Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Ж. Ковачевич, Н. М. Плакида, Р. Хайн, Резонансные состояния в высокотемпературных сверхпроводниках с примесями, *ТМФ*, 2003, том 136, номер 2, 299–311

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf224>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 3.85.5.30

26 апреля 2023 г., 13:07:29

© 2003 г. Ж. Ковачевич^{*,†}, Н. М. Плакида^{*}, Р. Хайн[‡]

РЕЗОНАНСНЫЕ СОСТОЯНИЯ В ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКАХ С ПРИМЕСЯМИ

Предложена микроскопическая теория резонансных состояний для плоскости CuO_2 с примесями Zn в сверхпроводящей фазе в рамках эффективной t - J модели. В предложенной модели, полученной из p - d модели, примеси Zn рассматриваются как вакансии d -состояний на узлах Cu. В сверхпроводящей фазе, дополнительно к локальному статическому возмущению за счет вакансии, появляется динамический вклад, в результате чего матрица возмущений становится частотно-зависимой. На основе метода T -матриц для функций Грина от операторов Хаббарда вычислена локальная плотность электронных состояний, имеющих d -, p - и s -симметрию.

Ключевые слова: высокотемпературные сверхпроводники, примеси, резонансные состояния, t - J модель.

1. ВВЕДЕНИЕ

Влияние примесей Zn на свойства медно-оксидных сверхпроводников изучалось во многих экспериментальных и теоретических работах [1]–[14]. Особое внимание привлекло недавнее исследование с помощью сканирующего туннельного микроскопа пространственных изменений локальной плотности состояний вокруг немагнитных примесей (Zn, Ni) в медно-оксидном сверхпроводнике таком, как $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ (Bi-2212) [5]. Было показано, что наличие немагнитных примесей вызывает появление локализованных низкоэнергетических возбуждений вблизи этих примесей.

Эти впечатляющие экспериментальные результаты способствовали появлению множества теоретических исследований [6]–[12]. Несмотря на то что были получены важные результаты о пространственных изменениях локальной плотности состояний вокруг примесей и определенная информация о симметрии соответствующего сверхпроводящего конденсата, следует подчеркнуть тот факт, что все предложенные модели носят

^{*}Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Московская обл., Россия. E-mail: plakida@thsun1.jinr.ru

[†]Faculty of Natural Science and Mathematics, University of Montenegro, Podgorica, Yugoslavia

[‡]Institute for Solid State and Material Research, Dresden, Germany

феноменологический характер. В частности, в работах [6], [7], [11] применялся формализм “ T -матриц” для функций Грина на основе потенциала рассеяния примесей, полученного из некоторой феноменологической (2×2) -матрицы. Недиagonalные члены матрицы описывали локальное подавление функции щели в узлах локализации примесей [7], [8]. Формализм Боголюбова–де Жена применялся к модели сверхпроводника с примесями [10], при этом учитывалось только рассеяние s -волн, а решение было получено с помощью вариационного анзаца для параметров $u(\mathbf{r})$ и $v(\mathbf{r})$. В работе [13] пространственная зависимость зависящей от спина компоненты потенциала рассеяния $K(\mathbf{r})$ моделировалась в соответствии с экспериментальными результатами, полученными с помощью ядерного магнитного резонанса.

В наших недавних работах [3], [4] была предложена микроскопическая модель плоскости CuO_2 с примесями Zn , основанная на зонных расчетах для соответствующих соединений с использованием исходной p - d модели для плоскости CuO_2 . Используя кластерную теорию возмущений и преобразование Шриффера–Вольфа, мы получили эффективную однозонную t - J модель в терминах операторов Хаббарда [4]. Гамильтониан, соответствующий этой модели, в дальнейшем применялся для изучения вкладов от s -, p - и d -волн в плотность состояний в нормальной фазе для плоскости CuO_2 с примесями Zn [4].

Основная цель данной статьи – обобщить наши вычисления на случай сверхпроводящей фазы для предложенной модели. Используя технику проектирования в методе уравнения движения для нормальной и аномальной функций Грина, мы получаем соответствующую T -матрицу рассеяния, содержащую зависящие от частоты диагональные и недиагональные компоненты потенциала рассеяния. Наконец, мы вычисляем вклад s -, p - и d -волн в локальную плотность состояний $D(\omega, \mathbf{r})$ в узлах, которая пропорциональна дифференциальной проводимости dI/dV [1], [8], измеряемой экспериментально с помощью сканирующего туннельного микроскопа [5].

Статья построена следующим образом. В разделе 2 вводится модельный гамильтониан и выводятся уравнения для функций Грина. В разделе 3 приводятся полученные результаты: анализ симметрии (п. 3.1), плотность электронных состояний (п. 3.2) и локальная плотность электронных состояний (п. 3.3) для s -, p - и d -волновой симметрии. В разделе 4 даются заключительные выводы.

2. ФУНКЦИИ ГРИНА

Для исследования влияния примесей Zn на сверхпроводящее состояние мы рассмотрим эффективную t - J модель плоскости CuO_2 с примесями Zn [3], [4]:

$$H = H'_{t-J} + V_{\text{imp}} = H_0 + V_{\text{vac}} + V_{\text{imp}}. \quad (1)$$

Гамильтониан H'_{t-J} для исходной решетки с вакансией в примесном узле $i = 0$ можно записать как сумму гамильтониана для t - J модели идеальной решетки

$$H_0 = H_{t-J} = \epsilon \sum_{i,\sigma} X_i^{\sigma\sigma} + t \sum_{i \neq j, \sigma} X_i^{\sigma 0} X_j^{0\sigma} + \frac{1}{4} J \sum_{i \neq j, \sigma} (X_i^{\sigma\bar{\sigma}} X_j^{\bar{\sigma}\sigma} - X_i^{\sigma\sigma} X_j^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}) \quad (2)$$

и вклада от вакансии V_{vac} , который задается формулой

$$V_{\text{vac}} = -\epsilon \sum_{\sigma} X_0^{\sigma\sigma} - t \sum_{a,\sigma} (X_0^{\sigma 0} X_a^{0\sigma} + \text{э.с.}) - \frac{1}{4} J \sum_{a,\sigma} (X_0^{\sigma\bar{\sigma}} X_a^{\bar{\sigma}\sigma} - X_0^{\sigma\sigma} X_a^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} + \text{э.с.}). \quad (3)$$

Здесь $\epsilon = \epsilon_d - \mu$ – энергия дырки, $t = t_{ij}$ – параметр перескока между ближайшими соседними узлами i, j квадратной решетки, а μ – химический потенциал. Суммирование в формуле (3) проводится по узлам Cu исходной квадратной решетки, где примесь Zn находится в узле $i = 0$, а $a = 1(a_x), 2(a_y), 3(-a_x), 4(-a_y)$ обозначают ближайшие к нему соседние узлы. В дальнейшем в формуле (1) мы пренебрегаем потенциалом рассеяния примесей V_{imp} в узле $i = 0$, так как его энергия много больше, чем химический потенциал μ [3], и примесный уровень остается незанятым при низкоэнергетических переходах.

Для изучения сверхпроводящей фазы с использованием предложенного модельного гамильтониана (1)–(3) мы введем матричную функцию Грина в представлении Намбу:

$$\hat{\mathcal{G}}_{ij\sigma}(t-t') = \langle \langle \hat{\Psi}_{i\sigma}(t) | \hat{\Psi}_{j\sigma}^+(t') \rangle \rangle = -i\theta(t-t') \langle \{ \hat{\Psi}_{i\sigma}(t), \hat{\Psi}_{j\sigma}^+(t') \} \rangle,$$

где операторы Намбу могут быть записаны в терминах операторов Хаббарда [15]–[18],

$$\hat{\Psi}_{i\sigma} = \begin{pmatrix} X_i^{0\sigma} \\ X_i^{\bar{\sigma}0} \end{pmatrix}, \quad \hat{\Psi}_{i\sigma}^+ = (X_i^{\sigma 0} \ X_i^{0\bar{\sigma}}),$$

и где используются обозначения Зубарева [19] для функций Грина. Соответствующую временную компоненту Фурье можно записать следующим образом:

$$\hat{\mathcal{G}}_{ij\sigma}(\omega) = \begin{pmatrix} \mathcal{G}_{ij\sigma}^{11}(\omega) & \mathcal{G}_{ij\sigma}^{12}(\omega) \\ \mathcal{G}_{ij\sigma}^{21}(\omega) & \mathcal{G}_{ij\sigma}^{22}(\omega) \end{pmatrix}, \quad (4)$$

где $\mathcal{G}_{ij\sigma}^{11}(\omega) \equiv \langle \langle X_i^{0\sigma} | X_j^{\sigma 0} \rangle \rangle_{\omega}$ и $\mathcal{G}_{ij\sigma}^{21} \equiv \langle \langle X_i^{\bar{\sigma}0} | X_j^{\sigma 0} \rangle \rangle_{\omega}$ – нормальная и аномальная компоненты функции Грина. Компоненты функции Грина (4) удовлетворяют следующим соотношениям симметрии: $\mathcal{G}_{ij\sigma}^{12} = -\mathcal{G}_{ij\sigma}^{12}$, $\mathcal{G}_{ij\sigma}^{12}(-\omega) = \mathcal{G}_{ij\sigma}^{12}(\omega)$. Уравнение движения для оператора Намбу $\hat{\Psi}_{i\sigma}$ можно записать в виде

$$i \frac{d}{dt} \hat{\Psi}_{i\sigma} \equiv \hat{Z}_{i\sigma} = [\hat{\Psi}_{i\sigma}, H] \simeq \sum_l (\hat{E} + \hat{V})_{il\sigma} \hat{\Psi}_{l\sigma} + \hat{Z}_{i\sigma}^{\text{irr}},$$

где линейная по $\hat{\Psi}_{l\sigma}$ часть задает матрицу частот $\hat{E}$ для идеальной решетки и статическое возмущение $\hat{V}$. Неприводимая часть $\hat{Z}_{i\sigma}^{\text{irr}}$, обусловленная неупругими процессами рассеяния, определяется условием ортогональности $\langle \{ \hat{Z}_{i\sigma}^{\text{irr}}, \hat{\Psi}_{j\sigma}^+ \} \rangle = 0$. В результате получаем определения матрицы частот

$$\hat{E}_{ij\sigma} = \langle \{ [\hat{\Psi}_{i\sigma}, H_0], \hat{\Psi}_{j\sigma}^+ \} \rangle \hat{Q}_{\sigma}(j)^{-1} = \begin{pmatrix} E & \Delta \\ \Delta^+ & -E \end{pmatrix}_{ij\sigma}$$

и потенциала возмущений

$$\hat{V}_{ij\sigma} = \langle \{[\hat{\Psi}_{i\sigma}, V_{\text{vac}}], \hat{\Psi}_{j\sigma}^+\} \rangle \hat{Q}_{\sigma}(j)^{-1} = \begin{pmatrix} V & \phi \\ \phi^+ & -V \end{pmatrix}_{ij\sigma}, \quad (5)$$

где

$$\langle \{ \hat{\Psi}_{i\sigma}, \hat{\Psi}_{i\sigma}^+ \} \rangle = \hat{Q}_{\sigma}(i) = \begin{pmatrix} Q_{\sigma}(i) & 0 \\ 0 & Q_{\bar{\sigma}}(i) \end{pmatrix}, \quad Q_{\sigma}(i) = \langle X_i^{00} + X_i^{\sigma\sigma} \rangle.$$

Так как мы изучаем парамагнитное состояние, корреляционная функция $Q_{\sigma}(i) = Q_i = 1 - n_i/2$ зависит только от среднего числа дырок n_i в узле решетки i . В дальнейшем мы будем пренебрегать зависимостью n_i от узла решетки и введем величину $Q_i = Q = 1 - n/2$.

Вводя нормированную функцию Грина $\hat{G}_{ij\sigma} = \hat{\mathcal{G}}_{ij\sigma} Q_j^{-1}$, мы получаем следующее уравнение:

$$\omega \hat{G}_{ij\sigma}(\omega) = \delta_{ij} \hat{\tau}_0 + \sum_l (\hat{E}_{il\sigma} + \hat{V}_{il\sigma}) \hat{G}_{lj\sigma}(\omega),$$

где $\hat{\tau}_0$ – единичная матрица. Из этого матричного уравнения мы выводим линейную систему

$$\omega G_{ij}(\omega) = \delta_{ij} + \sum_l (E_{il} + V_{il}) G_{lj}(\omega) + \sum_l (\Delta_{il}^{\sigma} + \phi_{il}^{\sigma}) F_{lj\sigma}(\omega), \quad (6)$$

$$\omega F_{ij\sigma}(\omega) = \sum_l (\Delta_{il}^{\sigma+} + \phi_{il}^{\sigma+}) G_{lj}(\omega) - \sum_l (E_{il} + V_{il}) F_{lj\sigma}(\omega) \quad (7)$$

для нормальной $G_{ij} = G_{ij\sigma}^{11}$ и аномальной $F_{ij\sigma} = G_{ij\sigma}^{12}$ компонент функции Грина.

Диагональные компоненты матрицы частот можно записать следующим образом:

$$E_{ij\sigma}^{11} = E_{ij} = \tilde{\epsilon} \delta_{ij} + \tilde{t} \delta_{j,i+a},$$

где энергия в узле $\tilde{\epsilon} = \epsilon + \delta\epsilon$ и эффективная энергия перескока $\tilde{t}$ в приближении обобщенного среднего поля перенормированы с учетом кинематического и обменного взаимодействия [4], [16]:

$$\delta\epsilon = \frac{J}{2Q} \sum_a \left[\left\langle \left(1 - \frac{n_i}{2} \right) \left(1 - \frac{n_{i+a}}{2} \right) \right\rangle + \langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+a} \rangle - Q \right] - \frac{t}{Q} \sum_a \langle X_i^{\sigma 0} X_{i+a}^{0\sigma} \rangle,$$

$$\tilde{t} = \frac{t}{Q} \left[\left\langle \left(1 - \frac{n_i}{2} \right) \left(1 - \frac{n_{i+a}}{2} \right) \right\rangle + \langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+a} \rangle \right] - \frac{J}{2Q} \langle X_i^{\sigma 0} X_{i+a}^{0\sigma} \rangle,$$

где $\langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+a} \rangle$ – спиновая корреляционная функция ближайших соседей. Нondiagonальные компоненты матрицы частот можно записать следующим образом:

$$\Delta_{ij}^{\sigma} = \delta_{ij} \frac{2t}{Q} \sum_a \langle X_i^{0\sigma} X_{i+a}^{0\bar{\sigma}} \rangle + \delta_{j,i+a} \frac{J}{Q} \langle X_i^{0\sigma} X_{i+a}^{0\bar{\sigma}} \rangle, \quad (8)$$

где $a = (\pm a_x, \pm a_y)$. В дальнейшем мы будем рассматривать только d -волновую симметрию шели Δ_{ij}^{σ} и, следовательно, можем пренебречь первым членом в уравнении (8),

который равен нулю благодаря этой симметрии, т.е. $\sum_a \langle X_i^{0\sigma} X_{i+a}^{0\bar{\sigma}} \rangle = 0$. Диагональные компоненты матрицы возмущений имеют следующие ненулевые элементы:

$$V_{ij} = V_{00}\delta_{i0}\delta_{j0} + V_{01}\delta_{i0} \sum_a \delta_{ja} + V_{01}\delta_{j0} \sum_a \delta_{ia} + V_{11} \sum_a \delta_{ia}\delta_{ja}, \quad (9)$$

где $V_{00} = -\tilde{\epsilon}$, $V_{01} = -\tilde{t}$, $V_{11} = -(1/4)\delta\epsilon$, а недиагональные компоненты –

$$\phi_{ij}^{\sigma} = -\delta_{i,0}\Delta_{0a}^{\sigma} - \delta_{j0}\Delta_{0a}^{\sigma} - \delta_{ia}\delta_{ja} \frac{2t}{J}\Delta_{0a}^{\sigma}, \quad (10)$$

где $\Delta_{0a}^{\sigma} = \Delta_{01}^{\sigma}(\delta_{a,\pm a_x} - \delta_{a,\pm a_y})$ и $\Delta_{01}^{\sigma} = (J/Q)\langle X_0^{0\sigma} X_{a_x}^{0\bar{\sigma}} \rangle$. Решая систему уравнений (6), (7) для функций Грина как $(N \times N)$ -матриц в узельном представлении, мы получаем уравнение

$$\{\omega I - (E + V) - (\Delta^{\sigma} + \phi^{\sigma})[\omega I + E + V]^{-1}(\Delta^{\sigma} + \phi^{\sigma})^+\}G = I, \quad (11)$$

где I – единичная $(N \times N)$ -матрица. Для идеальной решетки ($V = 0$) мы вводим соответствующую нулевую функцию Грина в сверхпроводящем состоянии:

$$G^0 = \{\omega I - E - \Delta^{\sigma}(\omega I + E)^{-1}\Delta^{\sigma+}\}^{-1}. \quad (12)$$

Тогда можно записать уравнение (11) в виде

$$G = G^0 + G^0(V + \Phi)G, \quad (13)$$

где

$$\Phi = (\Delta^{\sigma} + \phi^{\sigma})\frac{1}{\omega I + E + V}(\Delta^{\sigma} + \phi^{\sigma})^+ - \Delta^{\sigma}\frac{1}{\omega I + E}\Delta^{\sigma+}. \quad (14)$$

После несложных алгебраических преобразований мы получаем следующее формальное решение уравнения Дайсона (13):

$$G = \frac{1}{I - G^0(V + \Phi)}G^0 = G^0 + G^0 M G^0,$$

где мы ввели матрицу рассеяния

$$M = (V + \Phi)\frac{1}{I - G^0(V + \Phi)}. \quad (15)$$

В линейном по ϕ приближении имеем

$$\Phi \simeq -\{\Delta^{\sigma} G_n^0(-\omega)\phi^{\sigma+} + \text{э.с.}\} - \Delta^{\sigma} G_n^0(-\omega)V G_n^0(-\omega)\Delta^{\sigma+}, \quad (16)$$

где нулевая функция Грина для идеальной решетки в нормальном состоянии задается соотношением

$$G_n^0(\omega) = \frac{1}{\omega I - E}.$$

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

3.1. Анализ симметрии. Рассеяние квазичастичных электронных возбуждений на потенциале примесей дает дополнительный вклад δG в нулевую функцию Грина. В соответствии с неприводимыми представлениями соответствующих решеточно-групповых преобразований можно разделить δG на различные s -, p - и d -части [20], т.е. записать

$$G = G^0 + \sum_{\mu=s,p,d} \delta G_{\mu}. \quad (17)$$

Здесь

$$\delta G_{\mu} = G^0 T_{\mu} M_{\mu} T_{\mu}^+ G^0, \quad (18)$$

где

$$M_{\mu} = T_{\mu}^+ M T_{\mu} = (V_{\mu} + \Phi_{\mu})[1 - G_{\mu}^0 (V_{\mu} + \Phi_{\mu})]^{-1}, \quad (19)$$

$$V_{\mu} = T_{\mu}^+ V T_{\mu}, \quad G_{\mu}^0 = T_{\mu}^+ G^0 T_{\mu} \text{ и}$$

$$\Phi_{\mu} = T_{\mu}^+ \Phi T_{\mu} = -\{\Delta_{\mu}^{\sigma} G_{n,\mu}^0(-\omega) \phi_{\mu}^{\sigma+} + \text{э.с.}\} - \Delta_{\mu}^{\sigma} G_{n,\mu}^0(-\omega) V_{\mu} G_{n,\mu}^0(-\omega) \Delta_{\mu}^{\sigma+}. \quad (20)$$

Явные формулы для матриц T_{μ} и матриц возмущения V и ϕ даны в приложении (см. (П.1), (П.2)).

Имеющие s -, p - и d -симметрию блочно-диагональные части матриц возмущения V_{μ} и ϕ_{μ} (9), (10) задаются формулами

$$V_s = V_{11}, \quad V_p = V_{11} \hat{\tau}_0, \quad V_d = \begin{pmatrix} V_{00} & 2V_{01} \\ 2V_{01} & V_{11} \end{pmatrix}, \quad (21)$$

$$\phi_s = 0, \quad \phi_p^{\sigma} = -\frac{2t}{J} \Delta_{01}^{\sigma} \hat{\tau}_3, \quad \phi_d = 0. \quad (22)$$

Применяя унитарные преобразования (П.1) к матрицам G^0 , Δ_{σ} и G_n^0 , мы получим

$$G_s^0 = G_{11}^0 - 2G_{12}^0 + G_{13}^0 \equiv \gamma_s, \quad (23)$$

$$G_p^0 = \gamma_p \hat{\tau}_0, \quad \gamma_p = G_{11}^0 - G_{13}^0, \quad (24)$$

$$G_d^0 = \begin{pmatrix} d_{00} & d_{01} \\ d_{10} & d_{11} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G_{00}^0 & 2G_{01}^0 \\ 2G_{01}^0 & \sum_a G_{a1}^0 \end{pmatrix}, \quad (25)$$

$$\Delta_s = 0, \quad \Delta_p = 0, \quad \Delta_d^{\sigma} = 2\Delta_{01}^{\sigma} \hat{\tau}_1, \quad (26)$$

$$G_{n,s}^0 = G_{11}^{0,n} - 2G_{12}^{0,n} + G_{13}^{0,n} \equiv \gamma_{n,s}, \quad (27)$$

$$G_{n,p}^0 = \gamma_{n,p} \hat{\tau}_0, \quad \gamma_{n,p} = G_{11}^{0,n} - G_{13}^{0,n}, \quad (28)$$

$$G_{n,d}^0 = \begin{pmatrix} d_{00}^n & d_{01}^n \\ d_{10}^n & d_{11}^n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G_{00}^{0,n} & 2G_{01}^{0,n} \\ 2G_{01}^{0,n} & \sum_a G_{a1}^{0,n} \end{pmatrix}, \quad (29)$$

где $\hat{\tau}_0, \hat{\tau}_1, \hat{\tau}_3$ — матрицы Паули.

3.2. Плотность электронных состояний. Рассеяние примесей дает дополнительный вклад в плотность состояний, который может быть разделен на s -, p - и d -волновые части в зависимости от симметрии [4], [20]:

$$\delta g = \sum_{\mu=s,p,d} \delta g_{\mu} = -\frac{1}{\pi} \sum_{\mu=s,p,d} \text{Im}\{\delta G_{\mu}(\omega + i\varepsilon)\} = -\frac{1}{\pi} \sum_{\mu=s,p,d} \frac{d}{d\omega} \arg\{D_{\mu}(\omega)\},$$

где

$$I_{\mu} = 1 - G_{\mu}^0(V_{\mu} + \Phi_{\mu}) \quad (30)$$

— знаменатель в матрице рассеяния M (15) соответствующей симметрии, а D_{μ} — детерминант матрицы I_{μ} .

Из уравнений (20) и (26) следует, что $\Phi_s = 0$ и $I_s = D_s = 1 - \gamma_s V_{11}$, где γ_s определена в (23) в терминах функции Грина G^0 (12) для сверхпроводящей фазы и V_{11} задается формулами (9), (10).

Из формул (20), (П.1) следует, что Φ_p — это нулевая матрица размера 2×2 . Таким образом, из соотношения (30) мы получаем следующее выражение для p -волновой матрицы возмущений:

$$I_p = (1 - \gamma_p V_{11})\hat{\tau}_0 \quad \text{и} \quad D_p = \det\{I_p\} = (1 - \gamma_p V_{11})^2,$$

где γ_p определена в (24).

В случае d -волновой симметрии уравнения (19)–(21), (25) приводят к следующему решению для матрицы Φ :

$$\Phi_d = \begin{pmatrix} \Phi_d^{11} & \Phi_d^{12} \\ \Phi_d^{21} & \Phi_d^{22} \end{pmatrix}.$$

Ее матричные элементы даны в приложении (см. формулы (П.3)). Вводя обозначения

$$\begin{aligned} V'_{00} &= V_{00} + \Phi_d^{11}, & 2V'_{01} &= 2V_{01} + \Phi_d^{12}, \\ 2V'_{10} &= 2V_{01} + \Phi_d^{21}, & V'_{11} &= V_{11} + \Phi_d^{22}, \end{aligned} \quad (31)$$

мы можем записать d -волновую матрицу возмущений (30) следующим образом:

$$I_d = 1 - G_d^0(V_d + \Phi_d) \equiv \begin{pmatrix} I_d^{11} & I_d^{12} \\ I_d^{21} & I_d^{22} \end{pmatrix},$$

где соответствующие матричные элементы имеют вид

$$\begin{aligned} I_d^{11} &= 1 - G_{00}^0 V'_{00} - 4G_{01}^0 V'_{10}, & I_d^{12} &= 2G_{00}^0 V'_{01} + 2G_{01}^0 V'_{11}, \\ I_d^{21} &= 2G_{01}^0 V'_{00} + 2 \sum_a G_{a1}^0 V'_{10}, & I_d^{22} &= 1 - 4G_{01}^0 V'_{01} - \sum_a G_{a1}^0 V'_{11}. \end{aligned}$$

Детерминант этой матрицы имеет вид

$$\begin{aligned} D_d &= I_d^{11} I_d^{22} - I_d^{12} I_d^{21} = 1 - V'_{00} G_{00}^0 - V'_{11} \sum_a G_{a1}^0 - \\ &\quad - 4V'_{01} G_{01}^0 - 4V'_{10} G_{01}^0 + \det\{V'_d\} \det\{G_d^0\}, \end{aligned}$$

где матричные элементы $V'_d = V_d + \Phi_d$ и G_d^0 даны в (31) и (25), соответственно.

3.3. Локальная плотность электронных состояний. Как следствие рассеяния на примесях возникает следующий дополнительный вклад в узельную локальную плотность состояний, который также можно разделить на s -, p - и d -волновые части:

$$\delta D^{(\mu)}(\omega, i) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \{ \delta G_{ii}^{(\mu)}(\omega + i\varepsilon) \}, \quad (32)$$

где матрица функции Грина соответствующей симметрии задается соотношениями (17)–(19).

В случае s -волновой части $M_s = V_{11}/I_s$ и $I_s = 1 - \gamma_s V_{11}$, функция γ_s дана в (23) и

$$\delta G_{ii}^{(s)} = \frac{1}{4} \sum_{a, a'} (-1)^{a+a'} G_{ia}^0 G_{a'i}^0 M_s = \frac{1}{4} \left\{ \sum_a (-1)^a G_{ia}^0 \right\}^2 M_s. \quad (33)$$

В частности, для примесного узла $i = 0$ и для узлов $i = a_2 = \pm(a_x \pm a_y)$, которые являются вторыми соседями для примесного узла, мы имеем $\sum_a (-1)^a G_{ia}^0 = 0$, что дает нулевой вклад в локальную плотность состояний s -волновой части в узлах $i = 0$ и $i = a_2$ для любого значения ω , т.е.

$$\delta D^{(s)}(\omega, 0) = \delta D^{(s)}(\omega, a_2) = 0.$$

Для узлов $i = 1(a_x), 2(a_y)$ мы имеем ненулевую локальную плотность состояний (32), где

$$\begin{aligned} \delta G_{11}^{(s)} &= \frac{1}{4} \{ 2G_{12}^0 - G_{11}^0 - G_{13}^0 \}^2 M_s, \\ \delta D^{(s)}(\omega, \pm a_x) &= \delta D^{(s)}(\omega, \pm a_y) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \{ \delta G_{11}^{(s)}(\omega + i\varepsilon) \}. \end{aligned}$$

В случае p -волны мы получаем соответствующие уравнения

$$M_p = \frac{V_{11}}{1 - \gamma_p V_{11}} \hat{\tau}_0 \quad (34)$$

и

$$\delta G_{ii}^{(p)} = \frac{V_{11}}{1 - \gamma_p V_{11}} \frac{1}{2} \{ (G_{i1}^0 - G_{i3}^0)^2 + (G_{i2}^0 - G_{i4}^0)^2 \}.$$

В частности, для узла $i = 0$ мы имеем $G_{01}^0 = G_{03}^0 = G_{02}^0 = G_{04}^0$ и $\Delta G_{00}^p = 0$, что дает нулевой вклад в локальную плотность состояний p -волновой части в узле $i = 0$ для любого значения ω , т.е. $\delta D^{(p)}(\omega, 0) = 0$.

Для узлов $i = 1, 2$

$$\delta G_{11}^{(p)} = \frac{V_{11}}{1 - \gamma_p V_{11}} \frac{1}{2} (G_{11}^0 - G_{13}^0)^2,$$

а для узлов $i = a_2 = \pm(a_x \pm a_y)$

$$\delta G_{a_2 a_2}^{(p)} = \frac{V_{11}}{1 - \gamma_p V_{11}} (G_{a_2 1}^0 - G_{a_2 3}^0)^2,$$

что дает соответствующие ненулевые значения для локальной плотности состояний p -волновой части в узлах $i = 1, 2$ и a_2 :

$$\delta D^{(p)}(\omega, \pm a_x) = \delta D^{(p)}(\omega, \pm a_y) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \{ \delta G_{11}^{(p)}(\omega + i\varepsilon) \}$$

и

$$\delta D^{(p)}(\omega, a_2) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \{ \delta G_{a_2 a_2}^{(p)}(\omega + i\varepsilon) \},$$

соответственно.

В случае d -волны

$$M_d = V'_d I_d^{-1} = \frac{1}{D_d} \begin{pmatrix} \widetilde{M}_d^{11} & \widetilde{M}_d^{12} \\ \widetilde{M}_d^{21} & \widetilde{M}_d^{22} \end{pmatrix}, \quad (35)$$

где

$$\begin{aligned} \widetilde{M}_d^{11} &= V'_{00} - d_{00}(V'_{00})^2 - 2d_{01}V'_{10}V'_{00} + 2d_{01}V'_{01}V'_{00} + 4d_{11}V'_{01}V'_{10}, \\ \widetilde{M}_d^{12} &= 2V'_{00}d_{00}(V'_{01})^2 + d_{01}V'_{11}V'_{00} + 2V'_{01} - (2V'_{01})^2d_{10} - 2d_{11}V'_{01}V'_{11}, \\ \widetilde{M}_d^{21} &= 2V'_{10} - 2d_{00}(V'_{10})^2V'_{00} - (2V'_{10})^2d_{01} + d_{10}V'_{11}V'_{00} + 2d_{11}V'_{11}V'_{10}, \\ \widetilde{M}_d^{22} &= 2V'_{00}d_{10}(V'_{10})^2 + V'_{11} - 2d_{10}V'_{01}V'_{11} - d_{11}(V'_{11})^2, \end{aligned}$$

и

$$\delta G_{ii}^{(d)} = \frac{1}{D_d} \left\{ \widetilde{M}_d^{11}(G_{0i}^0)^2 + \frac{1}{2}(\widetilde{M}_d^{12} + \widetilde{M}_d^{21})G_{i0}^0 \sum_a G_{ai}^0 + \frac{1}{4}\widetilde{M}_d^{22} \sum_{a,a'} G_{ia}^0 G_{a'i}^0 \right\},$$

где

$$\sum_{a,a'} G_{ia}^0 G_{a'i}^0 = \sum_a (G_{ai}^0)^2 + 2G_{1i}^0 \sum_a G_{ai}^0 + 2G_{2i}^0 (G_{3i}^0 + G_{4i}^0) + 2G_{3i}^0 G_{4i}^0.$$

В частности, для примесного узла $i = 0$ получаем

$$\sum_a G_{a0}^0 = 4G_{01}^0, \quad \sum_{a,a'} G_{0a}^0 G_{a'0}^0 = 18(G_{01}^0)^2.$$

Таким образом,

$$\delta G_{00}^{(d)} = \frac{1}{D_d} \left\{ \widetilde{M}_d^{11}(G_{00}^0)^2 + 2(\widetilde{M}_d^{12} + \widetilde{M}_d^{21})G_{00}^0 G_{01}^0 + \frac{9}{2}\widetilde{M}_d^{22}(G_{01}^0)^2 \right\}$$

и

$$\delta D^{(d)}(\omega, 0) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \{ \delta G_{00}^{(d)}(\omega + i\varepsilon) \}.$$

Для узлов $i = 1, 2$ мы имеем

$$\delta G_{11}^{(d)} = \frac{1}{D_d} \left\{ \widetilde{M}_d^{11}(G_{01}^0)^2 + \frac{1}{2}(\widetilde{M}_d^{12} + \widetilde{M}_d^{21})G_{01}^0 (G_{11}^0 + 2G_{12}^0 + G_{13}^0) + \frac{1}{4}\widetilde{M}_d^{22} \sum_{a,a'} G_{1a}^0 G_{a'1}^0 \right\}$$

и

$$\delta D^{(d)}(\omega, \pm a_x) = \delta D^{(d)}(\omega, \pm a_y) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \{ \delta G_{11}^{(d)}(\omega + i\varepsilon) \}.$$

Для узла $i = a_2$ мы получаем величины

$$\begin{aligned} \sum_a G_{aa_2}^0 &= 2(G_{1a_2}^0 + G_{3a_2}^0), \\ \sum_{a,a'} G_{a_2a}^0 G_{a'a_2}^0 &= 6(G_{1a_2}^0)^2 + 4(G_{3a_2}^0)^2 + 4G_{1a_2}^0 G_{3a_2}^0 + 4G_{2a_2}^0 G_{3a_2}^0, \end{aligned}$$

которые содержатся в следующем выражении:

$$\delta G_{a_2a_2}^{(d)} = \frac{1}{D_d} \left\{ \widetilde{M}_d^{11} (G_{0a_2}^0)^2 + (\widetilde{M}_d^{12} + \widetilde{M}_d^{21}) G_{0a_2}^0 (G_{1a_2}^0 + G_{3a_2}^0) + \frac{1}{4} \sum_{a,a'} G_{a_2a}^0 G_{a'a_2}^0 \right\}$$

и

$$\delta D^{(d)}(\omega, a_2) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \{ \delta G_{a_2a_2}^{(d)}(\omega + i\varepsilon) \}.$$

3.4. Функции Грина идеальной решетки. Чтобы изучать плотность состояний и локальную плотность состояний, нам понадобятся функция Грина нулевого порядка $G_{ij}^{0,n}(\omega)$ в нормальной фазе и функция Грина нулевого порядка $G_{ij}^0(\omega)$ в сверхпроводящей фазе. В нормальной фазе функция Грина $G_{ij}^{0,n}(\omega)$ удовлетворяет уравнениям [4]

$$\sum_a G_{a1}^{0,n}(\omega) = 4\omega G_{01}^{0,n}(\omega), \quad G_{01}^{0,n}(\omega) = \omega G_{00}^{0,n}(\omega) - 1,$$

где

$$G_{00}^0(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\omega - \varepsilon(\mathbf{q})}.$$

Здесь спектр квазичастицы в нормальной фазе задается выражениями $\varepsilon(\mathbf{q}) = \gamma(\mathbf{q}) = (1/2)(\cos q_x + \cos q_y)$, где энергия измеряется в единицах полуширины зоны $w = 4\tilde{t}$ и мы полагаем, что $\tilde{\varepsilon} = 0$.

В сверхпроводящей фазе функцию Грина нулевого порядка $G_{ij}^0(\omega)$ можно вычислить с помощью преобразования Фурье:

$$G_{ij}^0(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} G^0(\mathbf{q}, \omega) \cos \mathbf{q}(\mathbf{i} - \mathbf{j}). \quad (36)$$

Соответствующую функцию Грина идеальной решетки в $\{\mathbf{q}\}$ -представлении можно записать следующим образом:

$$G^0(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\omega + \varepsilon(\mathbf{q})}{\omega^2 - E_\sigma^2(\mathbf{q})} = u_{\mathbf{q}}^2 \frac{1}{\omega - E_\sigma(\mathbf{q})} + v_{\mathbf{q}}^2 \frac{1}{\omega + E_\sigma(\mathbf{q})}. \quad (37)$$

Здесь мы вводим энергию квазичастицы $E_\sigma(\mathbf{q}) = \sqrt{\varepsilon(\mathbf{q})^2 + \Delta_\sigma(\mathbf{q})^2}$ и параметры Боголюбова

$$u_{\mathbf{q}}^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\varepsilon(\mathbf{q})}{E_\sigma(\mathbf{q})} \right), \quad v_{\mathbf{q}}^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\varepsilon(\mathbf{q})}{E_\sigma(\mathbf{q})} \right).$$

Сверхпроводящая щель $\Delta_\sigma(\mathbf{q})$ описывается уравнением

$$\Delta_\sigma(\mathbf{q}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} J(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \frac{\Delta_\sigma(\mathbf{q})}{2E_\sigma(\mathbf{q})} \operatorname{th} \left(\frac{E_\sigma(\mathbf{q})}{2T} \right),$$

где $J(\mathbf{q}) = 4J\gamma(\mathbf{q})$. Решение уравнения щели в случае d -волнового спаривания изучается во многих работах (см., например, [15]–[17]).

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе мы рассмотрели микроскопическую модель плоскости CuO_2 с примесями Zn [3] и обобщили вычисления электронного спектра [4] на случай сверхпроводящей фазы. Используя технику проектирования в методе уравнения движения для нормальной и аномальной функций Грина, мы получили соответствующую T -матрицу рассеяния. В качестве потенциала рассеяния, в дополнение к диагональным элементам матрицы возмущений V (5), (10), она также содержит часть $\Phi(\omega)$, зависящую от ω и заданную уравнением (16), которая содержит и недиагональный элемент матрицы возмущений (5), (9). Это зависящее от ω возмущение не рассматривалось в более ранних работах [6]–[13].

Проводя симметричный анализ, в п. 3.1 мы полностью учли d -симметрию электронных волновых функций в узлах Cu исходной решетки и в результате получили парциальные вклады с симметрией $\mu = (s, p, d)$ для волновых функций [4], потенциалов рассеяния V_μ и ϕ_μ (21), (22), матрицы рассеяния M_μ (33)–(35), матрицы Φ_μ (П.3) и функций Грина (23)–(29). Таким образом, мы вывели аналитические выражения для полной плотности состояний и для локальной плотности состояний в виде отдельных вкладов от s -, p - и d -волн.

Зависимость от ω в этих формулах выражается через функции Грина нулевого порядка в сверхпроводящей фазе, а в случае d -симметрии также через функции Грина в нормальной фазе. Ее можно вычислить с помощью преобразования Фурье (36) и известных соответствующих образов Фурье $G^0(\mathbf{q}, \omega)$ в (37). Вычисления можно в значительной степени упростить, используя соответствующие аналитические выражения для функций Грина через эллиптические интегралы [4], что будет сделано в одной из последующих работ. Можно ожидать, что для различных значений ω (или значений смещающего напряжения в экспериментах с использованием сканирующего туннельного микроскопа, $\omega = eV$) различные парциальные вклады от s -, p -, d -симметрии будут преобладать в измеряемых локальной плотности состояний и плотности состояний. Такие парциальные вклады не рассматривались в работах [6]–[13]. Наконец, следует отметить, что наши вычисления проводились без подгонки параметров, в отличие от феноменологических подходов [6]–[13].

ПРИЛОЖЕНИЕ

Прямоугольные матрицы T_μ состоят из столбцов соответствующей унитарной матрицы (подробнее см. [4]), т.е. имеют следующий вид:

$$T_s = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad T_p = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad T_d = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1/2 \\ 0 & 1/2 \\ 0 & 1/2 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix}. \quad (\text{П.1})$$

Ненулевые компоненты матриц возмущений V и ϕ имеют вид

$$V = \begin{pmatrix} V_{00} & V_{01} & V_{01} & V_{01} & V_{01} \\ V_{01} & V_{11} & 0 & 0 & 0 \\ V_{01} & 0 & V_{11} & 0 & 0 \\ V_{01} & 0 & 0 & V_{11} & 0 \\ V_{01} & 0 & 0 & 0 & V_{11} \end{pmatrix}, \quad \phi = \Delta_{01}^{\sigma} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 1 & -1 & 1 \\ -1 & -\theta & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & \theta & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & -\theta & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \theta \end{pmatrix}, \quad (\text{П.2})$$

где $\theta = 2t/J$ и матричные элементы V_{ij} даны в (9).

Элементы d -волновой части зависящего от ω возмущения имеют вид

$$\begin{aligned} \Phi_d^{11} &= -4\Delta_{01}^2 \left\{ 8G_{01}^{0,n}(-\omega)V_{01} \sum_a G_{a1}^{0,n}(-\omega) + \right. \\ &\quad \left. + 4[G_{01}^{0,n}(-\omega)]^2 V_{00} + V_{11} \left[\sum_a G_{a1}^{0,n}(-\omega) \right]^2 \right\}, \\ \Phi_d^{12} &= -8\Delta_{01}^2 \left\{ V_{00}G_{01}^{0,n}(-\omega)G_{00}^{0,n}(-\omega) + 4V_{01}[G_{01}^{0,n}(-\omega)]^2 + \right. \\ &\quad \left. + V_{01}G_{00}^{0,n}(-\omega) \sum_a G_{a1}^{0,n}(-\omega) + V_{11} \sum_a G_{a1}^{0,n}(-\omega)G_{01}^{0,n}(-\omega) \right\}, \\ \Phi_d^{21} &= -16\phi_{01}\Delta_{01}G_{a1}^{0,n}(-\omega) - 8\Delta_{01}^2 \left\{ V_{00}G_{01}^{0,n}(-\omega)G_{00}^{0,n}(-\omega) + \right. \\ &\quad \left. + V_{01}G_{00}^{0,n}(-\omega) \sum_a G_{a1}^{0,n}(-\omega) + \right. \\ &\quad \left. + 4V_{01}[G_{01}^{0,n}(-\omega)]^2 + V_{11}G_{01}^{0,n}(-\omega) \sum_a G_{a1}^{0,n}(-\omega) \right\}, \\ \Phi_d^{22} &= -4\Delta_{01}^2 \{ 8V_{01}G_{00}^{0,n}(-\omega)G_{01}^{0,n}(-\omega) + V_{00}[G_{00}^{0,n}(-\omega)]^2 + 4V_{11}[G_{01}^{0,n}(-\omega)]^2 \}. \end{aligned} \quad (\text{П.3})$$

Благодарности. Ж. Ковачевич выражает благодарность дирекции Объединенного института ядерных исследований за гостеприимство и Факультету естественных наук Университета Монтенегро за финансовую поддержку. Работа выполнена при частичной финансовой поддержке со стороны программы Гейзенберга–Ландау Лаборатории теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова в ОИЯИ.

Список литературы

- [1] *N. M. Plakida.* High-Temperature Superconductors. Berlin: Springer, 1995.
- [2] *Ю. А. Изюмов.* УФН. 1999. Т. 169. С. 225.
- [3] *Ž. Kovačević, R. Hayn, N. M. Plakida.* Eur. Phys. J. B. 1999. V. 10. P. 487.
- [4] *Ž. Kovačević, I. Chaplygin, R. Hayn, N. M. Plakida.* Eur. Phys. J. B. 2000. V. 18. P. 377.
- [5] *N. Miyakawa, P. Guptasarma, J. F. Zasadinski, D. G. Hinks, K. E. Gray.* Phys. Rev. Lett. 1998. V. 80. P. 157; *A. Yazdani, C. M. Howald, C. P. Lutz, A. Kapitulnik, D. M. Eigler.* Phys. Rev. Lett. 1999. V. 83. P. 176; *S. H. Pan, E. W. Hudson, K. M. Lang, H. Eisaki, S. Uchida, J. C. Davis.* Nature. 2000. V. 403. P. 746; *E. W. Hudson, K. M. Lang, V. Madhavan, S. H. Pan, H. Eisaki, S. Uchida, J. C. Davis.* Nature. 2001. V. 411. P. 920.
- [6] *M. I. Salkola, A. V. Balatsky, D. J. Scalapino.* Phys. Rev. Lett. 1996. V. 77. P. 1841.

- [7] *M. I. Salkola, A. V. Balatsky, J. R. Scrieffer.* Phys. Rev. B. 1997. V. 55. P. 12648.
- [8] *M. E. Flatté, J. M. Byers.* Phys. Rev. Lett. 1997. V. 78. P. 3761.
- [9] *M. E. Flatté, J. M. Byers.* Phys. Rev. Lett. 1998. V. 80. P. 4546; *G. B. Martins, M. Laukamp, J. Riera, E. Dagotto.* Phys. Rev. Lett. 1997. V. 78. P. 3563.
- [10] *S. Haas, K. Maki.* Phys. Rev. Lett. 2000. V. 85. P. 2172.
- [11] *G.-M. Zhang, H. Hu, L. Yu.* Phys. Rev. Lett. 2001. V. 86. P. 704.
- [12] *W. Hofstetter, R. Bulla, D. Vollhardt.* Phys. Rev. Lett. 2000. V. 84. P. 4417.
- [13] *A. Polkovnikov, S. Sachdev, M. Vojta.* Phys. Rev. Lett. 2001. V. 86. P. 296.
- [14] *W. Ziegler, D. Poilblanc, R. Preuss, W. Hanke, D. J. Scalapino.* Phys. Rev. B. 1996. V. 53. P. 8704; *D. Poilblanc, D. J. Scalapino, W. Hanke.* Phys. Rev. Lett. 1994. V. 72. P. 884; *G. K. Khaliullin, R. Kilian, S. Krivenko, P. Fulde.* Phys. Rev. B. 1997. V. 56. P. 11882.
- [15] *N. M. Plakida, V. Yu. Yushankhai, I. V. Stasyuk.* Physica C. 1989. V. 160. P. 80; *V. Yu. Yushankhai, N. M. Plakida, P. Kalinay.* Physica C. 1991. V. 174. P. 401.
- [16] *N. M. Plakida, V. S. Oudovenko.* Phys. Rev. B. 1999. V. 59. P. 11949.
- [17] *Н. М. Плакида.* Письма в ЖЭТФ. 2001. Т. 74. С. 38.
- [18] *N. M. Plakida, L. Anton, S. Adam, Gh. Adam.* Exchange and spin-fluctuation superconducting pairing in the Hubbard model in the strong correlation limit. Preprint JINR № E17-2001-59. Dubna: JINR, 2001; Exchange and spin-fluctuation superconducting pairing in cuprates. cond-mat/0104234; *Н. М. Плакида, Л. Антон, С. Адам, Дж. Адам.* ЖЭТФ. 2003. Т. 124. № 8. С. 367.
- [19] *Д. Н. Зубарев.* УФН. 1960. Т. 71. С. 71.
- [20] *Ю. А. Изюмов, М. В. Медведев.* Теория магнито-упорядоченных кристаллов с примесями. М.: Наука, 1970.

Поступила в редакцию 2.IX.2002 г.