2 + (\lambda^2 \langle Q^2 \rangle))^{1/2};$$

$$\psi_{C,D} = \cos(\alpha) |-, 0\rangle \pm \sin(\alpha) |0, -\rangle;$$

$$|s, 0\rangle = a_{is}^+ |0, 0\rangle; |0, +\rangle = C_{is}^+ |0, 0\rangle.$$

$$\cos(\alpha) = Z / (Z^2 + (\lambda^2 \langle Q^2 \rangle))^{1/2}; \sin(\alpha) = \lambda \langle |Q| \rangle / (Z^2 + (\lambda^2 \langle Q^2 \rangle))^{1/2}$$

$$Z = \begin{cases} ((E/2)^2 + (\lambda^2 \langle Q^2 \rangle))^{1/2} + E/2, & \text{if } E > 0 \\ ((E/2)^2 + (\lambda^2 \langle Q^2 \rangle))^{1/2} - E/2, & \text{if } E < 0 \end{cases}$$

$$E_{F,G} = U - 2\mu + E \pm 2H;$$

$$\psi_F = |+, +\rangle; \psi_G = |-, -\rangle;$$

$$E_T = U - 2\mu + E;$$

$$\psi_s = 2^{-1/2} \{ |+, -\rangle - |-, +\rangle \};$$

$$|+, +\rangle = a_{i\uparrow}^+ C_{i\uparrow}^+ |0, 0\rangle; |-, -\rangle = a_{i\downarrow}^+ C_{i\downarrow}^+ |0, 0\rangle;$$

$$|+, -\rangle = a_{i\uparrow}^+ C_{i\downarrow}^+ |0, 0\rangle.$$

Энергия двухчастичных состояний E_K , E_L , and E_M может быть получена из решения кубического уравнения:

$$X^3 + AX^2 + BX + C = 0; \quad (2)$$

$$A = -(I + U + U_1 + 3E);$$

$$B = (I + 2E)(E + U) + U_1(3E + U + I) - 4(\lambda^2 \langle Q^2 \rangle);$$

$$C = 2(\lambda^2 \langle Q^2 \rangle)(I + 2E + U_1) - U_1(E + U)(2E + I).$$

Корни $X = \{X_m\}$ уравнения (2) определяют

$$E_{K,L,M} : X_m = 2\mu + E_{m,m=K,L,M}.$$

После точной диагонализации одно-узельной части Гамильтониана (1), его можно записать через диагональные операторы Хаббарда X_p^q в следующем виде [6]:

$$H_{0i} = \sum E_p X_p^p, \quad p = 0, A, B, \dots, K, L, M; \quad (3)$$

Оператор H_{int} , ответственный за перенос электронов между узлами, может быть представлен через квадратичную форму недиагональных хаббардовских операторов:

$$H_{\text{int}} = \sum t_{ij} g_{is}^*(X) g_{is}(X). \quad (4)$$

Операторы C_{is}^+ и C_{is} в H_{int} выражаются через операторы Хаббарда следующим образом:

$$\begin{aligned} C_{i\uparrow}^+ &= \cos(\alpha) X_A^0 + R_C^K X_K^{DC} = g_{i\uparrow}^*(X); \\ C_{i\downarrow}^+ &= \cos(\alpha) X_C^0 + R_A^K X_K^{BA} = g_{i\downarrow}^*(X); \\ R_C^K &= R_A^K = (C_1 A_3 - A_1 C_3) \cos(\alpha) / \sqrt{2} + (C_1 A_2 - C_2 A_1) \sin(\alpha); \\ A_1 &= (1 + A_{21}^2 + A_{13}^2)^{-1/2}; \quad A_2 = A_{21} A_1; \quad A_3 = A_{31} A_1; \\ A_{21} &= (E_L - 2E - I)^2 / 2(\lambda^2 \langle Q^2 \rangle); \quad A_{31} = (E_L - 2E - I)^2 / (E_L - U_1)^2; \\ B_2 &= (1 + B_{12}^2 + B_{32}^2)^{-1/2}; \quad B_1 = B_{12} B_2; \quad B_3 = B_{32} B_2; \\ C_3 &= (1 + C_{13}^2 + C_{23}^2)^{-1/2}; \quad C_1 = C_{13} C_3; \quad C_2 = C_{23} C_3; \\ C_{13} &= [(E_K - E - U)(E_K - U_1) - 2(\lambda^2 \langle Q^2 \rangle)] / [2(\lambda^2 \langle Q^2 \rangle)]; \\ C_{23} &= (E_K - U_1) / \sqrt{2}(\lambda^2 \langle Q^2 \rangle). \end{aligned}$$

В дальнейшем мы ограничимся нижней частью спектра и будем рассматривать только одночастичные состояния Ψ_A и Ψ_C , двухчастичное состояние Ψ_K и вакуумное состояние Ψ_0 .

Исходя из этих условий, и проводя аналогичные работам [6,7] расчеты, мы получили следующее выражение для температуры сверхпроводящего перехода:

$$\begin{aligned} T_c / 2W &= 0,57 \left[-\xi_{10}(-W) \xi_{10}(W/W^2) \right]^{1/2} \exp[-1/A(n, t_0)]; \\ \xi_{10}(-W) &= -2(R_C^K)^2 (n/2); \\ \xi_{10}(W) &= -\mu + (B_+ W - P_+ - \Delta) / 2; \\ A(n, t_0) &= \Gamma(n, t_0) / \Lambda(n, t_0); \\ \Gamma(n, t_0) &= \{ t_0 \cos^2(\alpha) (1 - n/2) (E_C - E_K) (E_C + B_- t_0) + \\ &+ (R_C^K)^2 (n/2) E_A (E_A - E_K + B_- t_0) \}; \\ \Lambda(n, t_0) &= W [B_+ (2\mu + \Delta) + B_- \Delta_1] (2\mu + \Delta - B_+ t_0); \\ \Delta &= -(E_K + 2\mu); \quad \Delta_1 = \Delta + E - \text{sign}(E) \left[E^2 + 4(\lambda^2 \langle Q^2 \rangle) \right]^{1/2}; \\ \mu &= -\Delta / 2 - W B_+ / 2 + 2(n/2) W (R_C^K)^2 - P_- / 2; \\ P_{\pm} &= \{ B_+^2 W^2 \pm 2\Delta_1 B_- W + \Delta_1 B_- W + \Delta_1^2 \}^{1/2}; \\ B_{\pm} &= \cos^2 \alpha (1 - n/2) \pm (R_C^K)^2 (n/2). \end{aligned} \quad (5)$$

Параметры $A(n, t_0)$, t_0 , $\xi_{10}(W)$ должны удовлетворять условиям:

$$A(n, t_0) > 0; \quad -W < t_0 < W; \quad \xi_{10}(W) \geq 0.$$

Здесь W – полуширина нижней дисперсной хаббардовской подзоны с концентрацией носителей тока n .

III. Изотопический сдвиг

В модели Эйнштейна зависимость между средне-квадратичным смещением иона ($\langle Q^2 \rangle$) и его массой M носит следующий характер:

$$\langle\langle Q^2 \rangle\rangle \sim M^{-1/2}. \quad (6)$$

Учитывая эту зависимость, с помощью формулы для T_c (5) легко получить выражение для параметра изотопического эффекта α :

$$\alpha = (M / T_c)(dT_c / dM) = -(\langle\langle Q^2 \rangle\rangle / 2)(d(\ln T_c) / d(\langle\langle Q^2 \rangle\rangle)) \quad (7)$$

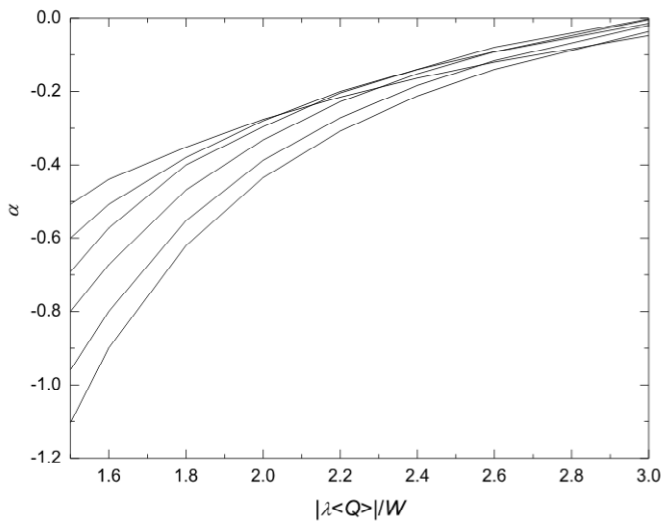


Рис.1. Зависимость параметра изотопического сдвига α от матричного элемента $|\lambda \langle Q \rangle| / W$ при следующих значениях энергетических параметров: $E/W = -1.0$, $U/W = 2.0$, $U_1/W = 1.0$, $I/W = 3.0$. Каждая кривая отвечает своему значению концентрации носителей ($n = 0.67, 0.7, 0.75, 0.8, 0.85, 0.9$). Чем выше проходит кривая, тем больше это значение

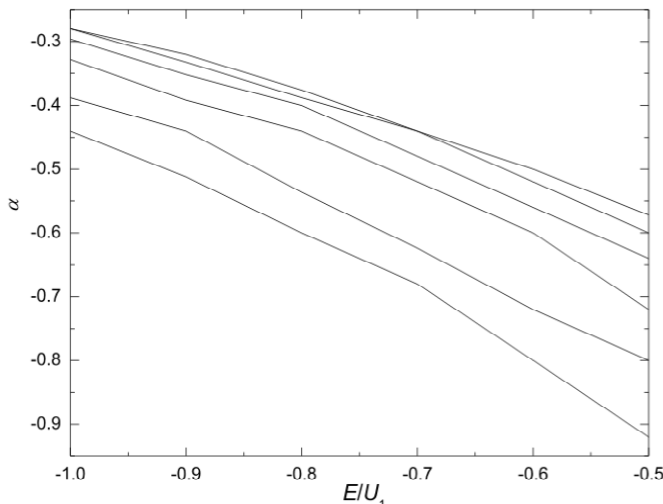


Рис.2. Зависимость параметра изотопического сдвига α от E при различных концентрациях носителей при следующих значениях энергетических параметров: $|\lambda \langle Q \rangle| / W = 2.0$; $U / W = 2.0$; $U_1 / W = 1.0$; $I / W = 3.0$. Набор кривых отвечает тем же значениям концентрации носителей, что и на рис.1

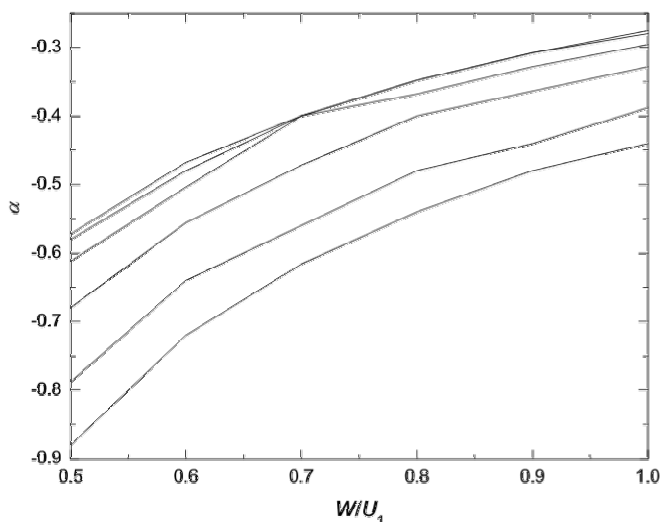


Рис.3. Зависимость параметра изотопического сдвига α от полуширины хаббардовской подзоны W при различных концентрациях носителей при следующих значениях энергетических параметров: $E / W = -1.0$; $E / U_1 = -1.0$; $U / U_1 = 2.0$; $I / U_1 = 3.0$. Набор кривых отвечает тем же значениям концентрации носителей, что и на рис.1-2

На рисунках 1-3 приведены зависимости параметра α от энергетических параметров, характеризующих внутриатомные корреляции, полученные при разных концентрациях носителей тока. Характерным для всех графиков является то, что модуль параметра изотопического сдвига, как правило, значительно меньше значения

$|\alpha| = 1/2$, соответствующего фоновой модели сверхпроводимости БКШ. Вместе с тем, мы можем подобрать параметры модели так, что значения $|\alpha|$ могут иметь величину сравнимую и даже превышающую $1/2$.

Литература

1. Izyumov Yu.A., Katsnel'son M.I., Skryabin Yu.N. Magnetism of Collectivized Electrons [in Russian]. – Moscow: Nauka, 1994.
2. Schilling J.S., Klotz S. Physical Properties of High Temperature Superconductors / ed. by D.M. Ginsberg // World Scientific. – Singapore, 1992. – V.III.
3. Takahashi H., Mori N. Studies of High Temperature Superconductors / ed. by Anant Narlikar // Nova Science Publishers. – INC, 1996. – V.16.
4. Kosov A.A. Analysis of the superconducting transition under pressure in the Anderson-Hubbard two-orbital model // Fiz. Nizk. Temp. – 1998. – V.24, №3.
5. Косов А.А., Шилов В.Е. Исследование сверхпроводящего перехода в рамках периодической двухорбитальной модели Андерсона-Хаббарда // ФНТ. – 1996. – Т.22, №9. – С. 1032. [Kosov A.A., Shilov V.E. // Low Temp. Phys. – 1996. – V.22, №9. – P. 787].
6. Kosov A.A., Boughton R.I. Analysis of the effect of oxygen doping and pressure on superconducting temperature in metal oxides // JETP. – 1999. – V. 115, вып.1. – P. 80–88.
7. Kosov A.A., Boughton R.I. Analysis of the effect of oxygen doping and pressure on superconducting phase transition in $Y_{0.9}Ca_{0.1}Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$ // 32-nd Workshop on Low Temperature Physics, Russia, Kazan, 3-6 October. Казань, 2000. – P. 169–170.