

# БЕСЩЕЛЕВАЯ КИРАЛЬНАЯ СВЕРХПРОВОДЯЩАЯ $d + id$ -ФАЗА В СЛОИСТЫХ СИЛЬНО КОРРЕЛИРОВАННЫХ МАТЕРИАЛАХ С ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКОЙ

*В. В. Вальков*<sup>a\*</sup>, *Т. А. Валькова*<sup>b</sup>, *В. А. Мицкан*<sup>b,c</sup>

<sup>a</sup> *Институт физики им. Л. В. Киренского,  
ФИЦ КНЦ Сибирского отделения Российской академии наук  
660036, Красноярск, Россия*

<sup>b</sup> *Сибирский федеральный университет  
660041, Красноярск, Россия*

<sup>c</sup> *Сибирский государственный университет науки и технологий им. М. Ф. Решетнёва  
660037, Красноярск, Россия*

Поступила в редакцию 4 июля 2019 г.,  
после переработки 26 августа 2019 г.  
Принята к публикации 27 августа 2019 г.

Показано, что учет межслоевого туннелирования электронов в квазидвумерном ансамбле фермионов Хаббарда приводит к реализации бесщелевой сверхпроводящей фазы с киральной  $d + id$ -симметрией параметра порядка не при одном значении концентрации ионов натрия, а в широком интервале. Именно такая ситуация соответствует экспериментальным данным в интеркалированном водой слоистом кобальтите натрия  $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ . Внутриаомное отталкивание электронов, определяя режим сильных электронных корреляций, приводит к представлению хаббардовских фермионов, взаимодействие между которыми обеспечивает куперовскую неустойчивость. Межузельные внутрислоевые взаимодействия между фермионами существенно влияют на положения нодальных точек кирального параметра порядка и изменяют критическую концентрацию, при которой происходит топологический переход в двумерной системе фермионов Хаббарда.

DOI: 10.31857/S004445102002008X

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Слоистые магнетики, в которых спины в плоскостях локализованы в узлах треугольной решетки, являются примером систем с квантовыми эффектами, проявляющимися на макроскопическом уровне. Это обусловлено сильно развитыми флуктуациями, являющимися следствием фрустрированных обменных связей на треугольной решетке, а также квазидвумерной структурой. Перечисленные факторы инициируют нетривиальные свойства слоистых материалов с треугольной решеткой и служат предметом повышенного интереса многих исследовательских групп [1–9].

В проводящих квазидвумерных сильно коррелированных материалах с треугольной решеткой

включение фермиевских степеней свободы приводит к новым нетривиальным явлениям. В качестве кандидата на основное состояние системы становится сверхпроводящая фаза [10] с киральным типом симметрии параметра порядка [11]. Такой тип симметрии в сочетании с неколлинеарным спиновым упорядочением приводит к возможности реализации нетривиальной топологии и майорановских мод [12–15]. Вследствие сильных электронных корреляций возникают дополнительные особенности электромагнитного отклика [16] и термодинамических свойств [17] в сверхпроводящей фазе, обусловленной обменом спиновых возбуждений [18]. Возможность реализации волны спиновой плотности в системе электронов, описываемой моделью Хаббарда [19] на треугольной решетке, может инициировать псевдощелевое поведение [20] такого электронного ансамбля. Реализация в подобных системах  $d$ -волновой сверхпроводимости подтверждалась расчетами, ос-

\* E-mail: vvv@iph.krasn.ru

нованными на динамических кластерных методах квантового Монте-Карло [21].

Открытие в интеркалированном водой слоистом кобальтите натрия  $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$  при  $T_c = 5$  К перехода в сверхпроводящую фазу с анизотропным параметром порядка [10] привело к значительному возрастанию экспериментальных [22–25] и теоретических [26–29] исследований свойств нормальной и сверхпроводящей фаз квазидвумерных материалов с треугольной решеткой.

В частности, большое внимание было уделено симметрии сверхпроводящего параметра порядка (СПП) (см. обзоры [30–32]). Поскольку симметрия треугольной решетки допускает реализацию кирального  $d_{x^2-y^2} + id_{xy}$ -типа симметрии СПП, возник вопрос о наличии (или отсутствии) щели в спектре фермиевских возбуждений такой сверхпроводящей фазы.

Считается, что одноорбитальная модель Хаббарда [19] является минимальной моделью для описания электронной структуры  $\text{CoO}_2$ -плоскости. В режиме сильных электронных корреляций, когда энергия внутриатомного кулоновского отталкивания электронов, характеризуемая параметром  $U$ , много больше абсолютной величины интегралов перескока  $t_{fm}$ , используется эффективная модель. Ее можно вывести, например, методом унитарного преобразования [33,34], либо по операторной форме теории возмущений в виде разложения по параметрам малости  $t_{fm}/U$ . При этом слагаемые второго порядка содержат двух- и трехцентровые операторы. При отбрасывании трехцентровых слагаемых получается так называемая  $t$ - $J$ -модель [33,34]. Если же трехцентровые слагаемые учитываются, то возникающую модель обозначают как  $t$ - $J^*$ -модель. Существенно, что трехцентровые слагаемые также пропорциональны  $(t_{fm}/U)^2$  и поэтому оказывают существенное влияние на условия реализации сверхпроводящей  $d$ -фазы [35].

Проведенные в рамках  $t$ - $J$ -модели исследования свойств сверхпроводящей фазы с комплексным параметром порядка на треугольной решетке [26–28] в совокупности с результатами других теоретических работ [30–32] показали необходимость корректировки выбранных способов описания сверхпроводящего состояния.

Причина этого становилась очевидной при попытке согласования временной эволюции спин-решеточной релаксации, полученной в ходе наблюдения ядерного магнитного резонанса в  $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$  с представлением о синглетной

природе куперовского спаривания и киральным  $d + id$ -типом симметрии СПП.

Дело заключалось в том, что в отмеченных работах взаимодействие между фермионами учитывалось только в пределах первой координационной сферы. В этом случае нодальные точки СПП располагаются только в центре и по краям зоны Бриллюэна. Поэтому спектр в сверхпроводящей фазе остается щелевым при любых величинах допирования, тогда как данные по спин-решеточной релаксации требовали, чтобы сверхпроводимость была бесщелевой.

Преодоление этого затруднения с указанием механизма реализации бесщелевого фермиевского спектра возбуждений в киральных  $d + id$ -сверхпроводниках с треугольной решеткой было предложено в работе [11]. Основная гипотеза авторов заключалась в том, что сверхпроводящее спаривание реализуется только для фермионов, находящихся на узлах, следующих за ближайшими. В этом случае нодальные точки СПП располагаются внутри зоны Бриллюэна. Тогда при концентрации фермионов, для которой контур Ферми нормальной фазы пересекает нули СПП, спектр сверхпроводящей фазы становится бесщелевым и характеризуется шестью дираковскими точками.

Однако предложенный механизм формирования бесщелевой  $d+id$ -сверхпроводимости, не говоря о его некоторой искусственности, решает отмеченную выше проблему лишь частично. Суть в том, что отмеченный сценарий формирования бесщелевой фазы реализуется только при одной концентрации фермионов, тогда как для экспериментального согласования теории и эксперимента требуется, чтобы бесщелевой спектр реализовывался в достаточно широкой области допирования ионами натрия.

Расширение возможностей формирования нодальных точек СПП внутри зоны Бриллюэна было достигнуто посредством рассмотрения более реальной ситуации, когда одновременно учитываются потенциалы куперовского спаривания фермионов из двух координационных сфер [36]. При таком подходе появляется зависимость положения нодальных точек СПП в зоне Бриллюэна как от параметров модели, так и, вообще говоря, от уровня допирования. Это существенно расширило функциональные возможности теории в направлении улучшения согласия с экспериментальными данными. Однако и в этом случае не достигалась главная цель: теоретическое описание бесщелевой киральной сверхпроводящей  $d + id$ -фазы для треугольной решетки в широком интервале допирования.

В данной работе предлагается решение отмеченной выше проблемы. Основная идея связана с учетом реального квазидвумерного характера кристаллографического строения рассматриваемых материалов. При этом существенным оказалось условие  $|t_{\perp}| \ll |t|$ , где  $t_{\perp}$  — параметр перескока электронов между ближайшими узлами в направлении, перпендикулярном слоям, а  $t$  — наибольший интеграл перескока электрона в плоскости слоя. В результате этого неравенства возникает ситуация, когда пропорциональная квадрату перескока сверхобменная связь между магнитоактивными ионами, находящимися в одном слое, существенно больше аналогичной связи между таковыми ионами, принадлежащими различным слоям. Это позволяет использовать модель, в которой спектр фермиевских возбуждений нормальной фазы формируется на основе квазидвумерного кристаллографического строения, тогда как по отношению к потенциалам сверхпроводящего спаривания эта модель описывает систему не связанных между собой слоев с треугольной решеткой.

Дальнейшее изложение статьи организовано следующим образом. В разд. 2 обсуждается модель электронного строения отдельного  $\text{CoO}_2$ -слоя при учете сильных электронных корреляций и осуществляется переход к ансамблю фермионов Хаббарда. Вывод уравнения самосогласования для сверхпроводящего параметра порядка в рамках диаграммной техники для операторов Хаббарда приведен в разд. 3. В разд. 4 рассмотрена область реализации киральной сверхпроводящей фазы в двумерном ансамбле фермионов Хаббарда и проанализированы возможные конфигурации нодальных точек сверхпроводящего параметра порядка. Концентрационная эволюция нодальных точек при учете межузельного кулоновского отталкивания фермионов рассмотрена в разд. 5. Раздел 6 посвящен демонстрации того, что учет межплоскостных перескоков в квазидвумерном ансамбле хаббардовских фермионов приводит к реализации бесщелевой киральной сверхпроводящей фазы в широкой концентрационной области, как это наблюдается в эксперименте. Суммирование результатов осуществлено в заключительном разделе.

## 2. КВАЗИДВУМЕРНЫЙ АНСАМБЛЬ ФЕРМИОНОВ ХАББАРДА

Номинально ионам кобальта в  $\text{CoO}_2$ -плоскостях соответствует четырехвалентное состояние ( $\text{Co}^{4+}$ ) с электронной конфигурацией  $3d^5$ . Наличие три-

гонального искажения приводит к тому, что нижний орбитальный триплет, сформированный в октаэдрическом кристаллическом поле, расщепляется на верхний синглетный и нижний двукратно вырожденный уровни. Соответственно этому четыре  $d$ -электрона иона  $\text{Co}^{4+}$  заполняют нижние состояния (с учетом спиновых степеней свободы), а оставшийся электрон при образовании слоя  $\text{CoO}_2$  участвует в заполнении зонных состояний, образованных в результате коллективизации верхних состояний.

Под влиянием внутриаомного кулоновского отталкивания электронов отмеченная простая картина зонных однофермионных состояний модифицируется. Главное проявление такой модификации, как известно, описывается в рамках одноорбитальной модели Хаббарда [19]. Однако этого не достаточно для отражения особенностей сверхпроводящей фазы кобальтита натрия (см. ниже), и необходимо принимать во внимание кулоновское взаимодействие электронов, находящихся на разных узлах. Поэтому в дальнейшем будет использоваться модель Шубина – Вонсовского [37–39]

$$H = \sum_{f\sigma} (\varepsilon - \mu) \hat{n}_{f\sigma} + \sum_f U \hat{n}_{f\uparrow} \hat{n}_{f\downarrow} + \sum_{fm\sigma} t_{fm} a_{f\sigma}^+ a_{m\sigma} + \sum_{fm} V_{fm} \hat{n}_f \hat{n}_m. \quad (1)$$

Здесь  $\hat{n}_{f\sigma} = a_{f\sigma}^+ a_{f\sigma}$  — оператор числа электронов с проекцией спина  $\sigma$  на узле  $f$  трехмерной решетки,  $a_{f\sigma}^+$  ( $a_{f\sigma}$ ) — оператор рождения (уничтожения) электрона с проекцией спина  $\sigma$  на узле  $f$ ;  $\varepsilon$  — затравочная энергия одноэлектронного состояния,  $\mu$  — химический потенциал системы электронов,  $U$  — энергия хаббардовского отталкивания электронов, находящихся на одной орбитали Ванье с противоположными проекциями спина.

Межузельное взаимодействие электронов описывается последним слагаемым второй строки в (1),  $\hat{n}_f = \hat{n}_{f\uparrow} + \hat{n}_{f\downarrow}$  — оператор полного числа электронов на узле  $f$ ,  $V_{fm}$  — параметр взаимодействия между электронами, находящимися на узлах  $f$  и  $m$ .

В операторе кинетической энергии параметр  $t_{fm}$  отражает интенсивность процесса перескока электрона из узла  $m$  в узел  $f$ .

Для  $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$  увеличение концентрации ионов натрия  $x$  приводит к переводу части ионов кобальта в состояние  $\text{Co}^{3+}$  с электронной конфигурацией  $3d^6$ . В соответствии с обсуждавшейся выше иерархией энергетических состояний электронов на ионах кобальта получаем, что допирование сопровождается заполнением верхней хаббардовской

подзоны. При этом в качестве одноузельного базиса для гильбертова подпространства служат однократно заполненные электронные состояния  $|\uparrow\rangle$  и  $|\downarrow\rangle$ , а также двоечные состояния  $|2\rangle$ .

Соответственно этому в режиме сильных электронных корреляций ( $U \gg |t_{fm}|, |t_{\perp}|$ ) при решении задачи о структуре коллективизированных фермиевских состояний в кобальтите натрия можно перейти к описанию на языке однократно и двукратно заполненных одноузельных состояний в рамках эффективного гамильтониана.

Переход к эффективному гамильтониану, действующему в усеченном гильбертовом пространстве, может быть строго реализован в рамках операторной формы теории возмущений [40].

При учете членов второго порядка малости по  $|t_{fm}|/U$  включительно получаем модель, представляющую ансамбль фермионов Хаббарда

$$H_{eff} = H_0 + \hat{T} + \hat{J} + \hat{J}^* + \hat{V}. \quad (2)$$

Первое слагаемое

$$H_0 = \sum_{f\sigma} (\varepsilon - \mu) X_f^{\sigma\sigma} + \sum_f (2\varepsilon + U - 2\mu) X_f^{22} \quad (3)$$

описывает в атомном представлении [41, 42] одно- и двухэлектронные состояния на узлах трехмерной решетки.

Оператор

$$\hat{T} = \sum_{fm\sigma} t_{fm} X_f^{2\bar{\sigma}} X_m^{\bar{\sigma}2} \quad (4)$$

учитывает процессы перескоков между узлами хаббардовских фермионов.

Третье слагаемое  $H_{eff}$  отражает возникновение во втором порядке теории возмущений обменной связи между ионами кобальта ( $J_{fm} = 2t_{fm} \cdot t_{mf}/U$ )

$$\hat{J} = \frac{1}{2} \sum_{fm\sigma} J_{fm} (X_f^{\bar{\sigma}\sigma} X_m^{\sigma\bar{\sigma}} - X_f^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} X_m^{\sigma\sigma}). \quad (5)$$

Оператор с трехцентровыми слагаемыми

$$\hat{J}^* = \sum_{\substack{fmg\sigma \\ (f \neq g)}} \frac{t_{fm} t_{mg}}{U} \times (X_f^{2\bar{\sigma}} X_m^{\sigma\sigma} X_g^{\bar{\sigma}2} - X_f^{2\bar{\sigma}} X_m^{\bar{\sigma}\sigma} X_g^{\sigma 2}), \quad (6)$$

получающийся в том же самом порядке теории возмущений, описывает коррелированные перескоки фермионов Хаббарда.

Корреляционная часть межузельного кулоновского взаимодействия между такими фермионами выражается посредством оператора

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{f\delta} V (\hat{n}_f - \langle \hat{n}_f \rangle) (\hat{n}_{f+\delta} - \langle \hat{n}_{f+\delta} \rangle), \quad (7)$$

в котором оператор числа электронов на узле  $f$  определяется выражением

$$\hat{n}_f = X_f^{\uparrow\uparrow} + X_f^{\downarrow\downarrow} + 2X_f^{22}.$$

Операторы Хаббарда  $X_f^{pq} = |f, p\rangle\langle f, q|$  определены обычным образом при использовании базиса атомных состояний, таких, что  $|f, p\rangle$  является одним из трех возможных состояний на узле  $f$ .

В дальнейшем кулоновское взаимодействие будет учитываться только для электронов, находящихся в пределах одного слоя. Кулоновское взаимодействие между электронами из разных слоев приниматься в расчет не будет из-за эффектов экранирования, поскольку при интеркалировании расстояние между слоями значительно увеличивается вследствие размещения молекул воды между плоскостями  $\text{CoO}_2$ .

По аналогичной причине считается, что межслоевое туннелирование электронов значительно слабее туннелирования электронов между узлами, находящимися в пределах одной  $\text{CoO}_2$ -плоскости. Соответственно этому параметр  $t_{\perp}$ , определяющий интенсивность перехода электрона между ближайшими узлами из соседних слоев, будет считаться по абсолютной величине много меньшим абсолютной величины параметра перескока в одной плоскости. Для простоты принимается, что межслоевые перескоки происходят только между узлами, находящимися в соседних слоях  $\text{CoO}_2$ .

При этом обменное взаимодействие между ионами кобальта, находящимися не в одном  $\text{CoO}_2$ -слое, не учитывается, поскольку из-за условия  $t_{\perp} \ll |t|$  ( $|t|$  — наибольший по абсолютной величине из параметров перескока  $|t_{fm}|$  внутри плоскости) межслоевой параметр обменной связи существенно меньше внутрислоевого. Межслоевое взаимодействие имеет значение при рассмотрении магнитоупорядоченной фазы при конечных температурах.

В дальнейшем межслоевые коррелированные перескоки не учитываются по причине, отмеченной при описании оператора  $\hat{J}$ .

С учетом сказанного приходим к выводу, что особенности сверхпроводящей фазы кобальтита натрия будут определяться особенностями квазидвумерного ансамбля фермионов Хаббарда с треугольной ре-

шеткой в слоях  $\text{CoO}_2$ . При этом учет сильных одноузельных электронных корреляций отразился в переходе к  $X$ -операторам, обладающим, как известно, иной алгеброй перестановочных соотношений. С этим обстоятельством связано использование введенного ранее понятия фермионов Хаббарда.

### 3. УРАВНЕНИЕ ДЛЯ ПАРАМЕТРА ПОРЯДКА КИРАЛЬНОЙ СВЕРХПРОВОДЯЩЕЙ ФАЗЫ

Вывод уравнения самосогласования для параметра порядка в сверхпроводящей фазе осуществим с помощью мацубаровских функций Грина (ФГ) в атомном представлении [42]:

$$D_{\alpha,\beta}(f\tau, g\tau') = -\langle T_\tau \tilde{X}_f^\alpha(\tau) \tilde{X}_g^{-\beta}(\tau') \rangle = \frac{T}{N} \sum_{k, \omega_n} e^{ik(f-g) - i\omega_n(\tau-\tau')} D_{\alpha,\beta}(k, i\omega_n), \quad (8)$$

где в первой строке угловые скобки обозначают усреднение по большому каноническому ансамблю, задаваемому статистическим оператором

$$\rho = \exp(-H_{eff}/T)$$

с температурой  $T$ . Оператор  $T_\tau$  осуществляет хронологизацию по мацубаровским «временным» переменным  $\tau$  и  $\tau'$  произведения операторов Хаббарда в «гейзенберговском» представлении:

$$\tilde{X}_f^\alpha(\tau) = \exp(\tau H_{eff}) X_f^\alpha \exp(-\tau H_{eff}).$$

Индексы  $\alpha, \beta$  (корневые векторы [42]) используются для обозначения переходов между одноузельными состояниями  $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle, |2\rangle$  и поэтому зависят от двух номеров этих состояний:  $\alpha = \alpha(n, m)$ . При этом

$$X_f^\alpha = X_f^{\alpha(n,m)} = X_f^{nm}.$$

Такой оператор при действии на волновую функцию системы переводит состояние  $|m\rangle$  узла  $f$  в состояние  $|n\rangle$  этого же узла. Отрицательному значению корневого вектора  $-\beta = -\beta(n, m)$  соответствует инвертированный переход иона кобальта из одноузельного состояния  $|n\rangle$  в одноузельное состояние  $|m\rangle$ , т. е.

$$X_f^{-\beta(n,m)} = X_f^{\beta(m,n)} = X_f^{mn}.$$

Во второй строке определения (8) вводится фурье-образ мацубаровской функции Грина в атомном представлении  $D_{\alpha,\beta}(k, i\omega_l)$ , в котором  $k$  — квазиимпульс, а  $\omega_l = (2l + 1)\pi T$ ,  $l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  — мацубаровская частота для случая антикоммутирующих операторов.

Если функции  $D_{\alpha,\beta}(k, i\omega_n)$  рассматривать как элементы матрицы  $\hat{D}(k, i\omega_l)$ , то из анализа диаграммных рядов для  $D_{\alpha,\beta}(k, i\omega_l)$  следует матричное уравнение

$$\hat{D}(k, i\omega_l) = \hat{G}(k, i\omega_l) \hat{P}(k, i\omega_l), \quad (9)$$

где  $\hat{P}(k, i\omega_l)$  — силовой оператор [42, 43]. Функция  $\hat{G}$  удовлетворяет уравнению Дайсона в обычной форме:

$$\hat{G}(k, i\omega_l) = \hat{G}^{(0)}(k, i\omega_l) + \hat{G}^{(0)}(k, i\omega_l) \hat{\Sigma}(k, i\omega_l) \hat{G}(k, i\omega_l),$$

где  $\hat{\Sigma}(k, i\omega_l)$  — массовый оператор, а коллективизированная функция Грина

$$\hat{G}^{(0)}(k, i\omega_l) = \{[\hat{G}_0(i\omega_l)]^{-1} - \hat{P}(k, i\omega_l) \hat{t}_k\}^{-1}$$

описывает невзаимодействующие квазичастицы нормальной фазы, если силовой оператор вычисляется в среднеполевом приближении,  $\hat{G}_0(i\omega_l)$  — матрица одноузельных пропагаторов

$$(\hat{G}_0(i\omega_l))_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} [i\omega_l + E_n - E_m]^{-1}, \quad \alpha = \alpha(n, m),$$

$E_n, E_m$  — затравочные одноионные энергии. Матрица  $\hat{t}_k$  составлена из фурье-образов элементов  $t_{fg}^{\alpha\beta}$ , значения которых находятся из сопоставления оператора  $\hat{T}$  с этим же оператором, записанным в форме

$$\hat{T} = \sum_{fg} \sum_{\alpha\beta} t_{fg}^{\alpha\beta} X_f^{-\alpha} X_g^\beta.$$

В дальнейшем ограничимся среднеполевым приближением, соответствующим теории Горькова для обычных сверхпроводников [44]. Для краткости в дальнейшем нормальную ФГ  $G_{\downarrow 2, \downarrow 2}$  будем обозначать посредством  $G$ , а аномальную ФГ  $G_{\downarrow 2, 2\uparrow}$  — через  $F$ .

Обозначив аномальную компоненту массового оператора через  $\Delta(k)$ , из уравнения Дайсона найдем

$$F(k, i\omega_l) = \frac{\Delta(k)}{(i\omega_l)^2 - E_k^2}, \quad (10)$$

где

$$E_k = \sqrt{\xi_k^2 + |\Delta(k)|^2} \quad (11)$$

— спектр фермиевских возбуждений в сверхпроводящей фазе. Для  $t$ - $J$ - $V$ -модели спектр нормальной фазы, отсчитанный от химического потенциала, определяется выражением

$$\xi_k = \varepsilon + U + \frac{1+x}{2} t_k - \mu, \quad (12)$$



а для  $t$ - $J^*$ - $V$ -модели —

$$\xi_k = \varepsilon + U + \frac{1+x}{2}t_k + \frac{(1-x^2)}{4}t_k^2 - \mu, \quad (13)$$

где  $x$  — доля двоечных состояний в ансамбле фермионов Хаббарда, которая связана с узельной концентрацией электронов  $n$  соотношением  $x = n - 1$ . Фурье-образ интеграла перескока  $t_k$  при учете параметров  $t_1, t_2, t_3$  для трех координационных сфер записывается в виде

$$t_k = 2t_1\varphi_{s1}(k) + 2t_2\varphi_{s2}(k) + 2t_3\varphi_{s3}(k), \quad (14)$$

где

$$\begin{aligned} \varphi_{s1}(k) &= \cos k_y + 2 \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_x}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y}{2}\right), \\ \varphi_{s2}(k) &= \cos(\sqrt{3}k_x) + \\ &+ 2 \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_x}{2}\right) \cos\left(\frac{3k_y}{2}\right), \\ \varphi_{s3}(k) &= \cos(2k_y) + 2 \cos(\sqrt{3}k_x) \cos(k_y) \end{aligned} \quad (15)$$

— базисные функции симметрии  $s$ -типа. Поскольку в  $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$  реализуется синглетная сверхпроводимость с симметрией параметра порядка  $d$ -типа, в дальнейшем, для краткости, ограничимся представлением только тех вкладов в аномальную компоненту массового оператора, которые обеспечивают отмеченную симметрию. Тогда графическое представление  $\Delta(k)$  задается суммой семи диаграмм, показанных на рис. 1.

Входящие в графики толстые линии со светлой (темной) стрелкой обозначают аномальные функции Грина соответственно  $G_{\downarrow 2, 2\uparrow}(q, i\omega_l) = F(q, i\omega_l)$  и  $G_{\uparrow 2, 2\downarrow}(q, i\omega_l) = -F(-q, -i\omega_l)$ .

Тонкой линией со светлой (темной) стрелкой обозначен затравочный пропагатор для верхней хаббардовской подзоны фермиевской частицы со спином «вверх» («вниз»).

Светлому (темному) кружку соответствует концевой множитель  $N_{2\uparrow}$  ( $N_{2\downarrow}$ ), где  $N_{2\sigma} = N_2 + N_\sigma$ ,  $N_\sigma = \langle X_f^{\sigma\sigma} \rangle$  — число заполнения одноузельного состояния с одним электроном с проекцией спина  $\sigma$ ,  $N_2 = \langle X_f^{22} \rangle$  — число заполнения одноузельного состояния с двумя электронами. Для спин-синглетной сверхпроводящей фазы их значения совпадают  $N_{2\uparrow} = N_{2\downarrow} = (1+x)/2$ .

Две диаграммы в верхнем ряду определяют вклады в  $\Delta(k)$ , связанные с обменным взаимодействием, описываемым оператором  $\hat{J}$ . Жирной волнистой линии на графиках соответствует фурье-образ

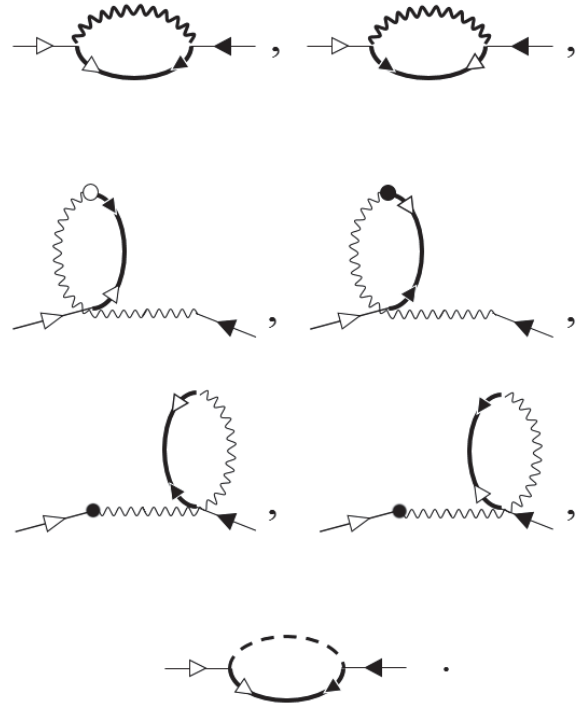


Рис. 1. Диаграммы для параметра порядка  $\Delta(k)$

раз  $J_q$  параметров межузельного обменного взаимодействия  $J_{fg}$ .

Следующие четыре графика, расположенные во второй и третьей строках, происходят от коррелированных перескоков, отраженных в  $H_{eff}$  посредством трехцентровых слагаемых (6). Как показано в работе [35], суммарный вклад первых шести диаграмм в уравнение для параметра порядка симметрии  $d$ -типа может быть записан в виде вклада только от первых двух диаграмм, если в качестве эффективной константы связи взять ренормированный обменный интеграл  $\tilde{J}_q$ :

$$J_q \rightarrow \tilde{J}_q = J_q - J_q N_{2\sigma} = \frac{1-x}{2} J_q. \quad (16)$$

Седьмая диаграмма соответствует вкладу в  $\Delta(k)$  межузельного кулоновского взаимодействия фермионов. Фурье-образ этого взаимодействия  $V_q$  изображается жирной штриховой линией.

После сопоставления диаграммам аналитических выражений и учета отмеченных выше ренормировок, а также приведенных выражений для аномальных функций Грина, получаем уравнение самосогласования для симметрии параметра порядка  $d + id$ -типа:

$$\Delta(k) = \frac{1}{N} \sum_q \left( \frac{1-x}{2} (J_{k+q} + J_{k-q}) - V_{k-q} \right) \times \\ \times \Delta(q) \frac{\text{th}(E_q/2T)}{2E_q}. \quad (17)$$

При выводе этого уравнения предварительно проведено суммирование по мадубаровским частотам при использовании структуры функции  $F(q, i\omega_l)$ .

#### 4. ТЕМПЕРАТУРА ПЕРЕХОДА В КИРАЛЬНУЮ СВЕРХПРОВОДЯЩУЮ $d + id$ -ФАЗУ В ДВУМЕРНОМ АНСАМБЛЕ ФЕРМИОНОВ ХАББАРДА

Точное решение (17) найти нетрудно, если учесть, что ядро этого интегрального уравнения допускает запись в расщепленном виде. В двумерном случае с треугольной решеткой, когда динамика фермионов Хаббарда связана с процессами их перескоков и межузельными взаимодействиями, свойство расщепленности следует из фурье-представления межузельных взаимодействий.

При учете обменных и кулоновских взаимодействий в пределах двух координационных сфер, параметризация которых задается соответственно величинами  $J_1, J_2$  и  $V_1, V_2$ , это представление записывается в виде

$$J_q = 2J_1\varphi_{s1}(q) + 2J_2\varphi_{s2}(q), \\ V_q = 2V_1\varphi_{s1}(q) + 2V_2\varphi_{s2}(q),$$

где  $\varphi_{si}(q)$  — базисные функции, определенные в (15). При этом вид аналитической зависимости от квазиимпульса  $\Delta_d(k)$  определяется базисными функциями потенциалов спаривания, преобразующихся по неприводимому  $d$ -представлению группы вращений  $C_6$ .

Для треугольной решетки такие базисные функции обладают киральным характером и являются комплексными. В случае, когда радиус действия потенциалов спаривания ограничен двумя координационными сферами, в качестве базиса достаточно использовать две функции [11]:

$$\varphi_{d1}(k) = \cos k_y - \cos \left( \frac{\sqrt{3}k_x}{2} \right) \cos \left( \frac{k_y}{2} \right) + \\ + i\sqrt{3} \sin \left( \frac{\sqrt{3}k_x}{2} \right) \sin \left( \frac{k_y}{2} \right), \quad (18)$$

$$\varphi_{d2}(k) = \cos \sqrt{3}k_x - \cos \left( \frac{\sqrt{3}k_x}{2} \right) \cos \left( \frac{3k_y}{2} \right) - \\ - i\sqrt{3} \sin \left( \frac{\sqrt{3}k_x}{2} \right) \sin \left( \frac{3k_y}{2} \right). \quad (19)$$

Тогда киральный  $d + id$ -параметр порядка записывается в виде суперпозиции

$$\Delta_d(k) = 2\Delta_{d1}^0 \varphi_{d1}(k) + 2\Delta_{d2}^0 \varphi_{d2}(k). \quad (20)$$

В результате задача сводится к решению системы двух трансцендентных уравнений относительно неизвестных амплитуд  $\Delta_{d1}^0$  и  $\Delta_{d2}^0$ :

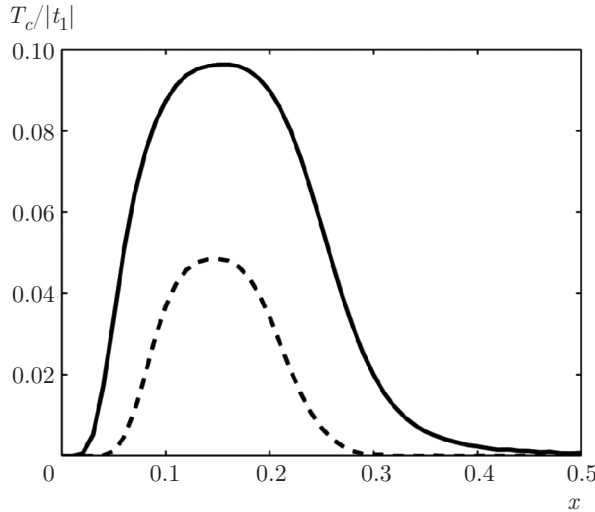
$$(1 - A_{11}) \Delta_{d1}^0 - A_{12} \Delta_{d2}^0 = 0, \\ -A_{21} \Delta_{d1}^0 + (1 - A_{22}) \Delta_{d2}^0 = 0, \quad (21)$$

которая получается при подстановке в (17) решения для  $\Delta_d(k)$  в виде (20). Коэффициенты  $A_{ij}$  этой системы определяются выражениями

$$A_{11} = (\alpha J_1 - V_1) \frac{1}{N} \sum_q \cos \left( \frac{\sqrt{3}}{2} q_x + \frac{1}{2} q_y \right) \times \\ \times \left[ \cos \left( \frac{\sqrt{3}}{2} q_x + \frac{1}{2} q_y \right) - \cos q_y \right] L_q, \\ A_{12} = (\alpha J_1 - V_1) \frac{1}{N} \sum_q \cos \left( \frac{\sqrt{3}}{2} q_x + \frac{1}{2} q_y \right) \times \\ \times \left[ \cos \left( \frac{\sqrt{3}}{2} q_x - \frac{3}{2} q_y \right) - \cos \sqrt{3} q_x \right] L_q, \\ A_{22} = (\alpha J_2 - V_2) \frac{1}{N} \sum_q \cos \left( \sqrt{3} q_x \right) \times \\ \times \left[ \cos \left( \sqrt{3} q_x \right) - \cos \left( \frac{\sqrt{3}}{2} q_x + \frac{3}{2} q_y \right) \right] L_q, \\ A_{21} = (\alpha J_2 - V_2) \frac{1}{N} \sum_q \cos \left( \sqrt{3} q_x \right) \times \\ \times \left[ \cos q_y - \cos \left( \frac{\sqrt{3}}{2} q_x + \frac{1}{2} q_y \right) \right] L_q, \quad (22)$$

где  $L_q = \text{th}(E_q/2T)/E_q$ .

Для демонстрации роли коррелированных перескоков при формировании свойств сверхпроводящей фазы здесь введен ренормировочный множитель  $\alpha$  перед параметрами обменных взаимодействий. В случае, когда коррелированные перескоки не учитываются ( $t$ - $J$ - $V$ -модель),  $\alpha = 2$ , а  $\xi_q$  определяется выражениями (12). Если же эти перескоки учитываются ( $t$ - $J^*$ - $V$ -модель), то коэффициент  $\alpha = 1 - x$ , а спектр находится из (13).



**Рис. 2.** Зависимость критической температуры перехода в киральную СП-фазу от концентрации «двоек» ( $x = n - 1$ ), полученная в рамках  $t$ - $J$ - $V$ -модели: сплошная линия —  $V_1 = 0$ , штриховая линия —  $V_1 = 0.3$ ;  $J_1 = 0.3$ ,  $J_2 = 0.2$ ,  $t_2 = t_3 = 0$  (здесь и далее все параметры в единицах  $|t_1|$ )

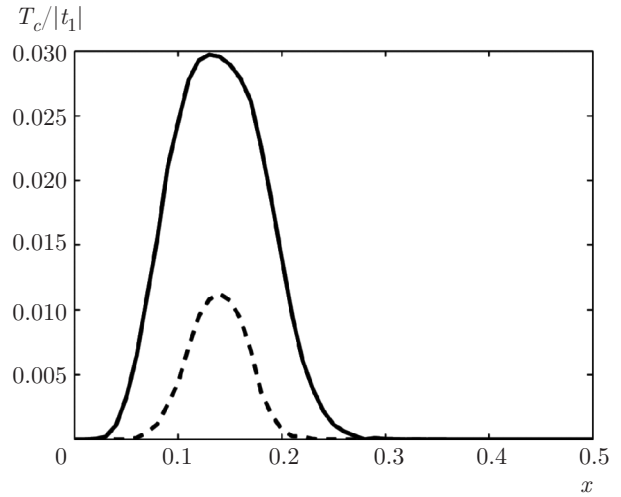
Поскольку величины  $V_i$  и  $J_i$  входят в уравнения для параметра порядка (22) аддитивно, далее будем полагать  $V_2 = 0$ .

Из (21) следует уравнение для вычисления температуры перехода в сверхпроводящую фазу:

$$(1 - A_{11}^0)(1 - A_{22}^0) - A_{12}^0 A_{21}^0 = 0, \quad (23)$$

в котором величины  $A_{ij}^0$  отличаются от  $A_{ij}$  только тем, что спектр  $E_q$ , входящий в величину  $L_q$ , берется при  $\Delta_q \equiv 0$ .

На рис. 2 продемонстрировано влияние кулоновских корреляций на концентрационную зависимость критической температуры перехода в сверхпроводящую фазу с киральной  $d + id$ -симметрией для  $t$ - $J$ - $V$ -модели. Перенормировка, обусловленная включением трехцентровых слагаемых, приводит к уменьшению критической температуры и области реализации сверхпроводящей фазы (см. рис. 3). Сплошная линия на обоих рисунках соответствует случаю, когда кулоновские корреляции не учитываются ( $V_1 = V_2 = 0$ ). Как и должно быть, кулоновское отталкивание фермионов подавляет куперовскую неустойчивость. Вместе с тем существенным является то, что представление  $\Delta_d(k)$  через две базисные функции может приводить к важному эффекту. Суть его заключается в том, что при подавлении спаривания в одной координационной сфере сверхпроводящая фаза может остаться устойчивой благодаря спариванию в другой координацион-



**Рис. 3.** Зависимость критической температуры перехода в киральную СП-фазу от концентрации «двоек», полученная в рамках  $t$ - $J^*$ - $V$ -модели: сплошная линия —  $V_1 = 0$ , штриховая линия —  $V_1 = 0.15$ ;  $J_1 = 0.3$ ,  $J_2 = 0.2$ ,  $t_2 = t_3 = 0$

ной сфере. При этом происходит значительное перераспределение относительных вкладов двух киральных инвариантов в  $\Delta_d(k)$ . Это определяет механизм, благодаря которому межузельное кулоновское взаимодействие влияет на топологический переход в киральной сверхпроводящей фазе двумерного ансамбля фермионов Хаббарда на треугольной решетке. Остановимся на этом эффекте подробнее.

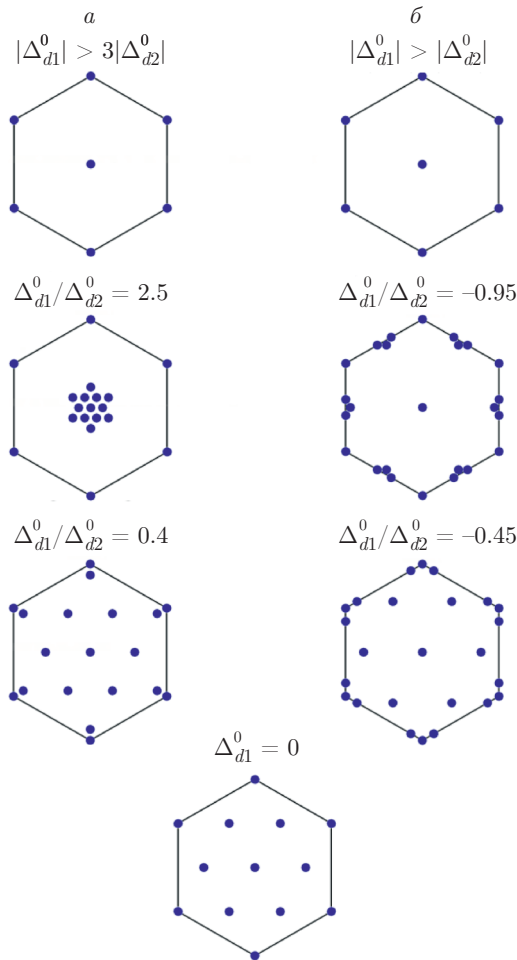
### 5. ВЛИЯНИЕ КУЛОНОВСКИХ КОРРЕЛЯЦИЙ НА КОНФИГУРАЦИЮ НОДАЛЬНЫХ ТОЧЕК И ЕЕ КОНЦЕНТРАЦИОННУЮ ЭВОЛЮЦИЮ

Важная роль кулоновских корреляций в проблеме концентрационного квантового топологического перехода связана с расширением возможности его реализации. Как известно, изменение топологических свойств двумерной сверхпроводящей фазы с комплексным параметром порядка

$$\Delta_d(k) = \text{Re } \Delta_d(k) + i \text{Im } \Delta_d(k)$$

происходит в том случае, когда поверхность Ферми пересекает нодальные точки  $\Delta_d(k)$ . Как показано в работе [11], при наличии только одной базисной функции, соответствующей второй координационной сфере, нули  $\Delta_d(k)$  располагаются внутри зоны Бриллюэна в геометрически фиксированных точках. Поэтому квантовый топологический переход будет иметь место только для одного ни от

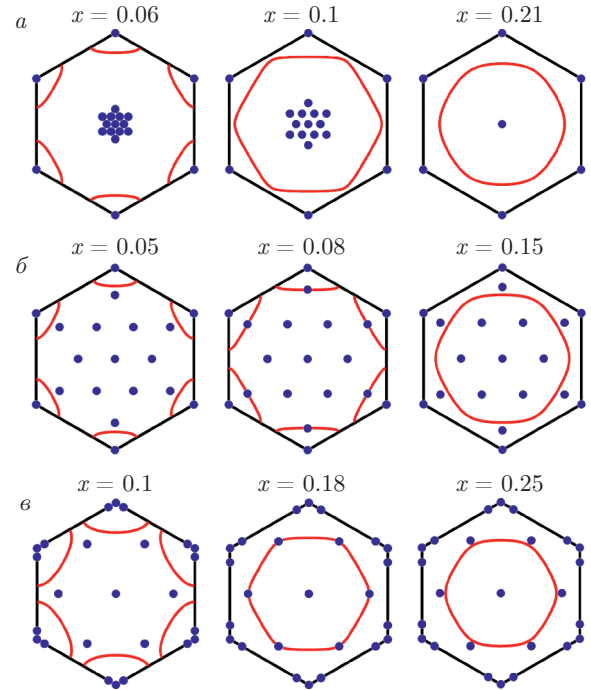




**Рис. 4.** Конфигурации нодальных точек параметра порядка  $\Delta_d(k)$  с киральным типом симметрии при различных соотношениях между амплитудами  $\Delta_{d1}^0$  и  $\Delta_{d2}^0$ : *a* — знаки амплитуд одинаковые; *b* — знаки амплитуд противоположные

чего не зависящего значения концентрации фермионов. При этом трудно реализовать бесщелевую фазу при концентрации, соответствующей экспериментальной.

Иная ситуация складывается при учете кулоновских корреляций и обменных взаимодействий в пределах двух координационных сфер. В этом случае из-за суперпозиции двух базисных функций положение нулей зависит от отношения амплитуд  $\Delta_{d1}^0$  и  $\Delta_{d2}^0$  комплексного параметра  $\Delta_d(k)$ . При этом «старые» нули могут исчезнуть и появиться новые. Характер изменения конфигурации нодальных точек при изменении амплитуд  $\Delta_{d1}^0$  и  $\Delta_{d2}^0$  продемонстрирован на рис. 4. Поскольку конкретные значения этих амплитуд меняются при изменении параметров модели, концентрации фермионов и, в общем случае, темпе-



**Рис. 5.** Конфигурации нодальных точек  $\Delta_d(q)$  и контуры Ферми при различных концентрациях  $x$  двоичных состояний  $t$ - $J$ - $V$ -модели: *a* —  $t_2 = t_3 = 0$ ,  $V_1 = 0$ ; *b* —  $t_2 = t_3 = 0$ ,  $V_1 = 0.3$ ; *c* —  $t_2 = 0.2$ ,  $t_3 = 0.15$ ,  $V_1 = 10$ . На всех рисунках  $J_1 = 0.3$ ,  $J_2 = 0.2$

ратуры, бесщелевую фазу и точку топологического перехода нетрудно согласовать с экспериментальными.

Особый интерес представляет концентрационная эволюция нодальных точек. Поскольку при включении коррелированных перескоков эта эволюция может меняться качественно, представим результаты по отдельности.

### 5.1. $t$ - $J$ - $V$ -модель

На рис. 5 для  $t$ - $J$ - $V$ -модели показано найденное из решения системы (21) расположение нодальных точек  $\Delta_d(k)$  в зоне Бриллюэна и контура Ферми при различных параметрах системы. Рисунок 5*a* соответствует случаю, когда межузельное кулоновское взаимодействие не учитывается. При увеличении концентрации происходит изменение отношения  $\Delta_{d1}^0/\Delta_{d2}^0$ . Это вызывает сначала незначительное «расширение», а затем смещение нодальных точек к центру зоны Бриллюэна, более сильное, чем смещение контура Ферми. В результате изменение концентрации фермионов в данном режиме не будет сопровождаться квантовым топологическим переходом. В этом заключается одна из существенных

особенностей, связанная с суперпозиционным характером кирального параметра порядка.

При учете кулоновских корреляций ситуация может значительно измениться. Несмотря на то что положение контура Ферми не зависит от кулоновского взаимодействия, в случае, когда  $V_1$  (параметр кулоновского взаимодействия электронов, находящихся на соседних узлах) близок по значению к  $J_1$  (параметр обменной связи для ближайших узлов), а параметр кулоновского взаимодействия электронов для второй координационной сферы  $V_2$  равен нулю, взаимная динамика нодальных точек и контура Ферми меняется качественно (см. рис. 5б). В этом случае нодальные точки смещаются относительно медленно и контур Ферми успевает их «догнать». При критической концентрации система нодальных точек  $\Delta_d(k)$  располагается на контуре Ферми.

Таким образом, учет кулоновских корреляций между фермионами Хаббарда из первой координационной сферы не просто подавляет тенденцию к спариванию, а модифицируя парциальные амплитуды  $\Delta_{d1}^0$  и  $\Delta_{d2}^0$ , может существенно повлиять на динамику нодальных точек и, тем самым, инициировать топологический квантовый переход в сверхпроводящем состоянии.

При  $V_1 \gg J_1$  система нодальных точек становится близкой к системе, определяемой только второй базисной функцией, и концентрационное поведение системы соответствует сценарию, описанному в работе [11], а увеличение кулоновского взаимодействия проявляется лишь в уменьшении температуры перехода и области реализации сверхпроводящей фазы, но не влияет на положение нодальных точек. На рис. 5б параметры системы таковы, что при больших значениях  $V$  сверхпроводящая фаза существует при критической концентрации.

### 5.2. $t$ - $J^*$ - $V$ -модель

Учет коррелированных перескоков вызывает перенормировку константы связи спаривательного взаимодействия. Поэтому происходит уменьшение величины критической температуры и области реализации сверхпроводящей фазы. Другое влияние отмеченных перескоков проявляется в возможности изменения концентрационной динамики нодальных точек и, как следствие, изменения сценария топологического перехода. Это продемонстрировано на рис. 6, где показаны конфигурации нодальных точек  $\Delta_d(k)$  в зоне Бриллюэна при различных условиях. В отсутствие кулоновских корреляций (рис. 6а) поведение нодальных точек для  $t$ - $J^*$ - $V$ -модели

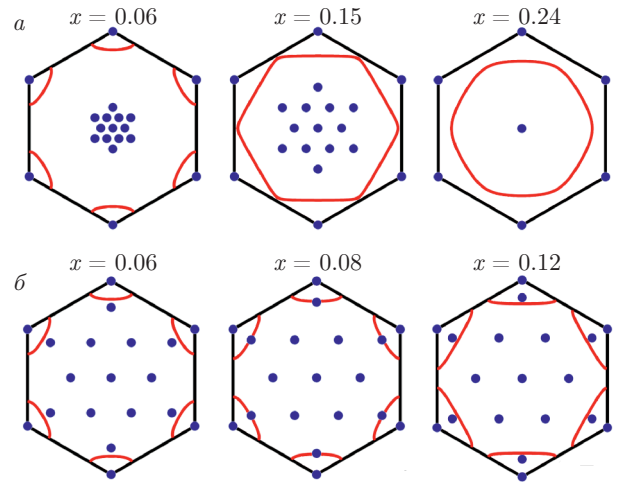


Рис. 6. Конфигурации нодальных точек  $\Delta_d(q)$  и контура Ферми при различных концентрациях  $x$  двоичных состояний  $t$ - $J^*$ - $V$ -модели: а — межузельные корреляции отсутствуют ( $V_1 = 0$ ); б — межузельные корреляции включены ( $V_1 = 0.15$ );  $J_1 = 0.3$ ,  $J_2 = 0.2$ ,  $t_2 = t_3 = 0$

качественно не отличается от поведения этих точек для  $t$ - $J$ -модели. Таким образом, контур Ферми также не пересекает нодальные точки, и квантовый топологический переход не происходит. При учете межузельного отталкивания из-за ренормировки обменного взаимодействия первый сценарий формирования фазы с бесщелевым спектром (рис. 6б) наблюдается при  $V_1 \sim J_1/2$ , а уменьшение области существования сверхпроводящей фазы приводит к тому, что второй сценарий образования бесщелевой фазы (при  $V_1 \gg J_1$ ) в рамках  $t$ - $J^*$ - $V$ -модели становится невозможным.

## 6. ВЛИЯНИЕ МЕЖПЛОСКОСТНЫХ ПЕРЕСКОКОВ НА ФОРМИРОВАНИЕ БЕСЩЕЛЕВОЙ КИРАЛЬНОЙ СВЕРХПРОВОДЯЩЕЙ $d + id$ -ФАЗЫ

При анализе влияния квазидвумерности на спектральные характеристики сверхпроводящей фазы примем во внимание факторы, имеющие место, например, в кобальтите натрия. Главная особенность связана с тем, что интеркалирование водой (именно в этом случае наблюдается переход в сверхпроводящее состояние) вызывает раздвижку  $\text{CoO}_2$ -слоев (молекулы воды размещаются между этими слоями). Поэтому интеграл перескока фермионов между узлами, принадлежащими разным слоям, становится значительно меньше соответствующего интеграла перескока в плоскости слоев:  $|t_\perp| \ll |t|$ , где  $t_\perp$  —

параметр перескока электронов между ближайшими узлами в направлении, перпендикулярном слоям, а  $|t|$  — наибольший интеграл перескока электрона в плоскости слоя.

В результате пропорциональное квадрату перескока взаимодействие между магнитоактивными ионами, находящимися в одном слое, будет много больше аналогичного взаимодействия между ионами из разных слоев. Это позволяет использовать приближение, в котором спектр фермиевских возбуждений нормальной фазы вычисляется для квазидвумерного случая, тогда как по отношению к потенциалам сверхпроводящего спаривания трехмерная система рассматривается как набор не связанных между собой слоев с треугольными решетками.

Как известно, при интеркаливании ионы молекулы воды размещаются между слоями  $\text{CoO}_2$ . Это вызывает увеличение расстояния между этими слоями. Поэтому совместное влияние большой удаленности слоев и наличие в межслоевом пространстве молекул с большой поляризационной активностью приводят к эффектам сильной экранировки кулоновского потенциала в направлении, перпендикулярном слоям. Из сказанного следует, что кулоновским взаимодействием фермионов, находящихся в разных слоях, в главном приближении можно пренебречь.

Ниже, для простоты, пренебрежем влиянием коррелированных перескоков. Тогда уравнение для вычисления параметра порядка сверхпроводящей фазы в формальном отношении остается без изменений (17), однако в выражении для фурье-образа интеграла перескоков (14) добавляется слагаемое  $2t_z \cos(k_z)$ .

Рисунок 7а демонстрирует влияние межплоскостных перескоков на концентрационную зависимость критической температуры перехода в киральную сверхпроводящую фазу с  $d + id$ -типом симметрии параметра порядка, а рис. 7б показывает влияние этих перескоков на плотность состояний при значении энергии, равном химическому потенциалу.

Видно, что увеличение  $t_z$  приводит к понижению максимальной критической температуры. Вместе с тем следует отметить, что характер изменения  $T_c$  при возрастании  $t_z$  является немонотонным и зависит от концентрации (авторы благодарны рецензенту, обратившему внимание на это обстоятельство). Если в области оптимального допирования  $T_c$  уменьшается с ростом  $t_z$ , то в «передопированной» области имеет место обратный процесс. Такое поведение связано с модификацией плотности состояний, проявляющейся в размытии логарифмической

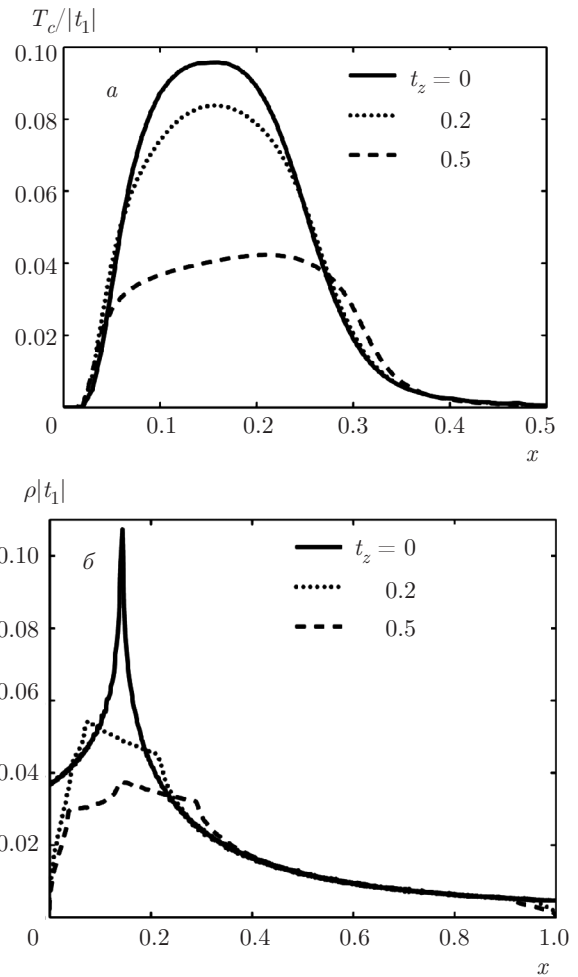
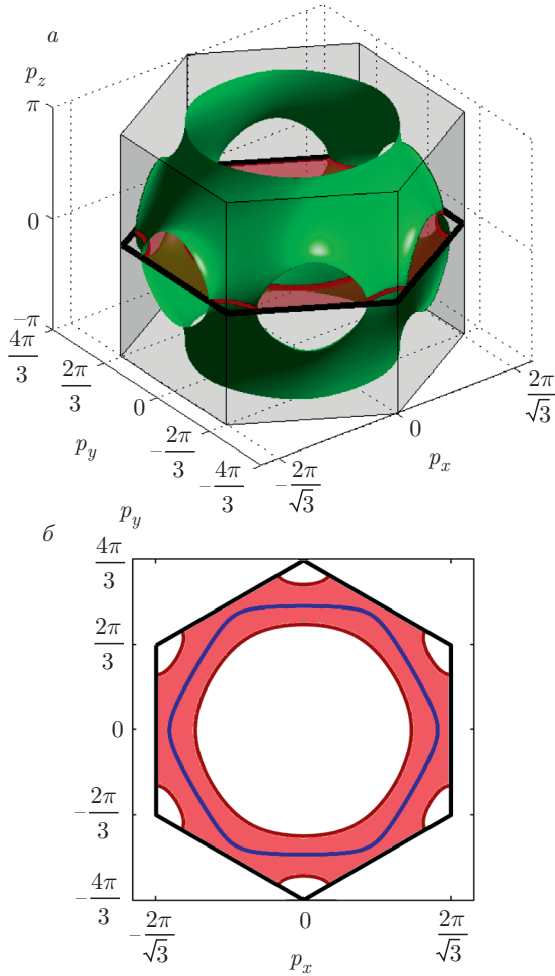


Рис. 7. а) Зависимость критической температуры перехода в киральную сверхпроводящую фазу в ансамбле фермионов Хаббарда от концентрации «двоек» при различных значениях  $t_z$ ; б) концентрационная зависимость плотности состояний на уровне химического потенциала для того же ансамбля;  $J_1 = 0.3$ ,  $J_2 = 0.2$ ,  $t_2 = t_3 = 0$

расходимости, имевшей место в двумерной системе, а также с немонотонным по концентрации изменением плотности состояний на уровне химического потенциала. Значительное изменение критической температуры наблюдается только при значениях  $t_z$  около  $0.5|t_1|$ . Область реализации СП-фазы при этом изменяется незначительно.

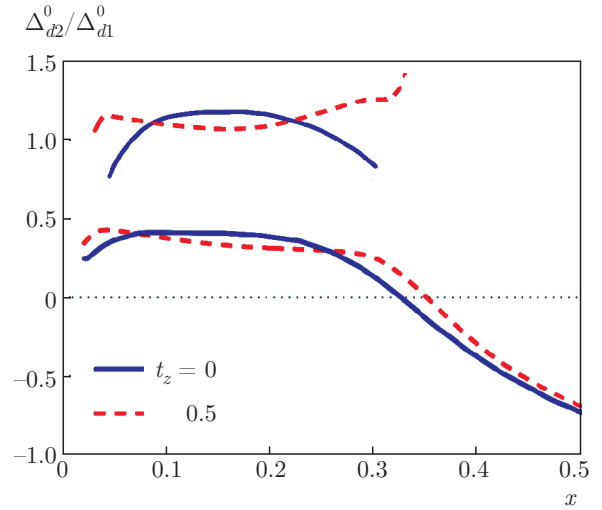
Поскольку при «включении» межплоскостных перескоков спектр элементарных возбуждений обретает зависимость от  $p_z$ , а параметр порядка  $\Delta_d(p)$  зависит только от  $p_x$  и  $p_y$ , для исследования условий образования бесщелевой фазы удобнее рассматривать не саму поверхность Ферми, а ее проекцию на плоскость  $(p_x, p_y)$  (см. рис. 8). На рис. 8б синей линией показан контур Ферми при  $t_z = 0$  (двумерная



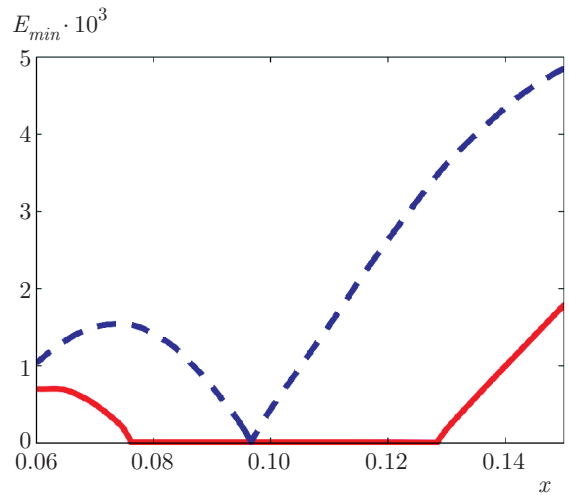
**Рис. 8.** (В цвете онлайн) а) Поверхность Ферми для квазидвумерного ансамбля фермионов Хаббарда ( $t_z = 0.5$ ), б) проекция поверхности Ферми этого же ансамбля на плоскость  $(p_x, p_y)$ . Концентрация  $x = 0.18$ . Остальные параметры такие же, как на предыдущем рисунке

система), а область, закрашенная красным цветом, возникает при проецировании поверхности Ферми, построенной при той же концентрации и параметрах модели, но при  $t_z = 0.5|t_1|$ . Завышенное значение этого параметра взято для наглядности рисунка. При вычислении концентрационной зависимости щели будет взято более реальное значение. Таким образом, учет межплоскостных перескоков приводит к тому, что вместо рассмотрения отдельного контура Ферми в чисто двумерном случае необходимо рассматривать поверхность, ширина проекции которой на плоскость  $(p_x, p_y)$  пропорциональна величине  $t_z$ .

Для дальнейшего существенно, что положение нодальных точек  $\Delta_d(p)$ , которое определяется па-



**Рис. 9.** Зависимость отношения  $\Delta_{d2}^0/\Delta_{d1}^0$  от концентрации для  $t$ - $J$ - $V$ -модели при различных значениях  $t_z$  и  $V_1$ . Сплошные линии соответствуют  $t_z = 0$ , штриховые —  $t_z = 0.5$ ; нижние линии рассчитаны при  $V_1 = 0$ , а верхние при  $V_1 = 0.3$ ;  $J_1 = 0.3$ ,  $J_2 = 0.2$ ,  $t_2 = t_3 = 0$



**Рис. 10.** Зависимость щели спектра фермиевских возбуждений в сверхпроводящей фазе от концентрации при  $t_z = 0$  (штриховая линия) и  $t_z = 0.1$  (сплошная линия);  $J_1 = 0.3$ ,  $J_2 = 0.2$ ,  $V_1 = 0.3$ ,  $t_2 = t_3 = 0$

раметром  $\Delta_{d2}^0/\Delta_{d1}^0$  (см. рис. 4), слабо зависит от межплоскостного интеграла перескока. Это продемонстрировано на рис. 9. Из сказанного следует, что основное влияние эффекта квазидвумерности на систему проявляется в возникновении конечной ширины проекции поверхности Ферми на плоскость  $(p_x, p_y)$ . В результате сверхпроводящая фаза с бесщелевым спектром будет наблюдаться не при одном значении концентрации (критическая точка), а

в широкой области концентраций (см. рис. 10). Аналогично этому уширение поверхности приводит к увеличению диапазона значений межузельного кулоновского взаимодействия, при которых реализуется бесщелевой спектр. Например, при  $t_2 = t_3 = 0$ ,  $J_1 = 0.3$ ,  $J_2 = 0.2$  и  $t_z = 0.2$  первый сценарий формирования бесщелевой фазы (см. рис. 5б) реализуется при  $V_1 \in (0.2, 0.5)$ .

Учет перескоков между слоями также благоприятствует и второму сценарию формирования бесщелевой фазы, который реализуется при больших значениях межузельного кулоновского отталкивания (см. рис. 5в). Положение нодальных точек в этом сценарии почти полностью совпадает с нулями базисной функции  $\varphi_{d2}(p)$ , а из-за «уширения» поверхность Ферми пересекает их при меньших концентрациях. Для случая  $t_2 = t_3 = 0$  при увеличении  $t_z$  от 0 до 0.5 минимальная концентрация, при которой происходит данное пересечение, уменьшается от 0.43 до 0.29.

## 7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для квазидвумерного ансамбля фермионов Хаббарда на треугольной решетке при учете взаимодействий в пределах двух координационных сфер проанализированы условия, при которых спектр сверхпроводящей фазы с киральным параметром порядка становится бесщелевым. Показано, что существует два различных сценария формирования бесщелевой фазы.

Первый из них реализуется в случае, когда параметры межузельного кулоновского взаимодействия сравнимы по величине с параметрами обменного взаимодействия. Тогда базисные функции  $\varphi_{d1}(p)$  и  $\varphi_{d2}(p)$  дают примерно одинаковые вклады в киральный параметр порядка  $\Delta_d(p)$ . При этом положение нодальных точек сильно зависит как от параметров системы, так и от концентрации, а реализация бесщелевой фазы определяется относительной динамикой нодальных точек и контура Ферми.

Второй сценарий реализуется при  $V_1 \gg J_1$ . Положение нодальных точек практически полностью определяется только одной базисной функцией  $\varphi_{d2}(p)$ . Нули параметра порядка находятся внутри зоны Бриллюэна, и их положение слабо зависит от концентрации. Если сверхпроводимость существует при концентрации, при которой контур Ферми нормальной фазы пересечет эти точки, то реализуется фаза с бесщелевым спектром. Однако такая ситуация имеет место только при одном значении кон-

центрации фермионов, и именно она обсуждалась в работе [11].

Учет коррелированных перескоков приводит к уменьшению области реализации сверхпроводящей фазы, в результате чего сверхпроводимость разрушается раньше, чем контур Ферми пересечет нули базисной функции  $\varphi_{d2}(p)$ , и поэтому второй сценарий в рамках  $t$ - $J^*$ - $V$ -модели не реализуется.

Показано, что при переходе к квазидвумерному ансамблю фермионов Хаббарда, когда принимаются во внимание межплоскостные перескоки, бесщелевая сверхпроводящая киральная  $d + id$ -фаза реализуется не при единственном значении концентрации, а в некотором диапазоне. Расширение концентрационной области приводит к смягчению требований реализации бесщелевой фазы, и оба рассмотренных выше сценария реализуются в большей области параметров.

**Финансирование.** Исследование выполнено при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты №№ 19-02-00348, 18-42-240014), Правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда науки в рамках научного проекта «Одноорбитальная эффективная модель ансамбля спин-поляронных квазичастиц в проблеме описания промежуточного состояния и псевдощелевого поведения купратных сверхпроводников» (проект № 18-42-240014).

## ЛИТЕРАТУРА

1. Р. С. Гехт, УФН **159**, 261 (1989).
2. Д. И. Голосов, А. В. Чубуков, Письма в ЖЭТФ **50**, 416 (1989).
3. A. V. Chubukov and D. I. Golosov, J. Phys.: Condens. Matter **3**, 69 (1991).
4. L. E. Svistov, A. I. Smirnov, L. A. Prozorova, O. A. Petrenko, A. Micheler, N. Buttgen, A. Ya. Shapiro, and L. N. Demianets, Phys. Rev. **74**, 024412 (2006).
5. A. I. Smirnov, T. A. Soldatov, O. A. Petrenko, A. Takata, T. Kida, M. Hagiwara, A. Ya. Shapiro, and M. E. Zhitomirsky, Phys. Rev. Lett. **119**, 047204 (2017).
6. T. A. Soldatov, A. I. Smirnov, K. Y. Povarov, M. Halg, W. E. A. Lorenz, and A. Zheludev, Phys. Rev. B **98**, 144440 (2018).



7. Д. М. Дзедзисашвили, А. А. Худайбердыев, Письма в ЖЭТФ **108**, 189 (2018).
8. O. A. Starykh, Rep. Progr. Phys. **78**, 052592 (2015).
9. А. И. Смирнов, УФН **186**, 633 (2016).
10. K. Takada, H. Sakurai, E. Takayama-Muromachi, F. Izumi, R. A. Dilanian, and T. Sasaki, Nature **422**, 53 (2003).
11. S. Zhou and Z. Wang, Phys. Rev. Lett. **100**, 217002 (2008).
12. Y.-M. Lu and Z. Wang, Phys. Rev. Lett. **110**, 096403 (2013).
13. V. V. Val'kov, A. O. Zlotnikov, and M. S. Shustin, J. Magn. Magn. Mater. **459**, 112 (2018).
14. В. В. Вальков, А. О. Злотников, Письма в ЖЭТФ **109**, 769 (2019).
15. В. В. Вальков, В. А. Мицкан, А. О. Злотников, М. С. Шустин, С. В. Аксенов, Письма в ЖЭТФ **110**, 126 (2019).
16. S. Feng, Y. Lan, H. Zhao, L. Kuang, L. Qin, and X. Ma, Int. J. Mod. Phys. B **29**, 1530009 (2015).
17. X. Ma, L. Qin, H. Zhao, Y. Lan, and S. Feng, J. Low Temp. Phys. **183**, 329 (2016).
18. L. Qin, X. Ma, L. Kuang, J. Qon, and S. Feng, J. Low Temp. Phys. **181**, 112 (2015).
19. J. Hubbard, Proc. R. Soc. London Ser. A **276**, 238 (1963).
20. M. Ye and A. Chubukov, Phys. Rev. B **100**, 035135 (2019).
21. K. S. Chen, Z. Y. Meng, U. Yu, S. Yang, M. Jarrell, and J. Moreno, Phys. Rev. B **88**, 041103(R) (2013).
22. G.-Q. Zheng et al., J. Phys. Condens. Matter **18**, L63 (2006).
23. A. Kanigel et al., Phys. Rev. Lett. **92**, 257007 (2004).
24. H. D. Yang et al., Phys. Rev. B **71**, 020504R (2005).
25. G.-Q. Zheng et al., Phys. Rev. B **73**, 180503R (2006).
26. G. Baskaran, Phys. Rev. Lett. **91**, 097003 (2003).
27. B. Kumar and B. S. Shastry, Phys. Rev. B **68**, 104508 (2005).
28. M. Ogata, J. Phys. Soc. Jpn. **72**, 1839 (2003).
29. K. S. Chen, Z. Y. Meng, U. Yu, S. Yang, M. Jarrell, and J. Moreno, Phys. Rev. B **88**, 041103 (2013).
30. Y. Yanase, M. Mochizuki, and M. Ogata, J. Phys. Soc. Jpn. **74**, 430 (2005).
31. M. Ogata, J. Phys.: Condens. Matter **19**, 145282 (2007).
32. Н. Б. Иванова, С. Г. Овчинников, М. М. Коршунов, И. М. Ерёмин, Н. В. Казак, УФН **179**, 837 (2009).
33. N. M. Plakida, *High-Temperature Superconductivity*, Springer, Berlin (1995).
34. Ю. А. Изюмов, УФН **167**, 465 (1997).
35. В. В. Вальков, Т. А. Валькова, Д. М. Дзедзисашвили, С. Г. Овчинников, Письма в ЖЭТФ **75**, 450 (2002).
36. В. В. Вальков, Т. А. Валькова, В. А. Мицкан, Письма в ЖЭТФ **102**, 399 (2015).
37. S. P. Shubin and S. V. Vonsovsky, Proc. R. Soc. Lond. A **145**, 159 (1934).
38. S. P. Shubin and S. V. Vonsovsky, Phys. Z. Sowjetunion **7**, 292 (1935).
39. S. P. Shubin and S. V. Vonsovsky, Phys. Z. Sowjetunion **10**, 348 (1936).
40. Н. Н. Боголюбов, *Избранные труды в трех томах*, т. 2, Наукова думка, Киев (1970).
41. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **68**, 207 (1975); **70**, 1100 (1976).
42. Р. О. Зайцев, *Диаграммные методы в теории сверхпроводимости и ферромагнетизма*, УРСС, Москва (2004).
43. В. В. Вальков, А. А. Головня, ЖЭТФ **134**, 1167 (2008).
44. Л. П. Горьков, ЖЭТФ **34**, 735 (1958).