

УТВЕРЖДАЮ:

Директор ИФ СО РАН

д. ф.-м. н. И. В. Волков

22 июня 2016 г.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук

Диссертация "Межузельные кулоновские взаимодействия в проблеме нормального и сверхпроводящего состояний сильно коррелированных систем" выполнена в лаборатории теоретической физики Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук (ИФ СО РАН).

В период подготовки диссертации соискатель Коровушкин Максим Михайлович работал в должности научного сотрудника лаборатории теоретической физики ИФ СО РАН.

В 2005 г. окончил физический факультет Красноярского государственного университета по специальности "физика".

В 2008 г. защитил кандидатскую диссертацию на тему "Влияние межузельных взаимодействий на электронные свойства сильно коррелированных систем" по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния в докторской советке Д 003.055.02 при ИФ СО РАН.

В 2012-2015 гг был прикреплен к очной докторантуре ИФ СО РАН по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Научный консультант: д. ф.-м. н., профессор Вальков Валерий Владимирович, заведующий лабораторией теоретической физики ИФ СО РАН.

Актуальность работы

На сегодняшний день интенсивные экспериментальные и теоретические исследования свойств высокотемпературных сверхпроводников, тяжелофермionных интерметаллидов, оксидов переходных металлов и мanganитов выявили ряд нетривиальных особенностей их электронной структуры. Одна из них обусловлена тем, что в ряде соединений имеет место низкая концентрация носителей тока, и в большинстве случаев рассматриваемые материалы относятся к классу слабо допированных мотт-хаббардовских систем. В таких системах сочетание малости энергии Ферми с узкозонностью энергетического спектра приводит к нарастанию эффектов, обусловленных межузельными кулоновскими корреляциями. Это происходит из-за того, что в отличие от обычных металлов с большой концентрацией носителей, радиус экранирования кулоновских корреляций в мотт-хаббардовских системах становится большим. В результате взаимодействие электронов на ближайших узлах кристаллической решетки становится важным источником сильных электронных корреляций и требует корректного описания.

Между тем магистральное направление развития теории слабо допированных мотт-хаббардовских систем в последние десятилетия связывалось в основном с изучением эффектов, обусловленных сильными одноузельными корреляциями. На фоне большого числа работ этого направления сравнительно мало было получено сведений о влиянии межузельного кулоновского взаимодействия электронов на энергетическую структуру и сверхпроводящие свойства мотт-хаббардовских систем. Разработка отмеченной проблемы составляет предмет диссертационных исследований автора.

Основные результаты

Основные результаты диссертационных исследований сводятся к следующему:

1. На основе диаграммной техники для операторов Хаббарда в рамках модели Шубина-Вонсовского в режиме сильных электронных корреляций показано, что межузельные зарядовые флюктуации приводят к появлению в энергетической структуре системы дополнительной зоны – зоны флюктуационных состояний. Интенсивное перераспределение спектрального веса между основной зоной и зоной флюктуационных состояний при допировании вызывает качественную модификацию структуры спектра фермievских возбуждений, плотности электронных состояний, ренормировке периода магнитных осцилляций в эффекте де Гааза-ван Альфена, а также к неоднородной по концентрации электронов модификации критической температуры перехода в сверхпроводящее состояние.

2. Методом операторной формы теории возмущений в рамках модели Эмери для купратных сверхпроводников при конечных значениях энергии хаббардовского отталкивания электронов на ионах меди и кислорода, а также при учете межузельных кулоновских взаимодействий вычислена зависимость параметра обменного взаимодействия между спиновыми моментами ионов меди от концентрации дырок. Для получения этой зависимости существенным оказался учет электронных однодырочных конфигураций с различным положением дырок на семи ионах кислорода, окружающих обменно связанные ионы меди. Найденная зависимость показывает, что увеличение допирования, в зависимости от выбора расчетных параметров модели, приводит к уменьшению величины обменного интеграла и разрушению антиферромагнитного порядка в медь-кислородной плоскости, что коррелирует с экспериментальными данными по двухмагнонному рамановскому рассеянию.
3. Показано, что ансамбль спин-поляронных квазичастиц, возникающий в двумерной решетке Кондо в режиме сильных электронных корреляций, обладает куперовской неустойчивостью с d_{x2-y2} -типовим симметрии сверхпроводящего параметра порядка. Интеграл обменного взаимодействия между локализованными спинами выступает в роли константы куперовского спаривания, обеспечивая высокие значения критической температуры. Трехцентровые взаимодействия, возникающие в спин-поляронном ансамбле, находящемся в спин-жидкостной фазе подсистемы локализованных спинов, в отличие от t - J^* -модели, способствуют куперовскому спариванию и обеспечивают реализацию сверхпроводящей фазы с высокими критическими температурами.
4. Продемонстрировано, что учет реального строения CuO_2 -плоскости высокотемпературных сверхпроводников, осуществляемый в рамках модели Эмери в режиме сильных электронных корреляций, обеспечивает устойчивость сверхпроводящей d_{x2-y2} -фазы спин-поляронного ансамбля по отношению к учету кулоновского отталкивания дырок на ближайших ионах кислорода. Это снимает давно стоявшую проблему о причине реализации в купратах сверхпроводящей d -фазы, несмотря на сильное кулоновское отталкивание дырок, находящихся на соседних ионах кислорода.
5. В модели Шубина-Вонсовского в приближении слабой связи при учете межузельного кулоновского взаимодействия электронов из первой и второй координационных сфер квадратной решетки в рамках механизма Кона-Латтинжера вычислена фазовая диаграмма сверхпроводящего состояния. Анализ этой диаграммы показал, что для эффективного взаимодействия в куперовском канале существенную роль играют не только внутриатомные, но и межатомные кулоновские взаимодействия. Продемонстрировано, что учет межузельных кулоновских взаимодействий и дальних электронных перескоков качественно модифицирует условия реализации сверхпроводящих фаз с различными типами симметрии пара-

метра порядка и может приводить к повышению сверхпроводящей критической температуры.

6. В рамках механизма Кона-Латтинжера исследовано влияние кулоновского взаимодействия в системе дираковских фермионов на формирование сверхпроводящего спаривания в идеализированном монослое и AB -бислойе допированного графена без учета влияния ван-дер-ваальсовского потенциала подложки и немагнитных примесей. Электронная структура графена исследована в рамках модели Шубина-Вонсовского при учете внутриатомного, межатомного, а также межслойного (в случае бислоя графена) кулоновских взаимодействий электронов. Анализ вычисленных фазовых диаграмм сверхпроводящего состояния показал, что учет поляризационных вкладов второго порядка теории возмущений по кулоновскому взаимодействию и учет межузельных кулоновских взаимодействий качественно влияют на результат конкуренции между сверхпроводящими фазами с f - и киральными $p+ip$ - и $d+id$ -симметриями параметра порядка, а также повышают критическую температуру до $T_c \sim 10-20$ К. Показано, что учет межслойных кулоновских взаимодействий электронов приводит к повышению критической температуры до величин $T_c \sim 20-40$ К в идеализированном бислойе допированного графена.

Достоверность результатов

Достоверность полученных результатов определяется корректностью использования математического аппарата, контролируемостью применяемых приближений, а также правильностью предельных переходов к известным результатам.

Личный вклад

Автор принимал активное участие в обсуждении и постановке задач, проводил все аналитические и численные расчеты, обсуждал полученные результаты, занимался подготовкой статей, обзоров и тезисов, докладывал и обсуждал результаты работы на научных конференциях.

Новизна и практическая значимость

Развитые в диссертации теоретические методы могут служить основой для дальнейшего развития теории сильно коррелированных электронных систем. В частности, методика учета межузельных кулоновских корреляций в модели Шубина-Вонсовского может быть использована и в других теоретических моделях, применяющихся для описания физических свойств широкого класса материалов: высокотемпературных сверхпроводников, тяжело-фермионных соединений, систем с переменной валентностью и др. Механизм индуцирования сверхпроводящей фазы за счет межузельных кулоновских

взаимодействий при учете поляризационных вкладов Кона-Латтинжера, выявленный в рамках модели Шубина-Вонсовского, будет особо актуален при исследовании условий реализации сверхпроводимости в ферропниктидах и кобальтитах. Практическая значимость работы заключается в демонстрации того, что учет реальной структуры CuO₂-плоскости высокотемпературных сверхпроводников, характеризующейся наличием двух ионов кислорода в элементарной ячейке, а также сильной спин-зарядовой связи между подсистемами дырок на ионах меди и кислорода, приводит к устойчивости сверхпроводящей фазы с $d_{x^2-y^2}$ -типом симметрии параметра порядка по отношению к учету кулоновского отталкивания дырок, находящихся на соседних ионах кислорода. Данный эффект дает ответ на давно стоявший вопрос о том, почему, несмотря на сильную константу связи сверхпроводящего s-спаривания, обусловленного кинематическим механизмом, в купратных сверхпроводниках реализуется $d_{x^2-y^2}$ -спаривание, со значительно меньшей интенсивностью взаимодействия, инициирующего куперовскую неустойчивость.

Публикация результатов диссертации

Результаты диссертационных исследований изложены в 22 статьях, опубликованных в реферируемых научных журналах, рекомендованных ВАК:

1. Вальков В.В., Коровушкин М.М., Влияние межузельного кулоновского взаимодействия на электронную структуру модели Эмери. // Изв. РАН. Серия физ. - 2007. - Т.71. - С.261.
2. Вальков В.В., Коровушкин М.М., Влияние сильных межузельных корреляций на смешивание зонных и локализованных состояний периодической модели Андерсона. // Письма в ЖЭТФ. - 2008. - Т.87. - С.234.
3. Вальков В.В., Коровушкин М.М., Эффективный гамильтониан для медных оксидов. // Изв. РАН. Серия физ. - 2008. - Т.72. - С.1149.
4. Вальков В.В., Коровушкин М.М., Барабанов А.Ф., Эффективные взаимодействия и природа куперовской неустойчивости спиновых поляронов на 2D решетке Кондо. // Письма в ЖЭТФ. - 2008. - Т.88. - С.426.
5. Val'kov V.V., Korovushkin M.M., Energy structure of high-temperature superconductors with the intersite Coulomb interaction. // Eur. Phys. J. B. - 2009. - V.69. - P.219.
6. Val'kov V.V., Korovushkin M.M., The intersite interactions in the problem of energy structure of the strongly correlated electron systems. // J. Phys.: Conf. Ser. - 2010. - V.200. - P.012094.

7. Вальков В.В., Коровушкин М.М., Расщепление нижней подзоны фермионов Хаббарда в модели Шубина-Вонсовского под влиянием сильных межузельных корреляций. // ЖЭТФ. - 2011. - Т.139. - С.126.
8. Val'kov V., Korovushkin M., Renormalization of energy structure and oscillation period in the de Haas - van Alphen effect at the strong intersite Coulomb interaction. // J. Phys. Soc. Jpn. - 2011. - V.80. - P.014703.
9. Вальков В.В., Шкляев А.А., Коровушкин М.М., Барабанов А.Ф., Влияние триплетных состояний на спектр коллективных спин-поляронных возбуждений в 2D-решетке Кондо. // ФТТ. - 2011. - Т.53. - С.1895.
10. Вальков В.В., Головня А.А., Коровушкин М.М., Формирование псевдоцели в медно-оксидных сверхпроводниках при учете спиновых и зарядовых флуктуаций. // ФТТ. - 2011. - Т.53. - С.1899.
11. Вальков В.В., Головня А.А., Коровушкин М.М., Кинематический механизм модуляции спектральной интенсивности в пространственно-однородной системе хаббардовских фермионов. // Письма в ЖЭТФ. - 2011. - Т.94. - С.215.
12. Вальков В.В., Коровушкин М.М., Расщепление нижней подзоны и сверхпроводимость 2D фермионов Хаббарда при сильных межузельных корреляциях. // Изв. РАН. Серия физ. - 2012. - Т.76. - С.158.
13. Каган М.Ю., Вальков В.В., Мицкан В.А., Коровушкин М.М., Влияние дальних взаимодействий на механизм куперовской неустойчивости Конна-Латтинжера в модели Шубина-Вонсовского. // Письма в ЖЭТФ. - 2013. - Т.97. - С.253.
14. Каган М.Ю., Вальков В.В., Мицкан В.А., Коровушкин М.М., Механизм Конна-Латтинжера и фазовая диаграмма сверхпроводящего состояния в модели Шубина-Вонсовского. // ЖЭТФ. - 2013. - Т.144. - С.837.
15. Kagan M.Yu., Val'kov V.V., Mitskan V.A., Korovushkin M.M., The Kohn - Luttinger superconductivity in idealized doped graphene. // Solid State Commun. - 2014. - V.188. - P.61.
16. Каган М.Ю., Вальков В.В., Мицкан В.А., Коровушкин М.М., Эффект Конна-Латтинжера и аномальное спаривание в новых сверхпроводящих системах и графене. // ЖЭТФ. - 2014. - Т.145. - С.1127.
17. Каган М.Ю., Мицкан В.А., Коровушкин М.М., Сверхпроводимость Конна-Латтинжера в монослоином и бислоином полуметалле с дираковским спектром. // ЖЭТФ. - 2014. - Т.146. - С.1301.
18. Kagan M.Yu., Mitskan V.A., Korovushkin M.M., Phase diagram of the Kohn-Luttinger superconducting state for bilayer graphene. // Eur. Phys. J. B. - 2015. - V.88. - P.157.

- 19.Каган М.Ю., Мицкан В.А., Коровушкин М.М., Аномальная сверхпроводимость и сверхтекучесть в фермионных системах с отталкиванием. // УФН. - 2015. - Т.185. - С.785.
- 20.Kagan M.Yu., Mitskan V.A., Korovushkin M.M., Effect of the long-range Coulomb interaction on phase diagram of the Kohn-Luttinger superconducting state in idealized graphene. // J. Low Temp. Phys. - 2015. - DOI 10.1007/s10909-015-1427-2.
- 21.Kagan M.Yu., Mitskan V.A., Korovushkin M.M., High- T_c and low- T_c superconductivity in electron systems with repulsion. // J. Supercond. Nov. Magn. - 2016. - V.29. - P.1043.
- 22.Вальков В.В., Дзебисашвили Д.М., Коровушкин М.М., Барабанов А.Ф., Устойчивость сверхпроводящей $d_{x^2-y^2}$ -фазы ВТСП относительно межузельного кулоновского отталкивания кислородных дырок. // Письма в ЖЭТФ. - 2016. - Т.103. - С.433.

Диссертация "Межузельные кулоновские взаимодействия в проблеме нормального и сверхпроводящего состояний сильно коррелированных систем" Коровушкина Максима Михайловича рекомендуется к защите на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Заключение принято на заседании теоретического отдела ИФ СО РАН 25 мая 2016 г.

Присутствовало на заседании 21 чел. Результаты голосования: «за» – 21 чел., «против» – нет, воздержавшихся – нет. Протокол №2 от 25 мая 2016 г.

Руководитель семинара

д.ф.-м.н., проф.

А.Ф. Садреев

Секретарь семинара

к.ф.-м.н., н.с.

С.В. Аксенов

Подписи Садреева А.Ф. и Аксенова С.В. удостоверяю:

Ученый секретарь ИФ СО РАН

22 июня 2016 года

С.И. Полков