

## Триплетная сверхпроводимость в $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ в рамках $t-J-I$ -модели

© Е.В. Кузьмин, С.Г. Овчинников\*

Красноярский государственный университет,  
660062 Красноярск, Россия

\* Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук,  
660036 Красноярск, Россия

E-mail: sgo@post.krascience.rssi.ru

(Поступила в Редакцию 11 марта 1999 г.)

Предложена обобщенная  $t-J-I$ -модель для  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ , учитывающая сильные внутриатомные корреляции  $d$ -электронов и особенности электронной структуры  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ . В пределе сильных корреляций показано, что синглетные решения  $s$ -типа для сверхпроводящего состояния отсутствуют, а триплетные существуют благодаря ферромагнитным спиновым корреляциям. Для типичных значений параметров модели значение  $T_c \sim 1$  К, что согласуется с величиной  $T_c$  для  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ .

Сверхпроводимость в  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ , несмотря на низкие  $T_c \sim 1$  К [1], привлекает большое внимание по двум причинам. Во-первых, это единственный сверхпроводящий оксид, изоструктурный  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ , который не содержит меди, и поэтому сопоставление с ВТСП оксидами может прояснить вопрос о специфике меди. Во-вторых, сверхпроводящее состояние в  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  аналогично сверхтекучему  $^3\text{He}$  и имеет  $p$ -тип спаривания [2,3]. В рамках зонной теории триплетная сверхпроводимость в  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  описана в работе [4] как следствие спаривания, индуцированного ферромагнитными спиновыми флуктуациями. Заранее было неясно, сохранится ли триплетное состояние при учете сильных электронных корреляций, наличие которых следует из большой эффективной массы электронов в  $\gamma$ -зоне ( $12m_e$  по данным квантовых осцилляций [5]) и из близости  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  к границе перехода Мотта–Хаббарда (изоструктурный изоэлектронный кристалл  $\text{Sr}_2\text{FeO}_4$  является моттовским диэлектриком [6]). В настоящей работе предложено обобщение  $t-J$ -модели сильно коррелированных электронов в виде добавочного ферромагнитного обменного ( $I$ ) слагаемого, обусловленного спецификой электронной структуры, и показано, что в режиме сильных корреляций имеются триплетные решения для сверхпроводящего параметра порядка с  $T_c \sim 1$  К при типичных значениях параметров модели. Синглетные решения  $s$ -типа отсутствуют, поскольку не удовлетворяют правилу сумм.

Для оксидов меди характерна  $(d_{x^2-y^2}-p)-\sigma$  связь, при которой взаимодействие соседних спинов меди возникает только как косвенное ( $t-J$ -модель,  $J \sim t^2/U$ ). Специфика  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  в том, что в окрестности уровня Ферми лежат зоны, образованные  $\pi$ -связью типа  $(d_{xy}-p)$  [7,8]. Простой квантово-химический анализ показывает, что в этом случае имеется перекрытие  $d_{xy}$ -орбиталей соседних катионов, приводящее к обменному взаимодействию гейзенберговского типа, кроме косвенного взаимодействия через кислород. Для описания сильно коррелированных электронных состояний с развитыми ферромагнитными флуктуациями мы предлагаем обобщенную

$t-J-I$ -модель с гамильтонианом

$$H = \sum_{\mathbf{f},\sigma} (\varepsilon - \mu) X_{\mathbf{f}}^{\sigma,\sigma} - t \sum_{\mathbf{f},\delta,\sigma} X_{\mathbf{f}}^{\sigma,0} X_{\mathbf{f}+\delta}^{0,\sigma} + J \sum_{\mathbf{f},\delta} K_{\mathbf{f},\mathbf{f}+\delta}^{(-)} - I \sum_{\mathbf{f},\delta} K_{\mathbf{f},\mathbf{f}+\delta}^{(+)},$$

$$K_{\mathbf{f},g}^{\pm} = \hat{S}_{\mathbf{f}} \hat{S}_{\mathbf{g}} \pm \frac{1}{4} \hat{n}_{\mathbf{f}} \hat{n}_{\mathbf{g}}, \quad (1)$$

здесь введены операторы Хаббарда  $X_{\mathbf{f}}^{pq} = |p\rangle\langle q|$ , действующие на внутриатомные состояния  $|0\rangle$  (нет дырок) и  $|\sigma\rangle$  (дырка со спином  $\sigma = \pm 1/2$ ) и автоматически исключающие двухчастичные состояния,  $\hat{S}_{\mathbf{f}}$  и  $\hat{n}_{\mathbf{f}}$  — операторы спина и числа частиц на узле  $\mathbf{f}$ . Знаки в (1) выбраны так, чтобы все параметры ( $t, J, I$ ) были положительны, для простоты оставлено суммирование только по ближайшим соседям (вектор  $\delta$ ). В режиме бесконечно больших корреляций  $U \rightarrow \infty$  антиферромагнитный обмен  $J \rightarrow 0$ . Мы ограничимся случаем  $I > J$ . Концентрация электронов  $n_e = N_e/N$  меняется в пределах  $0 \leq n_e \leq 1$ . При  $n_e \rightarrow 1$  кинетическая энергия обращается в нуль и существует диэлектрическое состояние с дальним ферромагнитным порядком. С ростом концентрации дырок ферромагнетизм разрушается и возможно появление сверхпроводящего состояния.

Гамильтониан (1) описывает квазичастицы в нижней хаббардовской зоне. Для сравнения с  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  нужно пояснить, что дырочная  $\alpha$ - и электронная  $\beta$ -зоны в такой модели являются резервуаром частиц и определяют химпотенциал. Электронная  $\alpha$ -зона, которая и ответственна за сверхпроводимость [9], расщепляется при учете сильных электронных корреляций на нижнюю и верхнюю хаббардовские зоны. Согласно расчетам [8],  $\beta$ -зона заполнена наполовину,  $\alpha$ -зона содержит  $n_{\alpha} = 0.28$  дырок и  $\gamma$ -зона заполнена электронами немного выше середины  $n_{e\gamma} = 1.28$ . Это означает, что в электронном представлении нижняя хаббардовская  $\gamma$ -зона заполнена полностью, а верхняя содержит 0.28 электронов. Мы будем работать

в дырочном представлении, тогда число дырок в нижней хаббардовской зоне  $n_h = 1 - n_\alpha$ ,  $0 \leq n_h \leq 1$ .

Точное уравнение движения для оператора  $X_{k\sigma}$ -фурье-образца оператора  $X_f^{0\sigma}$ , имеет вид ( $\hbar = 1$ )

$$\begin{aligned} i\dot{X}_{k\sigma} &= \xi_k X_{k\sigma} + L_{k\sigma}, \\ L_{k\sigma} &= -\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_p \gamma_p (X_{k-p}^{-\sigma, \sigma} X_{p, -\sigma} - X_{k-p}^{-\sigma, -\sigma} X_{p, \sigma}) \\ &+ \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_p \gamma_{k-p} [(g - \lambda) X_{k-p}^{-\sigma, \sigma} X_{p, -\sigma} \\ &- g X_{k-p}^{-\sigma, -\sigma} X_{p, \sigma} - \lambda X_{k-p}^{\sigma, \sigma} X_{p, \sigma}], \end{aligned} \quad (2)$$

где  $\xi_k = -\gamma_k - \bar{\mu}$ ,  $\gamma_k = z^{-1} \sum_{\delta} \exp(i\mathbf{k}\delta)$ ,  $g = J/t$ ,  $\lambda = I/t$ .

Здесь все энергии выражены в единицах  $zt$  (полуширина зоны),  $\bar{\mu} = (\mu - \varepsilon)/zt$ ,  $z$  — число ближайших соседей.

Удобной процедурой линеаризации нелинейного оператора  $L$  с выделением как нормальных, так и аномальных средних является метод неприводимых операторов [10]

$$\begin{aligned} L_{k\sigma} &= \bar{L}_{k\sigma} - \frac{\langle \{L_{k\sigma}, X_{k\sigma}^+\}_+ \rangle}{\langle \{X_{k\sigma}, X_{k\sigma}^+\}_+ \rangle} X_{k\sigma} \\ &- \frac{\langle \{L_{k\sigma}, X_{-k, -\sigma}^+\}_+ \rangle}{\langle \{X_{-k, -\sigma}^+, X_{-k, -\sigma}^+\}_+ \rangle} X_{-k, -\sigma}^+. \end{aligned} \quad (3)$$

Пренебрегая неприводимой частью  $\bar{L}_{k\sigma}$ , запишем уравнения движения в приближении среднего поля

$$\begin{aligned} i\dot{X}_{k, \uparrow} &= \tilde{\xi}_k X_{k, \uparrow} - \frac{\Delta_k}{c(n)} X_{-k, \downarrow}^+, \\ i\dot{X}_{-k, \downarrow}^+ &= -\tilde{\xi}_k X_{-k, \downarrow}^+ - \frac{\Delta_k^*}{c(n)} X_{k, \uparrow}. \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь перенормировка закона дисперсии учтена в простейшем виде "Хаббард 1" для немагнитного состояния  $n_\uparrow = n_\downarrow = n_h/2$ ,  $c(n) = 1 - n_h/2$ ,

$$\tilde{\xi}_k = c(n)(-\gamma_k - m), \quad m = [(g + \lambda)n/2 + \bar{\mu}]/c(n), \quad (5)$$

величина  $m$  есть эффективный химпотенциал. Выражение для щели имеет вид

$$\begin{aligned} \Delta_k &= \Delta_{-k, \downarrow} = -\Delta_{k, \uparrow}, \\ \Delta_k &= \frac{2}{N} \sum_p (-\gamma_p + \frac{1}{2}(\gamma_{k+p} + \gamma_{k-p})) B_p \\ &- \frac{\lambda}{N} \sum_p \gamma_{k+p} B_p, \end{aligned} \quad (6)$$

где введено аномальное среднее  $B_p = \langle X_{-p, \downarrow} X_{p, \uparrow} \rangle$ . Выписывая стандартным образом решения системы уравнений Горькова для нормальной и аномальной функций Грина,

получим следующие выражения для средних в сверхпроводящей фазе:

$$n_k = \langle X_{k, \uparrow}^+ X_{k, \uparrow} \rangle = c(n) \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\tilde{\xi}_k}{E_k} \text{th} \frac{E_k}{2\tau} \right) \equiv c(n) f_k, \quad (7)$$

$$kB_k^* = \langle X_{k, \uparrow}^+ X_{-k, \downarrow}^+ \rangle = \frac{\Delta_k^*}{2E_k} \text{th} \frac{E_k}{2\tau}, \quad (8)$$

здесь  $E_k^2 = \tilde{\xi}_k^2 + |\Delta_k|^2/c^2(n)$ ,  $\tau = k_B T/zt$  — безразмерная температура. Помимо обычных уравнений самосогласования для химпотенциала и щели  $\Delta_k$  в теории сильно коррелированных систем необходимо учитывать правило сумм для аномальных средних (следствие алгебры  $X$ -операторов, исключаяющей двухчастичные состояния)

$$\frac{1}{N} \sum_k B_k = 0. \quad (9)$$

Разбивая аномальные средние на сумму симметричных и антисимметричных составляющих

$$B_p = B_p^{(S)} + B_p^{(A)}, \quad B_p^{(S)} = B_{-p}^{(S)}, \quad B_{-p}^{(A)} = -B_p^{(A)},$$

легко записать выражение для щели в виде

$$\begin{aligned} \Delta_k &= \alpha_k \Delta_S + \lambda_k \Delta_a, \\ \alpha_k &= 2 - (2g - \lambda)\gamma_k, \quad \lambda_k = \lambda S_k, \\ S_k &= (\sin k_x + \sin k_y)/2. \end{aligned} \quad (10)$$

Симметричные решения  $\Delta_k^{(S)} = \alpha_k \Delta_S$  соответствуют синглетному спариванию, а антисимметричные  $\Delta_k^{(A)} = \lambda_k \Delta_a$  — триплетному. Первое слагаемое в  $\alpha_k$ , равное 2, обусловлено кинематическим механизмом спаривания [11]. Легко видеть, что симметричное решение не удовлетворяет правилу сумм [12]. В то же время для антисимметричного решения это правило выполняется автоматически. Параметр порядка  $\Delta_\alpha$  может быть записан в виде

$$\Delta_\alpha = \frac{i}{\sqrt{2}z} \sum_{\delta} \frac{1}{N} \sum_f \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} (X_{f, \downarrow}^{0, \downarrow} X_{f+\delta, \uparrow}^{0, \uparrow} - X_{f+\delta, \downarrow}^{0, \downarrow} X_f^{0, \uparrow}) \right\rangle, \quad (11)$$

содержащем среднее от оператора уничтожения триплетной пары с  $S^z = 0$  на соседних узлах решетки. Для этого решения имеем при  $T = 0$  уравнения для щели

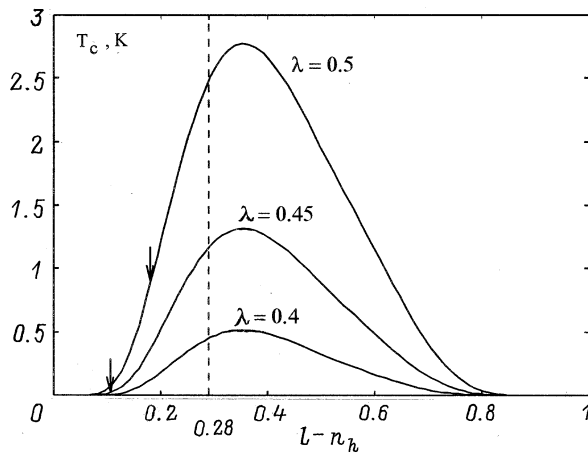
$$\frac{2 - n_h}{\lambda} = \frac{1}{N} \sum_p \frac{S_p^2}{\sqrt{(\gamma_p + m)^2 + S_p^2 D_a^2}} \quad (12)$$

и химпотенциала

$$\frac{n_h}{2 - n_h} = \frac{1}{2N} \sum_p \left( 1 + \frac{\gamma_p + m}{\sqrt{(\gamma_p + m)^2 + S_p^2 D_a^2}} \right), \quad (13)$$

где  $D_a^2 = \lambda^2 |\Delta_a|^2/c^4(n)$ , имеющие решения только при  $\lambda > 0$ . Уравнения для  $T_c$  имеют вид

$$\frac{2 - n_h}{\lambda} = \frac{1}{N} \sum_p \frac{S_p^2}{|\gamma_p + m|} \text{th} \left\{ \frac{c(n) |\gamma_p + m|}{2\tau_c} \right\}. \quad (14)$$



Зависимость  $T_c$  от концентрации дырок в  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  при трех значениях безразмерного параметра взаимодействия  $\lambda$ ; штриховая линия — дырочная концентрация в  $\gamma$ -зоне, полуширина которой равна  $0.4 \text{ eV}$ .

Численные решения уравнений (12)–(14) показывают, что щель и  $T_c$  немонотонно зависят от концентрации дырок, отличны от нуля в конечном интервале концентраций ( $n_{h1}, n_{h2}$ ), границы которого зависят от константы взаимодействия  $\lambda$ . Эти зависимости характеризуются плавным максимумом в окрестности заполнения  $n_h \approx 0.7\text{--}0.8$ . Для  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  с  $n_h = 1 - n_\alpha$ ,  $n_\alpha \approx 0.28$  это означает близость к оптимальному допированию. Величина  $T_c \sim 1 \text{ K}$  для типичных значений параметров модели. Так, для  $t = 0.1 \text{ eV}$ ,  $n_\alpha = 0.28$  и  $\lambda = 0.5$   $T_c \approx 2 \text{ K}$ .

В отличие от теории БКШ в уравнениях (12)–(14) существенна вся зона, а не только узкий слой в окрестности химпотенциала. Аналитическое решение для  $T_c$  может быть записано приближенно, если при интегрировании по энергиям в (14) выделить узкий слой шириной  $2\delta$  около химпотенциала,  $\delta \approx 10^{-2}$ , где получается обычный логарифм, а вне этого слоя  $\text{th} x \approx 1$ . В результате получаем для  $T_c$  выражение

$$T_c = 1.14ztc(n)\delta \exp \left\{ \frac{-c(n)}{(\lambda + \lambda_0)S^2(m)} \right\} \quad (15)$$

со значениями, отличающимися на единицы процентов от численного решения. В (15) параметр  $\lambda_0$  описывает вклад от внешней части зоны

$$\lambda_0 = \lambda^2 \frac{A(m, \delta)}{2 - n_h - \lambda A(m, \delta)},$$

$$A(m, \delta) = \int_{-1}^{m-\delta} \frac{S^2(\omega)d\omega}{|\omega - m|} + \int_{m+\delta}^1 \frac{S^2(\omega)d\omega}{|\omega - m|}, \quad (16)$$

где  $S^2(\omega)$  — среднее значение  $S_k^2$  на изоэнергетической поверхности  $\omega = \gamma_k$ . Зависимость  $T_c$  от концентрации дырок при различных значениях параметра  $\lambda$  показана на рисунке. Стрелки указывают точку перехода в ферромагнитную фазу, определяющуюся сравнением энергий ферромагнитной и сверхпроводящей фаз.

В заключение отметим, что обобщение  $t$ – $J$ -модели добавкой ферромагнитного взаимодействия соседних спинов дает  $t$ – $J$ – $I$ -модель, которая представляется реалистичной моделью для описания сильно коррелированных электронов  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ . Триpletная сверхпроводимость, полученная ранее в рамках зонной картины  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  [4], сохраняется и в режиме сильных электронных корреляций. Заметим, что ранее была сделана попытка описать нефононный механизм сверхпроводимости в  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  в режиме сильных электронных корреляций [13], однако вопрос о симметрии параметра порядка и роли ферромагнитных флуктуаций в работе [13] не рассматривался.

Работа выполнена при финансовой поддержке федеральной целевой программы "Государственная поддержка интеграции фундаментальной науки и высшего образования" (грант № 69) и Красноярского краевого фонда науки (грант 8F32).

## Список литературы

- [1] Y. Maeno, H. Hasimoto, K. Yoshida, S. Nichizaki, T. Fujita, J.G. Bednorz, F. Lichtenberg. *Nature* **372**, 5, 532 (1994).
- [2] T.M. Rice, M. Sigrist. *J. Phys. Cond. Matter* **7**, 9, L643 (1995).
- [3] T.M. Rice. *Nature* **396**, 5, 627 (1998).
- [4] I.I. Mazin, D.J. Singh. *Phys. Rev. Lett.* **79**, 4, 733 (1997).
- [5] A.P. Mackenzie, S.R. Julian, A.J. Diver, G.J. McMullan, M.P. Ray, G.G. Lonzarich, Y. Maeno, S. Nishitaki, T. Fujita. *Phys. Rev. Lett.* **76**, 20, 3786 (1996).
- [6] P. Adler, A.F. Goncharov, K. Syassen, E. Schonher. *Phys. Rev.* **B50**, 16, 11396 (1994).
- [7] T. Oguchi. *Phys. Rev.* **B51**, 4, 1385 (1995).
- [8] D.J. Singh. *Phys. Rev.* **B52**, 4, 1358 (1995).
- [9] T.M. Riseman, P.G. Kealey, E.M. Forgan, A.P. Mackenzie, L.M. Galvin, A.W. Tyler, S.L. Lee, C. Ager, D. Mck. Paul, C.M. Aegerter, R. Cubitt, Z.O. Mao, T. Akima, Y. Maeno. *Nature* **396**, 3, 242 (1998).
- [10] С.В. Тябликов. *Методы квантовой теории магнетизма*. Наука, М. (1975).
- [11] Р.О. Зайцев, В.А. Иванов. *ФТТ* **29**, 8, 2554 (1987).
- [12] N.M. Placida, V.Yu. Yushanhai, I.V. Stasyk. *Physica* **C160**, 1, 80 (1989).
- [13] R.O. Zaitsev, Ju.V. Mihailova. *Physica* **C282–287**, 1677 (1997).