

САМОСОГЛАСОВАННЫЙ УЧЕТ ФЛУКТУАЦИЙ В СИНГЛЕТНЫХ СВЕРХПРОВОДЯЩИХ ФАЗАХ С s - И d -СИММЕТРИЕЙ

*A. Г. Грошев**, *A. К. Аржников***

*Удмуртский федеральный исследовательский центр Уральского отделения Российской академии наук
426067, Ижевск, Россия*

Поступила в редакцию 13 июля 2019 г.,
после переработки 19 июля 2019 г.
Принята к публикации 20 июля 2019 г.

Исследуется поведение термических флуктуаций сверхпроводящего параметра порядка с расширенной s - и $d_{x^2-y^2}$ -симметрией. Для этого в рамках теории функционального интегрирования разработан метод самосогласованного учета флуктуаций параметра порядка и рассеяния носителей заряда на флуктуациях связанных электронных пар. Исследование проводится на основе квазидвумерной однозонной модели с притяжением между электронами, находящимися на соседних узлах. Получены функции распределения вероятностей фазовых флуктуаций в зависимости от температуры, концентрации носителей заряда и параметров модели. Показано, что в сверхпроводящей области фаза параметра порядка когерентна, а в плотности состояний на уровне Ферми наблюдается провал. При приближении к некогерентной области фазовой диаграммы провал в плотности состояний исчезает одновременно с потерей фазовой когерентности. В то же время усредненная по флуктуациям амплитуда параметра порядка остается конечной при любых температурах и концентрациях носителей заряда. Полученные результаты показывают, что объяснение псевдощелевого состояния в рамках данного сценария невозможно.

DOI: 10.31857/S0044451020020091

1. ВВЕДЕНИЕ

Несмотря на усилия, предпринятые как экспериментаторами, так и теоретиками, природа высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) до сих пор остается до конца не выясненной. Возможно, что ключом для понимания ее механизма является еще открытый вопрос о природе и свойствах псевдощелевого состояния, которое, как известно, отсутствует в традиционных сверхпроводниках [1]. Решение этого вопроса остается одной из проблем при описании ВТСП-соединений.

В настоящее время рассматриваются два основных сценария при теоретическом объяснении псевдощелевого состояния в ВТСП-соединениях. В первом сценарии наблюдаемые псевдощелевые аномалии возникают в результате образования некогерентных связанных электронных пар выше темпе-

ратуры T_c сверхпроводящего перехода [2]. Фазовая когерентность возникает только в сверхпроводящей области $T < T_c$. Во втором сценарии псевдощелевое состояние определяется зарядовыми или спиновыми флуктуациями (антиферромагнитными флуктуациями или флуктуациями типа волн зарядовой плотности), которые по существу не связаны с явлением сверхпроводимости [3].

Отметим, что рассматриваемые соединения представляют собой сильно анизотропные системы с эффективно пониженной (квазидвумерной) размерностью. Хорошо известно, что в таких системах возрастает роль флуктуаций параметра порядка (ПП) [4]. Учет этих флуктуаций существенно снижает температуру сверхпроводящего перехода и в некоторых случаях может приводить даже к изменению типа фазового перехода [5, 6]. Однако при рассмотрении флуктуаций сверхпроводящего ПП $\Delta = |\Delta| \exp(i\phi)$ обычно либо амплитудными, либо фазовыми флуктуациями пренебрегают (не говоря уже о подходах, в которых эти флуктуации вообще не учитываются). В ряде случаев это оказывается вполне приемлемым приближением.

* E-mail: groshev_a.g@mail.ru

** E-mail: arzhnikof@bk.ru

Например, в работе [2] было показано, что вблизи сверхпроводящего перехода амплитуда не имеет критического поведения и ее флуктуации не влияют на фазовый переход. Тем не менее, в системах с пониженной размерностью при некоторых условиях амплитудные флуктуации все же могут оказывать существенное влияние на сверхпроводящие свойства [6] и поэтому должны учитываться. Это обусловлено тем, что наиболее вероятные амплитудные и фазовые флуктуации оказываются эффективно связанными. Такая взаимосвязь рассматривалась в работах [5, 7] в рамках вариационного приближения. Важным результатом исследований [5, 7] является наличие двух областей псевдощелевого состояния выше температуры сверхпроводящего перехода с частично коррелированной фазой, где основную роль играют фазовые флуктуации, и с полностью разупорядоченной фазой, где основную роль играют амплитудные флуктуации. Используемые в этих работах приближения не лишены недостатков. В частности, в этих работах не учитывалось затухание одночастичных состояний, возникающее в результате учета рассеяния носителей заряда на флуктуациях связанных электронных пар. Перенормировка спектра одночастичных состояний в результате такого рассеяния описывается собственно-энергетической частью одночастичной функции Грина, которая определяет спектральную плотность, и ее самосогласованное вычисление представляется необходимым при объяснении псевдощелевого состояния. Одновременный учет затухания одночастичных состояний и эффективной взаимосвязи между амплитудными и фазовыми флуктуациями в рамках какого-либо самосогласованного подхода, по нашим сведениям, до сих пор не проводился.

В настоящей работе рассматриваются синглетные сверхпроводящие состояния с расширенной s -симметрией, в которых сверхпроводящая щель зависит от волнового вектора по закону $\Delta(k) \propto \cos k_x + \cos k_y$ [8, 9], и $d_{x^2-y^2}$ -симметрией с зависимостью $\Delta(k) \propto \cos k_x - \cos k_y$ [10, 11]. Исследуются особенности сверхпроводящих переходов, возникающие за счет термических флуктуаций ПП с одновременным и самосогласованным учетом как затухания одночастичных состояний, так и эффективной взаимосвязи между амплитудными и фазовыми флуктуациями. Исследуется возможность возникновения псевдощелевого состояния в результате флуктуаций сверхпроводящего ПП. Исследование проводится на основе однозонной модели на квадратной решетке с эффективным притяжени-

ем между электронами, находящимися на соседних узлах. Предполагается, что это притяжение не зависит от температуры. Выбор такого взаимодействия обусловлен следующими обстоятельствами. Во-первых, принято считать, что основным механизмом спаривания электронов в ВТСП-соединениях является спин-флуктуационный механизм [12–15], который в простейшем приближении обеспечивает эффективное притяжение между электронами, находящимися на соседних узлах. Во-вторых, поскольку природа ВТСП до конца не ясна, предполагается, что вклад в эффективное притяжение между электронами могут давать и другие механизмы (например, полярный). В-третьих, поскольку характерные значения энергии взаимодействия, обеспечивающего эффективное притяжение между электронами, много больше температуры перехода в сверхпроводящее состояние (например, величина обменного взаимодействия в спиновых флуктуациях, см. [12]), предполагается, что эффективное притяжение между электронами не меняется в рассматриваемой области температур. Наконец, поскольку ВТСП являются слоистыми соединениями, рассматривается двумерный закон дисперсии с параметрами, соответствующими реальным системам на основе купратов [16]. При этом не учитываются флуктуации, разрушающие сверхпроводимость в системах с размерностью $D \leq 2$, обеспечивая тем самым квазидвумерность рассматриваемой модели. Согласно теореме Мермина–Вагнера–Хоэнберга [17–19] в строго двумерной вырожденной системе дальний порядок отсутствует при любой отличной от нуля температуре и сверхпроводящие состояния могут проявляться лишь в фазовых переходах типа Березинского–Костерлица–Таулесса [20]. Предлагаемый метод решения задачи основан на самосогласованных уравнениях теории континуального интегрирования в приближении когерентного потенциала, который в данном случае имеет недиагональный беспорядок и требует особого подхода. В предположении, что квантовые флуктуации сверхпроводящего ПП важны только при достаточно низких температурах, внимание сосредоточено на учете термических (классических) флуктуаций, играющих, по нашему мнению, главную роль в подавляющей области фазовой диаграммы, и в том числе в области псевдощели. Оценка вклада квантовых флуктуаций в подавление температуры сверхпроводящего перехода, выполненная в работе [21], дает значение порядка 6 %. Сравнение фазовых диаграмм, вычисленных с учетом термических и квантовых фазовых флуктуаций, также говорит о

важности последних только при достаточно низких температурах [22].

2. МОДЕЛЬНЫЙ ГАМИЛЬТОНИАН И МЕТОД ФУНКЦИОНАЛЬНОГО ИНТЕГРИРОВАНИЯ

Рассматривается однозонный гамильтониан $t-t'-V$ модели с притяжением между электронами, находящимися на ближайших узлах квадратной решетки:

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{i,j,s} t_{ij} \hat{c}_{is}^\dagger \hat{c}_{js} - \sum_j \mu \hat{n}_j - V \sum_{j,\delta} \hat{n}_{j\uparrow} \hat{n}_{j+\delta\downarrow}, \quad (1)$$

где $t_{ij} = -t$ — матричные элементы электронных перескоков на ближайшие узлы, $t_{ij} = t'$ — следующие за ближайшими; $\hat{c}_{js}^\dagger (\hat{c}_{js})$ — операторы рождения (уничтожения) электрона на узле j с проекцией спина s ; $n_{js} = \hat{c}_{js}^\dagger \hat{c}_{js}$, n_j — оператор электронной плотности; V — параметр межузельного притяжения между электронами, μ — химический потенциал. С помощью коммутационных преобразований этот гамильтониан может быть приведен к гамильтониану взаимодействующих электронных пар в следующем виде:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} = & \sum_{i,j,s} t_{ij} \hat{c}_{is}^\dagger \hat{c}_{js} - \sum_j \mu \hat{n}_j - \\ & - \frac{V}{2} \sum_{j,\delta} [\hat{n}_{j\uparrow} + \hat{n}_{j+\delta\downarrow} - 1] - \\ & - \frac{V}{4} \sum_{j,\delta} \left[(\hat{O}_{j,\delta}^\dagger + \hat{O}_{j,\delta})^2 - (\hat{O}_{j,\delta}^\dagger - \hat{O}_{j,\delta})^2 \right]. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь введены операторы рождения $\hat{O}_{j,\delta}^\dagger = \hat{c}_{j\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j+\delta\downarrow}^\dagger$ и уничтожения $\hat{O}_{j,\delta} = \hat{c}_{j+\delta\downarrow} \hat{c}_{j\uparrow}$ электронной пары на узле j и его ближайшем соседе $j + \delta$.

Задача решается в рамках метода функционального интегрирования с использованием преобразования Хаббарда — Стратоновича в двухполевом представлении (см., например, [23]). В этом методе проблема вычисления статистической суммы взаимодействующих электронных пар сводится к проблеме вычисления статистической суммы независимых электронных пар, находящихся в расширенном пространстве не зависящих от времени (в статическом приближении) вспомогательных флюкутирующих полей, $V_{j,\delta}^+$ и $V_{j,\delta}^-$,

$$Z = \prod_{j,\delta} \int dV_{j,\delta}^+ dV_{j,\delta}^- \exp [-\beta \Omega(V^+, V^-)],$$

$$\begin{aligned} \Omega(V^+, V^-) = & \Omega^0(V^+, V^-) + \\ & + \Omega^*(V^+, V^-) + \dots, \end{aligned}$$

$$\Omega^0(V^+, V^-) = V \sum_{j,\delta} \left[(V_{j,\delta}^+)^2 + (V_{j,\delta}^-)^2 \right],$$

$$\Omega^*(V^+, V^-) = -\frac{1}{\beta} \ln Z^*(V^+, V^-),$$

$$\begin{aligned} Z^*(V^+, V^-) = & \\ = & \text{Sp } T_\tau \exp \left[- \int_0^\beta d\tau \hat{\mathcal{H}}(V^+, V^-, \tau) \right], \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}(V^+, V^-, \tau) = & \sum_{i,j,s} t_{ij} \hat{c}_{is}^\dagger(\tau) \hat{c}_{js}(\tau) - \\ & - \sum_j \mu \hat{n}_j(\tau) - \frac{V}{2} \sum_{j,\delta} [\hat{n}_{j\uparrow}(\tau) + \hat{n}_{j+\delta\downarrow}(\tau) - 1] - \\ & - V \sum_{j,\delta} \left[(V_{j,\delta}^+ + iV_{j,\delta}^-) \hat{O}_{j,\delta}^\dagger(\tau) + \right. \\ & \left. + (V_{j,\delta}^+ - iV_{j,\delta}^-) \hat{O}_{j,\delta}(\tau) \right], \end{aligned}$$

где Sp — полный квантовомеханический след; T_τ — оператор упорядочения по мнимому времени $\tau \in [0, \beta]$, $\beta = 1/k_B T$; \dots — члены, не зависящие от вспомогательных полей. Все зависящие от времени операторы являются операторами в представлении взаимодействия. Поскольку при $T \rightarrow 0$ метод функционального интегрирования в статическом приближении воспроизводит результаты приближения Хартри — Фока (ХФ), в качестве невозмущенного гамильтониана удобно выбрать гамильтониан рассматриваемой модели (1) в приближении ХФ. В этом случае возмущение будет определяться только термическими флюкутациями сверхпроводящего ПП. Как отмечалось выше, мы пренебрегли квантовыми флюкутациями, для учета которых необходим выход за рамки статического приближения. При вычислении статистической суммы в рассматриваемом случае удобно перейти от переменных $V_{j,\delta}^+$ и $V_{j,\delta}^-$ к полярным переменным: модуль $\Delta_{j,\delta}$ и фаза $\phi_{j,\delta}$, вводя таким образом флюкутирующий комплексный ПП $\Delta_{j,\delta} \exp(i\phi_{j,\delta})$:

$$\begin{aligned}
Z &= \prod_{j,\delta} \int_0^\infty \Delta_{j,\delta} d\Delta_{j,\delta} \int_{-\pi}^\pi d\phi_{j,\delta} \exp [-\beta \Omega(\Delta, \phi)], \\
\Omega(\Delta, \phi) &= \Omega^0(\Delta, \phi) + \Omega^*(\Delta, \phi) + \dots, \\
\Omega^0(\Delta, \phi) &= V \sum_{j,\delta} \Delta_{j,\delta}^2, \\
\Omega^*(\Delta, \phi) &= -\frac{1}{\beta} \ln Z^*(\Delta, \phi), \\
Z^*(\Delta, \phi) &= \text{Sp} T_\tau \exp \left[- \int_0^\beta d\tau \hat{\mathcal{H}}(\Delta, \phi, \tau) \right], \\
\hat{\mathcal{H}}(\Delta, \phi, \tau) &= \hat{\mathcal{H}}_{HF}(\Delta, \alpha) + \Delta \hat{\mathcal{U}}(\Delta, \phi, \tau), \\
\hat{\mathcal{H}}_{HF}(\Delta, \alpha) &= \sum_{i,j,s} t_{ij} \hat{c}_{is}^+ \hat{c}_{js} - \sum_j \mu \hat{n}_j - \\
&\quad - \frac{V}{2} \sum_{j,\delta} [\hat{n}_{j\uparrow} + \hat{n}_{j+\delta\downarrow} - 1] - \\
&\quad - V \sum_{j,\delta} \bar{\Delta}_{j,\delta} [\exp(i\alpha_{j,\delta}) \hat{O}_{j,\delta}^\dagger + \exp(-i\alpha_{j,\delta}) \hat{O}_{j,\delta}], \\
\Delta \hat{\mathcal{U}}(\Delta, \phi, \tau) &= -V \sum_{j,\delta} [\Delta_{j,\delta} \exp(i\phi_{j,\delta}) - \\
&\quad - \bar{\Delta}_{j,\delta} \exp(i\alpha_{j,\delta})] \hat{O}_{j,\delta}^\dagger(\tau) - \\
&\quad - V \sum_{j,\delta} [\Delta_{j,\delta} \exp(-i\phi_{j,\delta}) - \\
&\quad - \bar{\Delta}_{j,\delta} \exp(-i\alpha_{j,\delta})] \hat{O}_{j,\delta}(\tau),
\end{aligned} \tag{4}$$

где $\hat{\mathcal{H}}_{HF}$ — гамильтониан рассматриваемой модели (1) в приближении ХФ; $\Delta \hat{\mathcal{U}}$ — потенциал флюктуирующих полей; $\bar{\Delta}_{j,\delta}$ — значение амплитуды усредненного по флюктуациям сверхпроводящего ПП; $\alpha_{j,\delta}$ — фаза ПП, определяющая его симметрию. В данной работе мы ограничимся изучением сверхпроводящих фаз с s - и d -симметрией. Для этого необходимо выбрать амплитуду в виде функции, не зависящей от узлов j и их ближайших соседей δ , при этом фаза должна зависеть только от ближайших соседей $\bar{\Delta}_{j,\delta} \exp(i\alpha_{j,\delta}) = \bar{\Delta} \exp(i\alpha_\delta)$:

$$\alpha_\delta = \begin{cases} \alpha, & \delta = \pm\delta_x, \\ -\alpha, & \delta = \pm\delta_y, \end{cases} \tag{5}$$

где δ_x и δ_y — проекции δ на координатные оси. Тогда значениям фазы $\alpha = 0$ и $\alpha = \pi$ соответствует s -симметрия, а $\alpha = \pm\pi/2$ — d -симметрия.

В основном состоянии термические флюктуации сверхпроводящего ПП отсутствуют и, следовательно, потенциал флюктуирующих полей $\Delta \hat{\mathcal{U}}$ исчезает, а функция распределения амплитудных и фазовых флюктуаций сводится к дельта-функциям Дирака

$$P(\Delta_{j,\delta}, \phi_{j,\delta}) = \delta(\Delta_{j,\delta} - \bar{\Delta}_{j,\delta}) \delta(\phi_{j,\delta} - \alpha_{j,\delta}).$$

В этом случае $\bar{\Delta}_{j,\delta}$ является амплитудой ПП, вычисленной в приближении ХФ. Вычисление интеграла по амплитудному полю $\Delta_{j,\delta}$ в (4) проводится в приближении «седловой точки», в котором переменное поле $\Delta_{j,\delta}$ заменяется его значением в «седловой точке» $\Delta_{j,\delta}(\phi)$. При этом учитываются наиболее вероятные амплитудные флуктуации. Это приближение предполагает, что амплитудные флуктуации гораздо быстрее, чем флюктуации фазы, и амплитудное поле успевает подстроиться под распределение фазы равновесным образом. Аналогичное приближение использовалось в упомянутом выше вариационном подходе [5, 7]. При вычислении «седловой точки» важно учесть, что подынтегральная функция в этой точке не должна обращаться в нуль. Для удовлетворения этого требования необходимо включить в термодинамический потенциал множитель $\Delta_{j,\delta}$ из якобиана (4), как это было сделано в работах [5, 7]. В результате уравнение для нахождения «седловой точки», получаемое из условия минимума термодинамического потенциала $\partial\Omega/\partial\Delta_{j,\delta} = 0$, не имеет решения $\Delta_{j,\delta} = 0$ ни при какой температуре, кроме $T = 0$. Заметим, что не все авторы учитывают эту особенность [24–27], получая в результате нулевое значение амплитуды сверхпроводящего ПП при конечных температурах. После некоторых преобразований уравнения для минимума термодинамического потенциала нетрудно получить самосогласованное уравнение для определения амплитуды сверхпроводящего ПП $\Delta(\phi)$:

$$\begin{aligned}
\Delta^2(\phi) - \frac{\Delta(\phi)K(\phi)}{2} - \frac{1}{2\beta V} &= 0, \\
K(\phi) &= \frac{1}{\beta} \sum_n \exp(i\phi_\delta) G_{j+\delta,j}^{\uparrow\downarrow}(i\omega_n) + \\
&\quad + \frac{1}{\beta} \sum_n \exp(-i\phi_\delta) G_{j,j+\delta}^{\uparrow\downarrow}(i\omega_n),
\end{aligned} \tag{6}$$

где $G_{j+\delta,j}^{\uparrow\downarrow}(i\omega_n)$ и $G_{j,j+\delta}^{\uparrow\downarrow}(i\omega_n)$ представляют собой фурье-образы аномальных температурных гриновских функций, определяемых стандартными соотношениями:

$$\begin{aligned}
G_{j,j'}^{\downarrow\uparrow}(\tau - \tau') &= -\langle T_\tau \hat{c}_{j\downarrow}^\dagger(\tau) \hat{c}_{j'\uparrow}^\dagger(\tau') \rangle, \\
G_{j,j'}^{\uparrow\downarrow}(\tau - \tau') &= -\langle T_\tau \hat{c}_{j\uparrow}(\tau) \hat{c}_{j'\downarrow}(\tau') \rangle,
\end{aligned} \tag{7}$$

$\omega_n = (2n + 1)\pi/\beta$ — мацубаровские частоты для ферми-частиц. Из явных выражений для $G_{j+\delta,j}^{\uparrow\downarrow}(i\omega_n)$ и $G_{j,j+\delta}^{\uparrow\downarrow}(i\omega_n)$ (см. Приложение) следует свойство $G_{j\pm\delta_x,j}^{\downarrow\uparrow}(i\omega_n) = G_{j,j\pm\delta_y}^{\uparrow\downarrow}(i\omega_n)$, которое приводит к независимости $K(\phi)$ от узлов и их ближайших соседей. Выбирая решение уравнения

(6) с $\Delta(\phi) > 0$, можно представить его в следующем виде:

$$\Delta(\phi) = \frac{K(\phi)}{4} + \sqrt{\frac{K^2(\phi)}{16} + \frac{1}{2V\beta}}. \quad (8)$$

Известно, что термодинамический потенциал (4) может быть выражен через температурные гриновские функции [28, 29]. Это преобразование удобнее проводить в представлении матриц Намбу

$$\begin{aligned} \hat{c}_{j\delta}(\tau) &= \begin{bmatrix} \hat{c}_{j\uparrow}(\tau) \\ \hat{c}_{j+\delta\downarrow}^\dagger(\tau) \end{bmatrix}, \\ \hat{c}_{j\delta}^\dagger(\tau) &= \begin{bmatrix} \hat{c}_{j\uparrow}^\dagger(\tau) & \hat{c}_{j+\delta\downarrow}(\tau) \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (9)$$

через которые выражается температурная функция Грина и флюктуирующий потенциал (4):

$$\begin{aligned} G_{j\delta}(\tau - \tau') &= -\left\langle T_\tau \hat{c}_{j\delta}(\tau) \hat{c}_{j\delta}^\dagger(\tau') \right\rangle = \\ &= \begin{bmatrix} G_{j,j}^{\uparrow\uparrow}(\tau - \tau') & G_{j,j+\delta}^{\uparrow\downarrow}(\tau - \tau') \\ G_{j+\delta,j}^{\downarrow\uparrow}(\tau - \tau') & G_{j+\delta,j+\delta}^{\downarrow\downarrow}(\tau - \tau') \end{bmatrix}, \\ \Delta\hat{\mathcal{U}}(\Delta, \phi, \tau) &= \sum_{j,\delta} \hat{c}_{j\delta}^\dagger(\tau) \Delta\mathcal{U}_{j\delta} \hat{c}_{j\delta}(\tau), \\ \Delta\mathcal{U}_{j\delta} &= \begin{bmatrix} 0 & \Delta\hat{\mathcal{U}}_{j,j+\delta}^{\uparrow\downarrow} \\ \Delta\hat{\mathcal{U}}_{j+\delta,j}^{\downarrow\uparrow} & 0 \end{bmatrix}, \\ \Delta\hat{\mathcal{U}}_{j,j+\delta}^{\uparrow\downarrow} &= V [\overline{\Delta} \exp(i\alpha_\delta) - \Delta(\phi) \exp(i\phi_\delta)], \\ \Delta\hat{\mathcal{U}}_{j+\delta,j}^{\downarrow\uparrow} &= \\ &= V [\overline{\Delta} \exp(-i\alpha_\delta) - \Delta(\phi) \exp(-i\phi_\delta)]. \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь $G_{j,j}^{\uparrow\uparrow}(\tau - \tau')$ и $G_{j+\delta,j+\delta}^{\downarrow\downarrow}(\tau - \tau')$ — нормальные температурные гриновские функции, определяемые стандартными соотношениями:

$$\begin{aligned} G_{j,j'}^{\uparrow\uparrow}(\tau - \tau') &= -\left\langle T_\tau \hat{c}_{j\uparrow}(\tau) \hat{c}_{j'\uparrow}^\dagger(\tau') \right\rangle, \\ G_{j,j'}^{\downarrow\downarrow}(\tau - \tau') &= -\left\langle T_\tau \hat{c}_{j\downarrow}^\dagger(\tau) \hat{c}_{j'\downarrow}(\tau') \right\rangle. \end{aligned} \quad (11)$$

Отметим, что в представлении матриц Намбу для температурной функции Грина (10) может использоваться обычная диаграммная техника без введения новых диаграмм для ее аномальных слагаемых. Умножая флюктуирующий потенциал $\Delta\hat{\mathcal{U}}$ в (4) на константу связи λ и дифференцируя термодинамический потенциал $\Omega^*(\lambda)$ по этой константе, можно получить выражение для этой производной через температурную функцию Грина (10):

$$\frac{\partial\Omega^*(\lambda)}{\partial\lambda} = \frac{1}{\beta} \sum_{n,j,\delta} \text{Tr} [\Delta\mathcal{U}_{j\delta} G_{j,\delta}(i\omega_n, \lambda)], \quad (12)$$

где Tr — сумма диагональных элементов. Свойство $G_{j\pm\delta_x,j}^{\downarrow\uparrow}(i\omega_n) = G_{j,j\pm\delta_y}^{\uparrow\downarrow}(i\omega_n)$, следующее из их явных выражений (см. Приложение), приводит к независимости от ближайших соседей выражения под знаком суммы в (12). Для простоты индексы узлов j и их ближайших соседей δ в дальнейшем не указываются. С помощью уравнения Дайсона в двухузельном приближении когерентного потенциала (two-site coherent-potential approximation, TCPA) (A.2) термодинамический потенциал Ω^* в расчете на одну электронную пару выражается через температурные гриновские функции после интегрирования уравнения (12) по константе связи λ от $\lambda = 0$ до $\lambda = 1$ с учетом того, что $\Omega^*(\lambda = 0) = \Omega_{HF}$:

$$\begin{aligned} \Omega^* &= \Omega_{HF} + \frac{1}{\beta} \sum_n \ln (\det [1 + F(i\omega_n)\Sigma(i\omega_n)]) - \\ &- \frac{1}{\beta} \sum_n \ln (\det [1 - F(i\omega_n)(\Delta\mathcal{U}(\phi) - \Sigma(i\omega_n))]). \end{aligned} \quad (13)$$

Здесь $\Omega_{HF} = -1/\beta \ln(\text{Sp exp}[-\beta\hat{H}_{HF}])$ — термодинамический потенциал в приближении ХФ, $F(i\omega_n)$ — фурье-образ эффективной температурной гриновской функции в представлении матриц Намбу (A.9), $\Delta\mathcal{U}(\phi)$ — флюктуирующий потенциал (10), $\Sigma(i\omega_n)$ — собственно-энергетическая часть в представлении матриц Намбу (A.1). Суммирование по мацубаровским частотам проводится стандартным образом, с использованием выражения

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta} \sum_n f(i\omega_n) &= \\ &= \pm \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE \text{ th}\left(\frac{\beta E}{2}\right) \text{Im}[f(E^\pm)], \end{aligned} \quad (14)$$

где $E^\pm = E \pm i0$. После несложных преобразований статистическая сумма в расчете на одну электронную пару представляется в виде интеграла только по фазовому полю ϕ :

$$\begin{aligned} Z &= \exp[-\beta(\Omega_{HF} + \Omega[\Sigma] + \Delta\Omega)], \\ \Omega[\Sigma] &= -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE \text{ th}\left(\frac{\beta E}{2}\right) \times \\ &\times \arg(\det[1 + F(E^-)\Sigma(E^-)]), \\ \Delta\Omega &= -\frac{1}{\beta} \ln \left(\int_{-\pi}^{\pi} d\phi \Delta(\phi) \exp[-\beta\Delta\Omega(\phi)] \right), \\ \Delta\Omega(\phi) &= V\Delta^2(\phi) + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE \text{ th}(\beta E/2) \times \\ &\times \arg(\det[1 - F(E^-)[\Delta\mathcal{U}(\phi) - \Sigma(E^-)]]), \end{aligned} \quad (15)$$

где $\Omega[\Sigma]$ — термодинамический потенциал эффективной среды, определяемый собственно-энергетической частью $\Sigma(E)$ (A.1); $\Delta\Omega$ — флуктуационная часть термодинамического потенциала. К этим уравнениям необходимо добавить уравнение для определения химического потенциала:

$$n(\mu) = 1 + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE \operatorname{th}\left(\frac{\beta E}{2}\right) \times \times \operatorname{Im}[F^\downarrow(E^-) - F^\uparrow(E^-)], \quad (16)$$

где $F^\uparrow(E^-)$ и $F^\downarrow(E^-)$ представляют собой диагональные элементы эффективной температурной гриновской функции (A.2) (см. Приложение). Средние значения термодинамических величин и средняя матрица рассеяния в самосогласованных уравнениях ТСРД для собственно-энергетической части $\Sigma(E)$ вычисляются следующим образом:

$$\langle A \rangle = \int_{-\pi}^{\pi} d\phi A(\phi) P(\phi), \quad (17)$$

$$P(\phi) = \exp[-\beta\Delta\Omega(\phi) + \beta\Delta\Omega].$$

Здесь A — усредняемая величина. Численное решение этих самосогласованных уравнений позволяет определить сверхпроводящие свойства рассматриваемой системы при условии, что термодинамический потенциал для данного α является минимальным.

Из (17) следует, что вероятность флуктуации фазового поля $\Delta\phi = \phi - \alpha$ при температуре T определяется разностью термодинамических потенциалов $\Delta F(\phi) = \Delta\Omega(\phi) - \Delta\Omega(\alpha)$, где α — значение фазы, при которой достигается глобальный минимум термодинамического потенциала. Таким образом, $\Delta F(\phi)$ представляет собой энергию, необходимую для фазовой флуктуации $\Delta\phi$, или фазовую жесткость. Именно фазовые флуктуации определяют параметры эффективной среды (A.1) при конечной температуре. При $T \geq T_c$ глобальный минимум термодинамического потенциала исчезает и для реализации любой фазовой флуктуации не требуется энергии, $\Delta F(\phi) = 0$ (т. е. фазовая жесткость в системе отсутствует).

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

При расчетах использовались характерные для купратов параметры $V = t$ и $t' = 0.2t$ [16], которые выбирались ранее при вычислении фазовых диаграмм сверхпроводящих состояний без учета флуктуаций ПП [30]. Как показано в работе [30], при этих

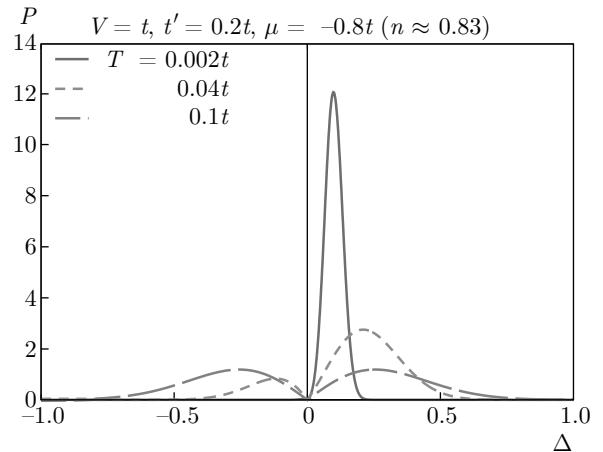


Рис. 1. Вероятности распределения амплитудных флуктуаций сверхпроводящего ПП, рассчитанные при значении химического потенциала $\mu = -0.8t$, соответствующем концентрации электронов $n \approx 0.83$

параметрах в большей части фазовой диаграммы реализуются сверхпроводящие состояния с расширенной s - и $d_{x^2-y^2}$ -симметрией.

3.1. Учет ограниченных флуктуаций фазы ($\phi = \pm 0.5\pi$)

Для анализа приближения «седловой точки», наиболее часто используемого в методе континуального интегрирования, были проведены расчеты сверхпроводящего состояния с d -симметрией и ограниченными ($\phi = \pm 0.5\pi$) флуктуациями фазы. Такое ограничение позволяет при наименьших численных затратах сравнить решения, полученные двумя способами. В первом способе, без использования дополнительных приближений, область изменения амплитудного поля расширяется на отрицательные значения. В таком подходе положительные значения амплитудного поля связаны с фазой $\phi = 0.5\pi$, а отрицательные — с фазой $\phi = -0.5\pi$. Интегрирование проводится по всей области изменения амплитудного поля, включая его отрицательные значения. Во втором способе используется приближение «седловой точки» для амплитудного поля, в котором интегрирование по этому полю заменяется суммированием по седловым точкам $\Delta(\phi)$ с $\phi = \pm 0.5\pi$. На рис. 1 и 2 приведены примеры самосогласованного расчета вероятностей распределения амплитудных и фазовых флуктуаций $\phi = \pm 0.5\pi$ ПП соответственно для первого и второго способов. Из рисунков видно, что существует температура T_c , выше которой вероятности фазовых флуктуаций $\phi = \pm 0.5\pi$ сравниваются и

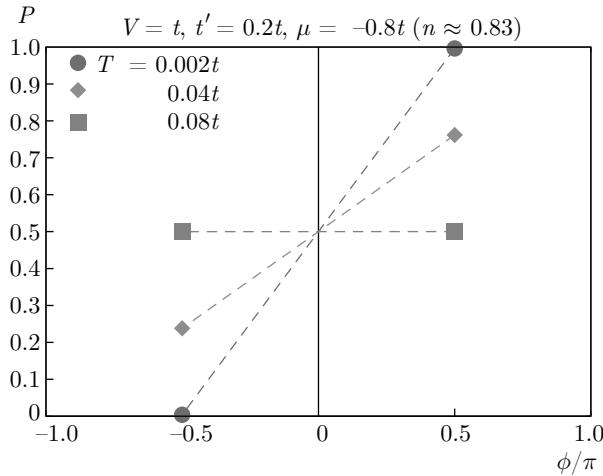


Рис. 2. Вероятности фазовых флюктуаций $\phi = \pm 0.5\pi$ сверхпроводящего ПП

система переходит в нормальное состояние. Температурные зависимости амплитуд усредненного ПП и значения T_c , вычисленные в приближении «седловой точки» $\langle\Delta_{sp}\rangle$ и без использования дополнительных приближений $\langle\Delta_a\rangle$ представлены на рис. 3. Неплохое согласие между результатами двух способов во всем рассматриваемом диапазоне температур позволяет обосновать использование приближения «седловой точки» в дальнейших расчетах. Дополнительно на рис. 3 приведена температурная зависимость амплитуды ПП Δ_{HF} , полученная в методе ХФ [30] без учета флюктуаций. Из сравнения видно, что флюктуации существенно изменяют ее поведение и температуру фазового перехода.

3.2. Полный учет флюктуаций фазы $\phi \in [-\pi, \pi]$

В этом разделе рассматриваются решения задачи с учетом всех возможных фазовых флюктуаций из интервала $[-\pi, \pi]$. Результаты расчетов амплитуды $\langle\Delta\rangle$ усредненного ПП представлены на рис. 3. Зависимость амплитуды усредненного ПП от концентрации носителей заряда при температуре $T = 0.002t$ приведена на рис. 4. Видно, что при увеличении числа электронов происходит переход из сверхпроводящего состояния с s -симметрией в сверхпроводящее состояние с d -симметрией. Такая же последовательность фазовых переходов получена в приближении ХФ [30], однако даже при такой относительно низкой температуре $T = 0.002t$ сверхпроводящие области существенно сужаются. На рис. 3 и рис. 5 представлены температурные за-

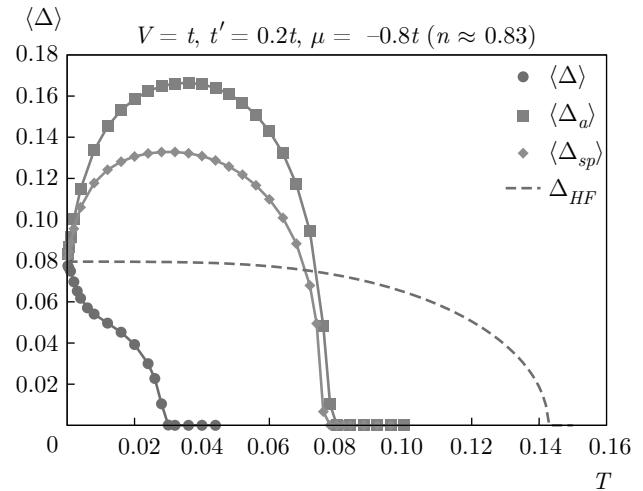


Рис. 3. Температурные зависимости амплитуды усредненного ПП с d -симметрией в различных приближениях

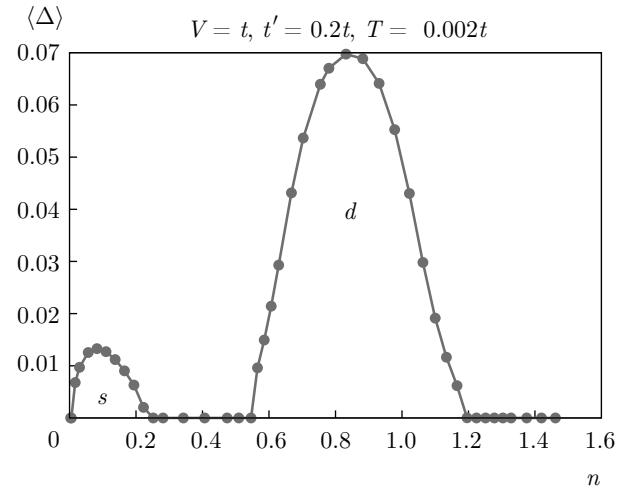


Рис. 4. Зависимость амплитуды усредненного ПП от концентрации носителя заряда при температуре $T = 0.002t$

висимости амплитуд усредненного ПП в сверхпроводящих областях с d - ($n \approx 0.83$) и s -симметрией ($n \approx 0.108$) соответственно. Отметим, что при учете фазовых флюктуаций из интервала $[-\pi, \pi]$ происходит существенное изменение их температурного поведения по сравнению с результатами, в которых учитывались только ограниченные значения фазы $\phi = \pm 0.5\pi$, при этом существенно, приблизительно в 4 раза для состояния с d -симметрией и приблизительно в 7 раз для состояния с s -симметрией, снижается температура перехода в сверхпроводящее состояние. Согласно БКШ-теории отношение энергетической щели Δ_0 к температуре сверхпроводящего перехода T_c имеет универсальное значение

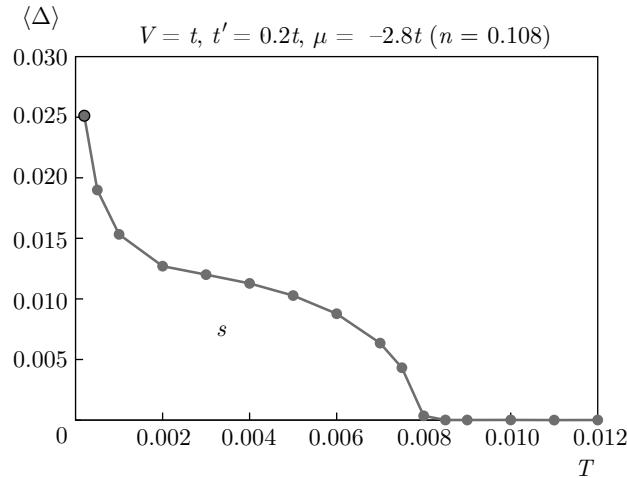


Рис. 5. Температурная зависимость амплитуды усредненного ПП с расширенной s -симметрией

$\Delta_0/T_c = 1.76$. Результаты, полученные в приближении ХФ [30] для рассматриваемой модели, дают значения $1 \lesssim \Delta_0/T_c \lesssim 1.4$, которые незначительно отличаются от результата БКШ. Такие пределы изменения Δ_0/T_c получены в [30] для $t'/t = 0.2$ и $t'/t = 0.7$ при достаточно широком изменении значений параметра межузельного притяжения V/t : 0.25, 0.5, 1. Предполагая, что и при учете флюктуаций сохранится такая относительно слабая зависимость пределов изменения Δ_0/T_c от V/t , можно говорить о том, что Δ_0/T_c в основном определяется параметрами t' и n . Заметим, что, поскольку в Δ_0/T_c входит значение энергетической щели Δ_0 при $T = 0$, изменение Δ_0/T_c при учете флюктуаций происходит в основном за счет понижения T_c . Исходя из полученных в настоящей работе значений T_c для d - и s -симметрии, можно оценить пределы изменения Δ_0/T_c с учетом фазовых флюктуаций $4 \lesssim \Delta_0/T_c \lesssim 9.8$. Кроме того, приведенное на рис. 4 в [30] распределение энергетической щели Δ_0 по фазовой диаграмме в переменных $t'-n$ позволяет качественно понять зависимость Δ_0/T_c от t' и n . В частности, максимальные значения Δ_0/T_c можно ожидать при значениях t' и n , соответствующих особенностям Ван Хова, а уменьшение t' должно вести к понижению нижнего предела изменения Δ_0/T_c . Проведенные в настоящей работе расчеты показывают, что при учете фазовых флюктуаций это отношение действительно значительно увеличивается: $\Delta_0/T_c \approx 5.3$ для d -симметрии и $\Delta_0/T_c \approx 6.2$ для расширенной s -симметрии (в принятых выше обозначениях $\Delta_0 = 2V\langle \Delta \rangle$). Предварительные расчеты при $t'/t = 0.7$ дают для d -симметрии значение

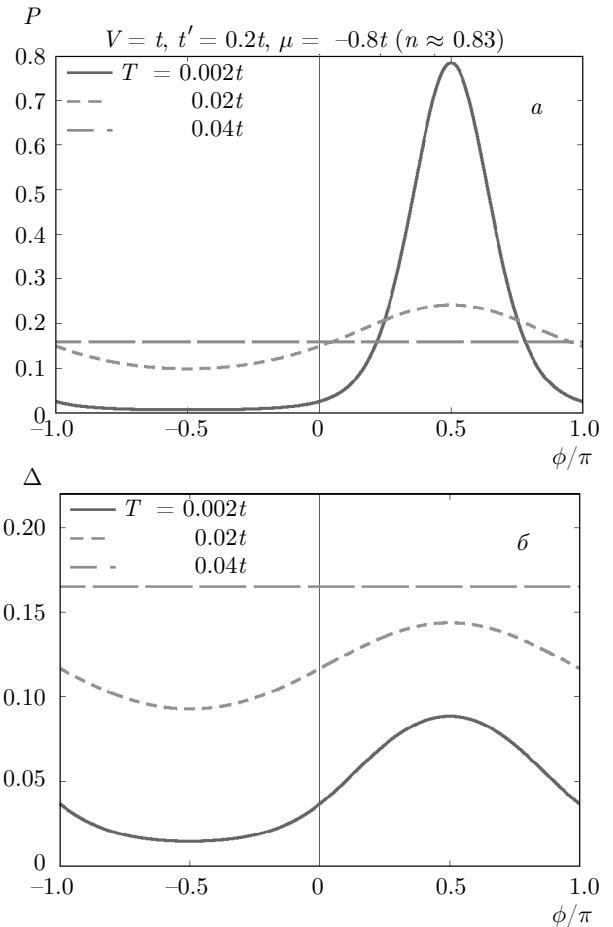


Рис. 6. Вероятности распределения фазовых флюктуаций ф сверхпроводящего ПП с d -симметрией (а) и зависимости амплитуд ПП с d -симметрией от ϕ (б)

ние $\Delta_0/T_c \approx 5$. В экспериментах на ВТСП-соединениях $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ было получено значение $\Delta_0/T_c \approx 3.95$ [31].

Результаты самосогласованного расчета вероятностей распределения фазовых флюктуаций и наиболее вероятных флюктуаций амплитуды, вычисленные в приближении «седловой точки» для трех различных температур, приведены на рис. 6. Видно, что наиболее вероятное значение фазы соответствует d -симметрии, а форма кривых далека от гауссовой даже при относительно низких температурах $T = 0.002t$. Следует отметить не менее важный результат, связанный с существенной зависимостью наиболее вероятных значений амплитуды ПП от фазы флюктуаций. Это означает, что приближение, в которых амплитудные флюктуации не учитываются, а именно: амплитуда является константой и не зависит от фазовых флюктуаций, не оправданы. Важной величиной, на которую влияют флюктуации

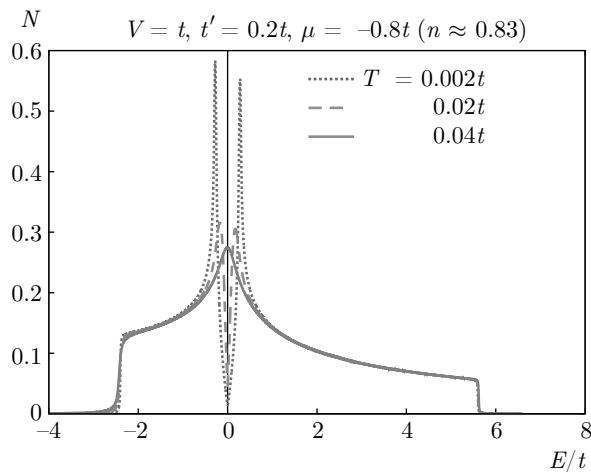


Рис. 7. Плотность электронных состояний, вычисленная для сверхпроводящего состояния с d -симметрией

сверхпроводящего ПП при самосогласованном подходе является собственно-энергетическая часть одиночастичной функции Грина, определяющая плотность состояний. Плотность состояний, мнимая и действительная части собственной энергии для трех различных температур, представлены на рис. 7, 8. Из приведенных графиков видно, что провал в плотности электронных состояний с повышением температуры уменьшается и полностью исчезает в точке фазового перехода одновременно с потерей фазовой когерентности ПП. Мнимая и действительная части собственной энергии, напротив, с ростом температуры увеличиваются в результате усиления рассеяния на флюктуациях связанных электронных пар и становятся значимыми вблизи фазового перехода (рис. 8 a, b).

Следует также отметить определенную структуру в энергетической зависимости аномальной части собственной энергии (рис. 8 c). Относительный вклад этой структуры составляет порядка 10 % и, вполне возможно, может влиять на возбуждение электронов. С ростом температуры величина аномальной части собственной энергии уменьшается и обращается в нуль в точке фазового перехода.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе проведено исследование влияния (фазовых) флюктуаций сверхпроводящего ПП на поведение сверхпроводящей щели, одноэлектронной плотности состояний и температуры фазового перехода в синглетных сверхпроводящих фазах с расширенной s - и $d_{x^2-y^2}$ -симметрией. Показано,

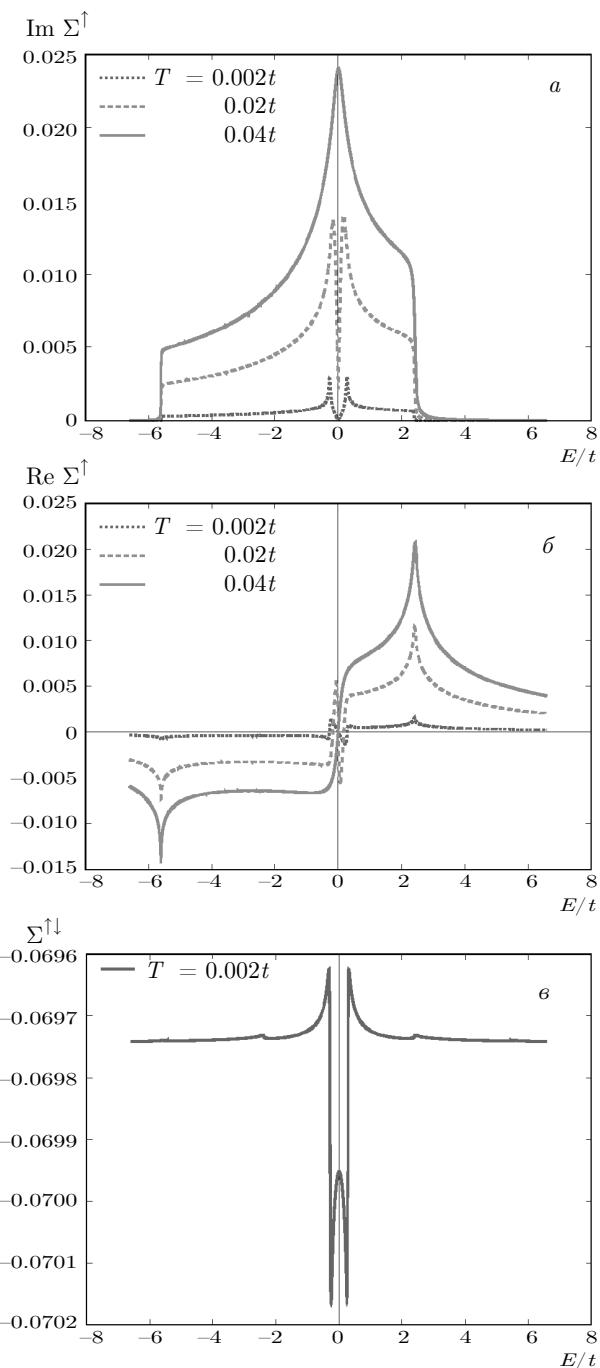


Рис. 8. Мнимая (a), действительная (b) и недиагональная (c) части собственной энергии одноэлектронной функции Грина, вычисленные для сверхпроводящего состояния с d -симметрией

что при выбранных параметрах учет этих флюктуаций не приводит к изменению рассматриваемых типов симметрий, но существенно, примерно в 4 раза в случае d -симметрии и примерно в 7 раз в случае s -симметрии, снижает температуры пере-

хода в сверхпроводящее состояние. В результате этого отношение энергетической щели к температуре сверхпроводящего перехода значительно превышает универсальное БКШ-значение, что действительно наблюдается в экспериментах на ВТСП-соединениях. Усредненная амплитуда ПП остается конечной при любых температурах и концентрациях носителей заряда. Поэтому переход в нормальное состояние происходит в результате потери фазовой когерентности ПП. Показано, что в рассматриваемом самосогласованном подходе провал в электронной плотности состояний на уровне Ферми отсутствует выше температуры фазового перехода, несмотря на отличное от нуля среднее значение амплитуды ПП. Таким образом, объяснение псевдощелевого состояния в некогерентной области фазовой диаграммы в рамках рассматриваемого подхода невозможно. Предложенный метод может быть использован для исследования влияния фазовых флуктуаций на сверхпроводящие фазы с различными (не только с *s*- и *d*-) типами симметрии, в том числе в триплетном состоянии и при наличии примесей.

Финансирование. Работа частично поддержана грантом Уральского отделения Российской академии наук № 18-2-2-12 и программой финансирования АААА-А16-116021010082-8.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Гриновские функции в ТСРА

Как было замечено выше, гамильтониан рассматриваемой модели в приближении ХФ $\hat{\mathcal{H}}_{HF}$ (4) описывает свойства системы без учета флуктуаций сверхпроводящего ПП. Учет флуктуаций требует введения флуктуирующего потенциала $\Delta\mathcal{U}$ (4) и приводит к проблеме недиагонального беспорядка в неупорядоченных системах. Эта проблема в данном случае может быть решена в рамках двухузельного приближения когерентного потенциала (ТСРА) [32–34]. Суть этого приближения в рассматриваемом случае заключается в том, что рассеивающая пара электронов с флуктуирующим потенциалом $\Delta\mathcal{U}$ (4) встраивается в эффективную среду, состоящую из электронных пар с эффективными параметрами, определяемыми собственно-энергетической частью $\hat{\Sigma}(i\omega_n)$:

$$\begin{aligned} \hat{\Sigma}(i\omega_n) &= \sum_{j,\delta} \hat{c}_{j\delta}^\dagger \Sigma_{j\delta}(i\omega_n) \hat{c}_{j\delta}, \\ \Sigma_{j\delta}(i\omega_n) &= \\ &= \begin{bmatrix} \Sigma_{j,j}^\uparrow(i\omega_n) & \Sigma_{j,j+\delta}^{\uparrow\downarrow}(i\omega_n) \\ \Sigma_{j+\delta,j}^{\downarrow\uparrow}(i\omega_n) & \Sigma_{j+\delta,j+\delta}^\downarrow(i\omega_n) \end{bmatrix}, \\ \Sigma_{j,j}^\uparrow(i\omega_n) &= \Sigma^\uparrow(i\omega_n)/4, \\ \Sigma_{j+\delta,j+\delta}^{\downarrow\uparrow}(i\omega_n) &= \Sigma^\downarrow(i\omega_n)/4, \\ \Sigma_{j,j+\delta}^{\uparrow\downarrow}(i\omega_n) &= \Sigma^{\uparrow\downarrow}(i\omega_n) \exp(i\alpha_\delta), \\ \Sigma_{j+\delta,j}^{\downarrow\uparrow}(i\omega_n) &= \Sigma^{\uparrow\downarrow}(i\omega_n) \exp(-i\alpha_\delta), \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

которая имеет такую же функциональную форму, как и $\hat{\mathcal{H}}_{HF}$ (4), и сохраняет полную симметрию рассматриваемой системы. Таким образом, температурная функция Грина $G_{j\delta}(i\omega_n, \lambda)$ (10) в этом приближении описывается уравнением Дайсона с флуктуирующими потенциалом $\Delta\mathcal{U}$ (4):

$$\begin{aligned} G_{j\delta}(i\omega_n, \lambda) &= F_{j\delta}(i\omega_n) + \\ &+ F_{j\delta}(i\omega_n) [\lambda \Delta\mathcal{U}_{j\delta} - \Sigma_{j\delta}(i\omega_n)] G_{j\delta}(i\omega_n, \lambda) = \\ &= F_{j\delta}(i\omega_n) + F_{j\delta}(i\omega_n) T_{j\delta}(i\omega_n) F_{j\delta}(i\omega_n), \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

где $F_{j\delta}(i\omega_n)$ — фурье-образ эффективной температурной гриновской функции, $T_{j\delta}(i\omega_n)$ — фурье-образ матрицы рассеяния электронной пары с флуктуирующим потенциалом (4). Тогда собственно-энергетическая часть $\Sigma_{j\delta}(i\omega_n)$ определяется самосогласованным образом из требования отсутствия рассеяния этой электронной парой в среднем, $\langle T_{j\delta}(i\omega_n, \lambda) \rangle = 0$ или $\langle G_{j\delta}(i\omega_n, \lambda) \rangle = F_{j\delta}(i\omega_n)$.

Явные выражения для матричных элементов гриновских функций в представлении матриц Намбу могут быть получены с помощью преобразования Фурье операторов рождения (уничтожения) $\hat{c}_{js}^\dagger(\hat{c}_{js})$

$$\hat{c}_{js}^\dagger(\hat{c}_{js}) = \frac{1}{N} \sum_k \exp[\mp ikR_j] \hat{c}_{ks}^\dagger(\hat{c}_{ks}), \quad (\text{A.3})$$

где N — число узлов в системе, R_j — векторы квадратной решетки, $\hat{c}_{ks}^\dagger(\hat{c}_{ks})$ — операторы рождения (уничтожения) электрона с импульсом k и спиновой проекцией s . В результате этого преобразования гамильтониан рассматриваемой системы в приближении ХФ $\hat{\mathcal{H}}_{HF}$ (4) записывается в представлении матриц Намбу

$$\hat{c}_k = \begin{bmatrix} \hat{c}_{k\uparrow} \\ \hat{c}_{-k\downarrow}^\dagger \end{bmatrix}, \quad \hat{c}_k^\dagger = \begin{bmatrix} \hat{c}_{k\uparrow}^\dagger & \hat{c}_{-k\downarrow} \end{bmatrix} \quad (\text{A.4})$$

следующим образом:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{H}}_{HF}(\bar{\Delta}, \alpha) &= \frac{1}{N} \sum_k \hat{c}_k^\dagger \mathcal{H}_{HF}(k) \hat{c}_k, \\
\mathcal{H}_{HF}(k) &= \begin{bmatrix} \mathcal{H}_{HF}^{\uparrow\uparrow}(k) & \mathcal{H}_{HF}^{\uparrow\downarrow}(k) \\ \mathcal{H}_{HF}^{\downarrow\uparrow}(k) & \mathcal{H}_{HF}^{\downarrow\downarrow}(k) \end{bmatrix}, \\
\mathcal{H}_{HF}^{\uparrow\uparrow}(k) &= \varepsilon_k - \mu, \quad \mathcal{H}_{HF}^{\downarrow\downarrow}(k) = -\varepsilon_k + \mu, \\
\mathcal{H}_{HF}^{\uparrow\downarrow}(k) &= -2V\bar{\Delta}V_k(\alpha), \\
\mathcal{H}_{HF}^{\downarrow\uparrow}(k) &= (\mathcal{H}_{HF}^{\uparrow\downarrow}(k))^*, \\
\varepsilon_k &= -2t(\cos k_x + \cos k_y) + 4t' \cos k_x \cos k_y, \\
V_k(\alpha) &= \cos \alpha (\cos k_x + \cos k_y) + \\
&\quad + i \sin \alpha (\cos k_x - \cos k_y),
\end{aligned} \tag{A.5}$$

где ε_k — закон дисперсии энергии электронов на квадратной решетке с перескоками на ближайшие и следующие за ними узлы, $V_k(\alpha)$ — закон дисперсии сверхпроводящего ПП с симметрией, задаваемой значением фазы α . Флуктуирующий потенциал (4) в этом представлении записывается в следующем виде:

$$\begin{aligned}
\Delta\hat{\mathcal{U}}(\Delta, \phi, \tau) &= \frac{1}{N} \sum_k \hat{c}_k^\dagger(\tau) \Delta\mathcal{U}(k) \hat{c}_k(\tau), \\
\Delta\mathcal{U}(k) &= \begin{bmatrix} 0 & \Delta\mathcal{U}^{\uparrow\downarrow}(k) \\ (\Delta\mathcal{U}^{\uparrow\downarrow}(k))^* & 0 \end{bmatrix}, \\
\Delta\mathcal{U}^{\uparrow\downarrow}(k) &= 2V [\bar{\Delta}V_k(\alpha) - \Delta(\phi)V_k(\phi)].
\end{aligned} \tag{A.6}$$

Эффективная среда описывается гамильтонианом

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{H}}_{eff}(E) &= \hat{\mathcal{H}}_{HF} + \hat{\Sigma}(E), \\
\hat{\Sigma}(E) &= \frac{1}{N} \sum_k \hat{c}_k^\dagger \Sigma_k(E) \hat{c}_k, \\
\Sigma_k(E) &= \begin{bmatrix} \Sigma^{\uparrow}(E) & \Sigma_k^{\uparrow\downarrow}(E) \\ \Sigma_k^{\downarrow\uparrow}(E) & \Sigma^{\downarrow}(E) \end{bmatrix}, \\
\Sigma_k^{\uparrow\downarrow}(E) &= 2\Sigma^{\uparrow\downarrow}(E)V_k(\alpha), \\
\Sigma_k^{\downarrow\uparrow}(E) &= 2\Sigma^{\uparrow\downarrow}(E)V_k^*(\alpha),
\end{aligned} \tag{A.7}$$

где $\Sigma_k(E)$ — собственно-энергетическая часть (A.1) в представлении матриц Намбу (A.4). Для учета ПП с рассматриваемыми типами симметрии необходимо, чтобы коэффициент $\Sigma^{\uparrow\downarrow}(E)$ в недиагональных матричных элементах собственно-энергетической части (A.7) был действительной функцией энергии, в то время как диагональные элементы $\Sigma^{\uparrow}(E)$ и $\Sigma^{\downarrow}(E)$ в общем случае являются комплексными функциями. Эффективная гриновская функция (A.2) в представлении матриц Намбу (A.4) выражается через гамильтониан эффективной среды $\hat{\mathcal{H}}_{eff}(E)$ (A.7):

$$\begin{aligned}
F_k(E) &= [E - \mathcal{H}_{eff}(k)]^{-1} = \\
&= \begin{bmatrix} F_k^{\uparrow}(E) & F_k^{\uparrow\downarrow}(E) \\ F_k^{\downarrow\uparrow}(E) & F_k^{\downarrow}(E) \end{bmatrix}, \\
F_k^{\uparrow(\downarrow)}(E) &= \frac{E \pm \varepsilon_k \mp \mu - \Sigma_k^{\uparrow(\downarrow)}(E)}{(E - E_k^+)(E - E_k^-)}, \\
F_k^{\uparrow\downarrow(\downarrow\uparrow)}(E) &= \frac{\Sigma_k^{\uparrow\downarrow(\downarrow\uparrow)}(E) + \mathcal{H}_{HF}^{\uparrow\downarrow(\downarrow\uparrow)}(k)}{(E - E_k^+)(E - E_k^-)}, \\
E_k^{\pm} &= \frac{\Sigma^{\uparrow}(E) + \Sigma^{\downarrow}(E)}{2} \pm \\
&\quad \pm \left[\left(\varepsilon_k - \mu + \frac{\Sigma^{\uparrow}(E) + \Sigma^{\downarrow}(E)}{2} \right)^2 + \right. \\
&\quad \left. + \Sigma^{\uparrow}(E)\Sigma^{\downarrow}(E) + \left| \Sigma_k^{\uparrow\downarrow}(E) + \mathcal{H}_{HF}^{\uparrow\downarrow}(k) \right|^2 \right]^{1/2}.
\end{aligned} \tag{A.8}$$

Явные выражения для матричных элементов эффективной функции Грина в представлении матриц Намбу получаются в результате преобразования Фурье (A.3):

$$\begin{aligned}
F_{j,j}^{\uparrow\uparrow}(E) &= \frac{1}{N} \sum_k F_k^{\uparrow}(E), \\
F_{j+\delta,j+\delta}^{\downarrow\downarrow}(E) &= \frac{1}{N} \sum_k F_k^{\downarrow}(E), \\
F_{j,j+\delta}^{\uparrow\downarrow}(E) &= \frac{1}{N} \sum_k \exp[ikR_\delta] F_k^{\uparrow\downarrow}(E) = \\
&= \frac{1}{N} \sum_k \cos(kR_\delta) F_k^{\uparrow\downarrow}(E), \\
F_{j+\delta,j}^{\downarrow\uparrow}(E) &= \frac{1}{N} \sum_k \exp[-ikR_\delta] F_k^{\downarrow\uparrow}(E) = \\
&= \frac{1}{N} \sum_k \cos(kR_\delta) F_k^{\downarrow\uparrow}(E).
\end{aligned} \tag{A.9}$$

При получении этих выражений использовалось свойство $F_{-k}(E) = F_k(E)$, которое следует из инверсионной симметрии законов дисперсии электронной энергии и сверхпроводящего ПП (A.5). Недиагональные матричные элементы эффективной гриновской функции (A.8) в представлении матриц Намбу (A.4) обладают свойством $F_{k_y,k_x}^{\uparrow\downarrow(\downarrow\uparrow)}(E) = F_{k_x,k_y}^{\uparrow\downarrow(\uparrow\downarrow)}(E)$, которое связано с симметрией сверхпроводящего ПП (A.5). Это приводит к тому, что для недиагональных матричных элементов эффективной гриновской функции в представлении матриц Намбу справедливо свойство $F_{j,j\pm\delta_y}^{\uparrow\downarrow}(E) = F_{j\pm\delta_x,j}^{\downarrow\uparrow}(E)$. Явные выражения для матричных элементов гриновской функции с флуктуирующими потенциалом $G_{j,\delta}(E)$ могут быть получены из уравнения Дайсона (A.2) следующим образом:

$$\begin{aligned}
G_{j,j}^{\uparrow\uparrow}(E) &= \\
&= \frac{F_{j,j}^{\uparrow\uparrow}(E) + \Sigma^{\downarrow}(E) \det [F_{j\delta}(E)]}{\det [1 - F_{j\delta}(E)(\Delta\hat{U}_{j\delta} - \Sigma_{j\delta}(E))]}, \\
G_{j+\delta,j+\delta}^{\downarrow\downarrow}(E) &= \\
&= \frac{F_{j+\delta,j+\delta}^{\downarrow\downarrow}(E) + \Sigma^{\uparrow}(E) \det [F_{j\delta}(E)]}{\det [1 - F_{j\delta}(E)(\Delta\hat{U}_{j\delta} - \Sigma_{j\delta}(E))]}, \\
G_{j,j+\delta}^{\uparrow\downarrow}(E) &= \\
&= \frac{F_{j,j+\delta}^{\uparrow\downarrow}(E) + \Delta\Sigma_{j,j+\delta}^{\uparrow\downarrow}(E) \det [F_{j\delta}(E)]}{\det [1 - F_{j\delta}(E)(\Delta\hat{U}_{j\delta} - \Sigma_{j\delta}(E))]}, \\
G_{j+\delta,j}^{\downarrow\uparrow}(E) &= \\
&= \frac{F_{j+\delta,j}^{\downarrow\uparrow}(E) + \Delta\Sigma_{j+\delta,j}^{\downarrow\uparrow}(E) \det [F_{j\delta}(E)]}{\det [1 - F_{j\delta}(E)(\Delta\hat{U}_{j\delta} - \Sigma_{j\delta}(E))]}, \tag{A.10}
\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
\Delta\Sigma_{j,j+\delta}^{\uparrow\downarrow}(E) &= \Delta\hat{U}_{j,j+\delta}^{\uparrow\downarrow} - \Sigma_{j,j+\delta}^{\uparrow\downarrow}(E), \\
\Delta\Sigma_{j+\delta,j}^{\downarrow\uparrow}(E) &= \Delta\hat{U}_{j+\delta,j}^{\downarrow\uparrow} - \Sigma_{j+\delta,j}^{\downarrow\uparrow}(E), \\
\det [F_{j\delta}(E)] &= F_{j,j}^{\uparrow\uparrow}(E)F_{j+\delta,j+\delta}^{\downarrow\downarrow}(E) - \\
&\quad - F_{j,j+\delta}^{\uparrow\downarrow}(E)F_{j+\delta,j}^{\downarrow\uparrow}(E); \tag{A.11}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\det [1 - F_{j\delta}(E)(\Delta\hat{U}_{j\delta} - \Sigma_{j\delta}(E))] &= \\
&= 1 + F_{j,j}^{\uparrow}(E)\Sigma_{j,j}^{\uparrow}(E) + \\
&+ F_{j+\delta,j+\delta}^{\downarrow}(E)\Sigma_{j+\delta,j+\delta}^{\downarrow}(E) - \\
&- F_{j,j+\delta}^{\uparrow\downarrow}(E)\Delta\Sigma_{j+\delta,j}^{\downarrow\uparrow}(E) - \\
&- F_{j+\delta,j}^{\downarrow\uparrow}(E)\Delta\Sigma_{j,j+\delta}^{\uparrow\downarrow}(E) + \tag{A.12} \\
&+ \det [F_{j\delta}(E)] \det [\Delta\hat{U}_{j\delta} - \Sigma_{j\delta}(E)], \\
\det [\Delta\hat{U}_{j\delta} - \Sigma_{j\delta}(E)] &= \\
&= \Sigma_{j,j}^{\uparrow}(E)\Sigma_{j+\delta,j+\delta}^{\downarrow}(E) - \\
&- \Delta\Sigma_{j,j+\delta}^{\uparrow\downarrow}(E)\Delta\Sigma_{j+\delta,j}^{\downarrow\uparrow}(E).
\end{aligned}$$

Легко убедиться, что $\Delta\hat{U}_{j,j\pm\delta_y}^{\uparrow\downarrow} = \Delta\hat{U}_{j\pm\delta_x,j}^{\downarrow\uparrow}$ и $\Sigma_{j,j\pm\delta_y}^{\uparrow\downarrow}(E) = \Sigma_{j\pm\delta_x,j}^{\downarrow\uparrow}(E)$. Как отмечалось выше, недиагональные матричные элементы эффективной гривской функции обладают таким же свойством. Поэтому из (A.10) видно, что недиагональные матричные элементы гривской функции с флуктуирующими потенциалом обладают этим же свойством, а детерминанты матриц (A.12) не зависят ни от индексов j , ни от их ближайших соседей δ .

ЛИТЕРАТУРА

1. T. Timusk and B. Statt, Rep. Progr. Phys. **62**, 61 (1999).
2. V. M. Loktev, R. M. Quick, and S. G. Sharapov, Phys. Rep. **349**, 1 (2001).
3. М. В. Садовский, УФН **171**, 539 (2001).
4. V. J. Emery and S. A. Kivelson, Nature **374**, 434 (1995).
5. P. Cury and H. Beck, Phys. Rev. Lett. **85**, 796 (2000).
6. D. Bormannt and H. Beck, J. Stat. Phys. **76**, 361 (1994).
7. P. Cury and H. Beck, Phys. Rev. Lett. **91**, 257002 (2003).
8. I. I. Mazin, D. J. Singh, M. D. Johannes, and M. H. Du, Phys. Rev. Lett. **101**, 057003 (2008).
9. F. Wang, H. Zhai, Y. Ran, A. Vishwanath, and D. H. Lee, Phys. Rev. Lett. **102**, 047005 (2009).
10. D. A. Wollman, D. J. Van Harlingen, W. C. Lee, D. M. Ginsberg, and A. J. Leggett, Phys. Rev. Lett. **71**, 2134 (1993).
11. C. C. Tsuei and J. R. Irtley, Rev. Mod. Phys. **72**, 969 (2000).
12. D. J. Scalapino, E. Loh, and J. E. Hirsch, Phys. Rev. B **34**, 8190(R) (1986).
13. J. R. Schrieffer, X. G. Wen, and S. C. Zhang, Phys. Rev. B **39**, 11663 (1989).
14. Ю. А. Изюмов, УФН **169**, 225 (1999).
15. D. J. Scalapino, Rev. Mod. Phys. **84**, 1383 (2012).
16. A. M. Hybertsen, E. Stechel, W. Foulkes, and M. Schlüter, Phys. Rev. B **45**, 10032 (1992).
17. N. D. Mermin and H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1136 (1966); P. C. Hohenberg, Phys. Rev. **158**, 383 (1967); S. Coleman, Commun. Math. Phys. **31**, 264 (1973).
18. G. Su, A. Schadschneider, and J. Zittartz, Phys. Lett. A **230**, 99 (1997).
19. G. Su and M. Suzuki, Phys. Rev. B **58**, 117 (1998).
20. V. L. Berezinskii, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **59**, 907 (1970); J. Kosterlitz and D. Thouless, J. Phys. C **6**, 1181 (1973).
21. V. J. Emery and S. A. Kivelson, Phys. Rev. Lett. **74**, 3253 (1995).
22. D. Ariosa, H. Beck, and M. Capezzali, J. Phys. Chem. Sol. **59**, 1783 (1998).
23. Yu. A. Izumov and Yu. N. Skryabin, *Statistical Mechanics of Magnetically Ordered Systems*, Springer-Verlag, New York (1988).
24. B. L. Gyorffy, J. B. Staunton, and G. M. Stocks, Phys. Rev. B **44**, 5190 (1990).

25. Y. Dubi, Y. Meir, and Y. Avishai, *Nature* **449**, 876 (2007).
26. M. Mayr, G. Alvarez, C. Sen, and E. Dagotto, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 217001 (2005).
27. В. П. Гусынин, В. М. Локтев, С. Г. Шарапов, *ЖЭТФ* **65**, 170 (1997).
28. D. Gerald and Mahan, *Many-Particle Physics*, Kluwer Acad. (2000).
29. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, Физматгиз, Москва (1962).
30. M. A. Timirgazin, V. F. Gilmutdinov, and A. K. Arzhnikov, *Physica C* **557**, 7 (2019).
31. K. K. Gomes, A. N. Pasupathy, A. Pushp, S. Ono, Y. Ando, and A. Yazdani, *Nature* **447**, 569 (2007).
32. E. Ni. Foo, H. Amar, and M. Ausloos, *Phys. Rev. B* **4**, 3350 (1971).
33. H. Shiba, *Progr. Theor. Phys. Rev. B* **46**, 77 (1971).
34. F. Brouers and J. Van Der Rest, *J. Phys. F: Met. Phys.* **26**, 1070 (1972).