

На правах рукописи

Коровушкин Максим Михайлович

**ВЛИЯНИЕ МЕЖУЗЕЛЬНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ
НА ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА СИЛЬНО
КОРРЕЛИРОВАННЫХ СИСТЕМ**

01.04.07 – физика конденсированного состояния

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Красноярск – 2008

Работа выполнена в Институте физики им. Л.В.Киренского СО РАН

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
профессор **Вальков В.В.**

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
член-корреспондент РАН
Максимов Л.А.
доктор физико-математических наук,
профессор **Зиненко В.И.**

Ведущая организация: Институт физики высоких давлений РАН,
Москва

Защита состоится 25 декабря 2008 г. в 14:30 часов на заседании диссертационного совета Д 003.055.02 при Институте физики им. Л.В. Киренского СО РАН по адресу: 660036 Красноярск, Академгородок, 50/38, Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Института физики им. Л.В. Киренского СО РАН.

Автореферат разослан “ ____ ” ноября 2008 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,
доктор физико-математических наук

Втюрин А.Н.



ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность

Несмотря на значительный промежуток времени, прошедший с момента открытия высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) [1], изучение их электронной структуры остается одним из магистральных направлений в физике конденсированного состояния вещества. Первый ВТСП $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$ без легирования является диэлектриком, хотя с точки зрения обычной зонной теории твердых тел это соединение должно было бы быть металлом, поскольку имеется по одному нескомпенсированному d -электрону на каждом ионе меди. Этот факт лег в основу утверждения о том, что новый класс сверхпроводящих материалов без легирования относится к классу моттовских диэлектриков. С теоретической точки зрения это означает, что учет корреляционных эффектов в ВТСП, связанных с наличием сильных одноузельных взаимодействий, становится принципиальным для правильного описания накопленных экспериментальных данных. Речь идет не только о поиске нового сценария куперовского спаривания в ВТСП, но и об интерпретации необычных свойств, наблюдаемых в нормальной фазе этих материалов при легировании. Комплекс возникающих при этом задач привел к выделению самостоятельного направления в физике конденсированного состояния, которое принято называть физикой сильно коррелированных систем.

Первые теоретические исследования выявили нетривиальность возникающих в данной области проблем, связанных с необходимостью рассмотрения задачи многих тел в условиях сильных взаимодействий. Отсутствие методов точного анализа подобных задач определило развитие теоретических концепций систем с сильными электронными корреляциями (СЭК) в направлении отыскания известного компромисса, когда модельный гамильтониан упрощается настолько, что привлечение современных методов исследования квантовой проблемы многих тел делает возможным получение конкретных

физических результатов. С другой стороны, формулируемая модель должна отражать наиболее существенные черты физики СЭК.

Классическим примером разрешения отмеченного компромисса является модель Хаббарда [2]. Не случайно в первых теоретических работах по проблеме ВТСП именно эта модель была привлечена для описания не фоновонного механизма формирования сверхпроводящей фазы [3]. В режиме СЭК эта модель сводится к t - J -модели, а точнее к t - J^* -модели. С этим обстоятельством связана высокая популярность отмеченных моделей в современных теоретических изысканиях. Необходимо отметить, что в t - J - и t - J^* -моделях сравнительно легко описываются магнитный и спин-флуктуационный механизмы куперовской неустойчивости, претендующие на основную роль в интегральном сценарии куперовского спаривания.

Однако следует отметить, что сравнение теоретических результатов, полученных в рамках рассмотренных моделей, с результатами экспериментальных исследований носит ограниченный характер по ряду причин. Одна из них заключается в особенности кристаллографического строения ВТСП. При реалистичном описании спектра фермиевских возбуждений рассматриваемых материалов необходимо учитывать наличие разнотипных ионов в реальной решетке, а также тот факт, что в одной элементарной ячейке CuO_2 -плоскости находится два иона кислорода. С целью учета этих факторов были предложены более реалистичные многозонные модели: p - d -модель Эмери [4,5], расширенная p - d -модель [6], и обобщенная p - d -модель [7,8], учитывающая дополнительные орбитали ионов меди, а также состояния апикального кислорода.

Многоорбитальность таких моделей затрудняла получение аналитических выражений для наиболее существенных характеристик ВТСП. Поэтому значительные усилия теоретиков были направлены на развитие различных сценариев (большой частью основанных на кластерной форме теории возмущений) построения эффективных низкоэнергетических гамильтонианов, сво-

дящихся при определенных допущениях к одноорбитальной модели Хаббарда и далее к t - J -модели. Использование отмеченной методики привело к получению ряда конкретных физических результатов. Вместе с тем, в рамках такого направления исследований имеются и проблемные вопросы, связанные как с использованием кластерной формы теории возмущений, так и с процедурой сведения многоорбитальных моделей к эффективному одноорбитальным. Одна из таких проблем связана с учетом межузельных корреляций (МК) в исходном гамильтониане. Впервые на это было обращено внимание в работе [9] при вычислении интеграла обменного взаимодействия между спиновыми моментами ионов меди в рамках модели Эмери. Было отмечено, что для правильного отражения МК между электронами на ионах меди и кислорода, необходимо учитывать комплекс, состоящий из двух ионов меди и семи ионов кислорода, окружающих ионы меди.

Подобные факторы приводят к постановке задач, связанных с рассмотрением на основе трехзонной p - d -модели свойств основного состояния, спектра элементарных возбуждений и его зависимости от допирования, получения эффективного гамильтониана без использования кластерной формы теории возмущений, а также рассмотрения условий формирования сверхпроводящей фазы и вскрытия механизма куперовской неустойчивости в ВТСП.

Цель работы

Исследование влияния межузельных взаимодействий кулоновского типа, а также эффективных межузельных взаимодействий на энергетическую структуру нормальной фазы и на механизм куперовской неустойчивости сильно коррелированной электронной системы, описываемой p - d -моделью Эмери.

Научная новизна и практическая значимость

Для модели Эмери в пределе сильных одноузельных корреляций на основе проекционного метода Мори введен расширенный ортогональный базис не-

приводимых операторов. В рамках такого подхода изучено влияние межузельных корреляций на энергетическую структуру модели Эмери и периодической модели Андерсона. Впервые показано, что учет межузельных корреляций индуцирует появление зон флуктуационных состояний, спектральная интенсивность которых зависит как от средних квадратичных флуктуаций чисел заполнения, так и от кумулянтов более высокого порядка. Впервые при учете МК в рамках модели Эмери вычислена зависимость обменного интеграла для спиновых моментов ионов меди от легирования. Для двумерной решетки Кондо в режиме сильной связи проанализирован механизм куперовской неустойчивости. Рассчитаны концентрационные зависимости критической температуры от легирования и показано, что спин-поляронная концепция куперовского спаривания на двумерной решетке Кондо может служить реальной альтернативой t - J^* -модели при интерпретации свойств сверхпроводящей фазы в купратных оксидах.

Достоверность результатов

Достоверность полученных результатов определяется корректностью использования математического аппарата, контролируемостью применяемых приближений и их апробированностью при исследованиях других авторов, а также правильностью предельных переходов к известным результатам.

Положения, выносимые на защиту

1. В рамках модели Эмери показано, что межузельные корреляции, описываемые на основе расширенного набора неприводимых функций Грина, приводят к возникновению зон флуктуационных состояний. Их спектральная интенсивность зависит от кумулянтов, отражающих флуктуации чисел заполнения. Показано, что зоны флуктуационных состояний способны оказывать существенное влияние на структуру спектра фермиевских возбуждений сильно коррелиро-

ванных систем.

2. При учете межузельных корреляций вычислена зависимость обменного интеграла между спиновыми моментами ионов меди от легирования в ВТСП. Для нахождения этой зависимости существенным оказался учет электронных конфигураций с различным числом дырок на семи ионах кислорода, окружающих ионы меди.
3. Исследовано влияние межузельных кулоновских корреляций на энергетическую структуру периодической модели Андерсона. Продемонстрировано, что, как и для модели Эмери, включение этих корреляций индуцирует появление зон флуктуационных состояний. Вычислена их спектральная интенсивность и показано, что при возрастании зарядовых флуктуаций вклад флуктуационных зон в интегральную плотность состояний становится существенным.
4. Для режима сильной связи построен эффективный гамильтониан 2D решетки Кондо. Показано, что возникающие между спиновыми поляронами эффективные взаимодействия приводят как к отталкиванию, так и к притяжению. При учете этих взаимодействий рассмотрены условия возникновения куперовской неустойчивости в ансамбле спиновых поляронов. Показано, что трехцентровые взаимодействия, в отличие от t - J^* -модели, способствуют куперовской неустойчивости, обеспечивая высокие значения критической температуры перехода в сверхпроводящую фазу с d -типом симметрии параметра порядка.

Апробация работы

Основные результаты диссертации обсуждались на международных конференциях: XXXI Международная зимняя школа физиков-теоретиков «Коуровка-2006» (Россия, Кыштым, 2006), International Conference on Magnetism «ICM-

2006» (Япония, Киото, 2006), 9-ый и 10-й Международные симпозиумы «Порядок, беспорядок и свойства оксидов» ODPO-9 и ODPO-10 (Россия, п. Лоо, 2006-07), 34-е совещание по физике низких температур «НТ-34» (Россия, п. Лоо, 2006), XXXII Международная зимняя школа физиков-теоретиков «Коуровка-2008» (Россия, Новоуральск, 2008), 2-я и 3-я Международные конференции «Фундаментальные проблемы высокотемпературной сверхпроводимости» ФПС-06 и ФПС-08 (Россия, Звенигород, 2006, 2008). Результаты диссертационных исследований докладывались на семинаре отделения общей физики Физического института им. П.Н. Лебедева РАН (Москва, 2006), на Заседании секции «Магнетизм» Научного совета РАН по физике конденсированных сред в Институте физических проблем РАН (Москва, 2007), на Сибирском семинаре по высокотемпературной сверхпроводимости ОКНО (Омск, 2008), на конференциях молодых ученых КНЦ СО РАН (Красноярск, 2007-08), на научных семинарах и ученых советах Института физики им. Л.В. Киренского СО РАН.

Публикации

Основные результаты диссертации изложены в 13 печатных работах, из них 4 статьи в центральных рецензируемых журналах, 5 работ в трудах международных конференций и 4 тезиса докладов на международных конференциях.

Структура и объем работы

Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы, изложена на 175 страницах, включает 20 рисунков. Список цитируемой литературы содержит 161 наименование.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы Президиума РАН «Квантовая макрофизика», Программы Отделения физических наук РАН, Российского Фонда фундаментальных исследований (проект #06-02-16100), Интеграционного проекта СО РАН (No.3.4), Лаврентьевского конкурса СО РАН, а также Красноярского краевого фонда науки (проекты 17G и

18G).

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обосновывается актуальность темы, формулируется цель исследования, описывается структура диссертации, перечисляются основные положения, выносимые на защиту, приводятся сведения об апробации материалов диссертации.

Первая глава диссертации посвящена описанию физических свойств наиболее интенсивно изучаемых ВТСП, а также обзору теоретических моделей, используемых для описания электронной структуры купратов: модель Хаббарда, модель Эмери, t - J -модель, многозонная p - d -модель. Наибольшее внимание уделяется описанию методов и результатов исследований свойств оксидов меди в рамках трехзонной p - d -модели. Рассматриваются доводы «за» и «против» редукции трехзонной модели к эффективной однозонной. Указываются основные обстоятельства, приведшие исследователей к использованию многозонной p - d -модели. Описывается метод двухвременных температурных функций Грина, техника операторов Хаббарда, и операторная форма теории возмущений.

Во **второй главе** на основе неприводимых по Мори операторов предлагается методика описания межзельных взаимодействий фермионов в модели Эмери. Гамильтониан модели в режиме СЭК в атомном представлении записывается в виде

$$\begin{aligned}
\hat{H} = & \sum_{f\sigma} \left(\varepsilon_d^0 + 4V_{pd} (2 - h_p) \right) Z_f^{\sigma\sigma} + \\
& + \sum_{f\delta} \left(\left(\frac{\varepsilon_p^0}{2} - V_{pd} (1 - h_d) \right) \sum_{\sigma} X_{f+\delta}^{\sigma\sigma} + \left(\varepsilon_p^0 + \frac{U_p}{2} \right) X_{f+\delta}^{22} \right) + \\
& + \sum_{f\delta\sigma} t_{pd}(\delta) \eta(\sigma) \left(Z_f^{\sigma 0} X_{f+\delta}^{\bar{\sigma} 2} + X_{f+\delta}^{2\bar{\sigma}} Z_f^{0\sigma} \right) + \frac{1}{2} \sum_{f\delta\Delta\sigma} t_{pp}(\Delta) X_{f+\delta}^{2\bar{\sigma}} X_{f+\delta+\Delta}^{\bar{\sigma} 2} + \\
& + \frac{1}{2} \sum_{f\delta l\sigma} t_{pp} X_{f+\delta}^{2\bar{\sigma}} X_l^{\bar{\sigma} 2} + V_{pd} \sum_{f\delta} \left(Z_f^{00} - h_d \right) \left(\hat{h}_{f+\delta} - h_p \right).
\end{aligned} \tag{1}$$

Здесь Z_f^{mn} и $X_{f+\delta}^{mn}$ – операторы Хаббарда, описывающие переходы между одноионными состояниями m и n для ионов меди и кислорода, соответственно; первое и второе слагаемые учитывают ренормированные за счет междузельных взаимодействий одноузельные энергии электронов на ионах меди и кислорода, а также кулоновское отталкивание двух электронов, находящихся на одном ионе кислорода и обладающих противоположными проекциями спина (h_d (h_p) – число дырок на ионах меди (кислорода)); третье слагаемое описывает перескоки электронов с ионов меди на ионы кислорода; четвертое и пятое слагаемые соответствуют перескокам с ионов кислорода на ближайшие и следующие за ближайшими ионы кислорода; пятое слагаемое отражает кулоновское отталкивание дырок на соседних ионах меди и кислорода ($\hat{h}_{f+\delta}$ – оператор числа дырок на ионах кислорода).

Развиваемый в данной главе метод корректного учета МК является естественным обобщением идеи Хаббарда [2], предложенной им для учета сильных одноузельных взаимодействий. Для расчета энергетической структуры применяется расширенный ортогональный базис неприводимых операторов

$$\left\{ Z_f^{0\sigma}, X_{f+\delta^+}^{\bar{\sigma} 2}, \hat{\Phi}_f^{\sigma}, \hat{\Psi}_{f+\delta^+}^{\sigma} \right\},$$

где

$$\hat{\Phi}_f^\sigma = \sum_{\delta} Z_f^{0\sigma} (\hat{h}_{f+\delta} - h_p), \quad \hat{\Psi}_{f+\delta^+}^\sigma = X_{f+\delta^+}^{\sigma 2} (Z_f^{00} + Z_{f+2\delta^+}^{00} - 2h_d), \quad \delta^+ \in \left\{ \left(\frac{a}{2}, 0 \right), \left(0, \frac{a}{2} \right) \right\}.$$

Для введенных операторов записываются точные уравнения движения, которые затем по методу Мори проецируются на введенный ортогональный базис операторов. В результате такой процедуры получается замкнутая система шести уравнений для функций Грина, определяющая динамику фермиевских возбуждений рассматриваемой системы:

$$\begin{aligned} (\omega - \tilde{\varepsilon}_d) \langle\langle Z_{k\sigma} | Z_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle &= N_d - iN_d \left(S_x \langle\langle X_{k\sigma} | Z_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle - S_y \langle\langle Y_{k\sigma} | Z_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle \right) - \\ &\quad - \frac{i}{4} \left(S_x \langle\langle \Psi_{k\sigma}^x | Z_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle - S_y \langle\langle \Psi_{k\sigma}^y | Z_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle \right) - V_{pd} \langle\langle \Phi_{k\sigma} | Z_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle, \\ (\omega - \tilde{\varepsilon}_p) \langle\langle X_{k\sigma} | Z_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle &= i \frac{n_p}{2} S_x \langle\langle Z_{k\sigma} | Z_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle - \frac{i}{8} S_x \langle\langle \Phi_{k\sigma} | Z_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle + \\ &\quad + \frac{n_p}{2} V_{xy} \langle\langle Y_{k\sigma} | Z_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle - V_{pd} \langle\langle \Psi_{k\sigma}^x | Z_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle, \\ (\omega - \tilde{\varepsilon}_p) \langle\langle Y_{k\sigma} | Z_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle &= -i \frac{n_p}{2} S_y \langle\langle Z_{k\sigma} | Z_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle + \frac{i}{8} S_y \langle\langle \Phi_{k\sigma} | Z_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle + \\ &\quad + \frac{n_p}{2} V_{xy} \langle\langle X_{k\sigma} | Z_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle - V_{pd} \langle\langle \Psi_{k\sigma}^y | Z_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle, \\ (\omega - \tilde{\varepsilon}_d + V_{pd} (1 - 2h_p)) \langle\langle \Phi_{k\sigma} | Z_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle &= i (N_d h_p - h_d) \left(S_x \langle\langle X_{k\sigma} | Z_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle - S_y \langle\langle Y_{k\sigma} | Z_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle \right) + \\ &\quad + i \left(\frac{h_p}{4} - \frac{1}{2} \right) \left(S_x \langle\langle \Psi_{k\sigma}^x | Z_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle - S_y \langle\langle \Psi_{k\sigma}^y | Z_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle \right) - 4V_{pd} h_p (1 - h_p) \langle\langle Z_{k\sigma} | Z_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle, \\ (\omega - \tilde{\varepsilon}_p + V_{pd} (1 - 2h_d)) \langle\langle \Psi_{k\sigma}^x | Z_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle &= -i \left(\frac{n_p}{2} h_d - \frac{h_p}{2} \right) S_x \langle\langle Z_{k\sigma} | Z_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle - \\ &\quad - 2V_{pd} h_d (1 - h_d) \langle\langle X_{k\sigma} | Z_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle + i \left(\frac{h_d}{4} + \frac{1}{8} \right) S_x \langle\langle \Phi_{k\sigma} | Z_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle + \frac{n_p}{2} V_{xy} \langle\langle \Psi_{k\sigma}^y | Z_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle, \\ (\omega - \tilde{\varepsilon}_p + V_{pd} (1 - 2h_d)) \langle\langle \Psi_{k\sigma}^y | Z_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle &= i \left(\frac{n_p}{2} h_d - \frac{h_p}{2} \right) S_y \langle\langle Z_{k\sigma} | Z_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle - \\ &\quad - 2V_{pd} h_d (1 - h_d) \langle\langle Y_{k\sigma} | Z_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle - i \left(\frac{h_d}{4} + \frac{1}{8} \right) S_y \langle\langle \Phi_{k\sigma} | Z_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle + \frac{n_p}{2} V_{xy} \langle\langle \Psi_{k\sigma}^x | Z_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle. \end{aligned}$$

Здесь введены обозначения

$$\tilde{\varepsilon}_d = \varepsilon_d^0 + 4V_{pd} (2 - h_p), \quad \tilde{\varepsilon}_p = \varepsilon_p^0 + U_p + 2V_{pd} (1 - h_d), \quad N_d = 1 - \frac{n_d}{2},$$

$$S_x = 2t_{pd} \sin\left(\frac{k_x a}{2}\right), \quad S_y = 2t_{pd} \sin\left(\frac{k_y a}{2}\right), \quad V_{xy} = 4t_{pp} \sin\left(\frac{k_x a}{2}\right) \sin\left(\frac{k_y a}{2}\right).$$

Решение полученной системы уравнений показывает, что корректный учет МК, по сравнению с учетом МК в приближении Хаббард-I, приводит к

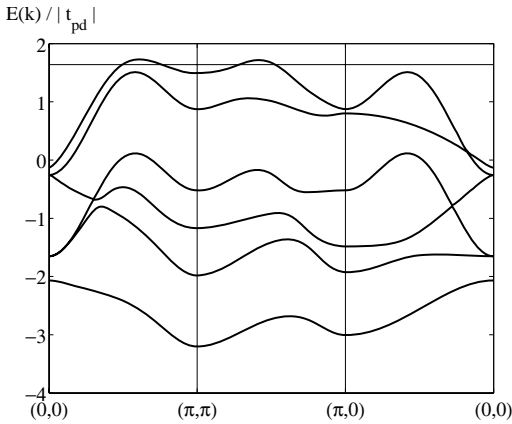


Рис.1. Зонная картина модели Эмери, рассчитанная в режиме СЭК при учете зон флуктуационных состояний для уровня легирования $P=0.27$. Сплошной горизонтальной линией показано положение химического потенциала.

зарядовыми флуктуациями (если межузельные взаимодействия являются кулоновскими), что позволяет говорить о новых уровнях как о флуктуационных уровнях энергии.

Процессы перескоков приводят к размытию флуктуационных уровней в энергетические зоны – зоны флуктуационных состояний (ЗФС) (рис.1). Спектральная интенсивность ЗФС зависит как от концентрации носителей в затравочной зоне проводимости, так и от интенсивности гибридационных процессов. В результате, при увеличении уровня легирования происходит

появлению в структуре энергетического спектра модели Эмери дополнительного набора уровней энергий. Их формирование обусловлено изменением энергии электрона, находящегося на узле, если в окрестности этого узла имеет место отклонение электронных конфигураций от номинальных. Таким образом, физическая причина возникновения новых уровней связана с

перераспределение спектрального веса между обычными зонами и ЗФС. Это индуцирует возникновение дополнительного пика плотности электронных состояний в окрестности уровня, соответствующего d -состояниям меди, а также заметное нарастание плотности состояний вблизи затравочных уровней p_x - и p_y -состояний кислорода (рис.2). Демонстрируется, что перераспределение плотности состояний может способствовать увеличению провала в плотности состояний на уровне Ферми.

В третьей главе диссертации с помощью метода двухвременных температурных функций Грина исследуется основное состояние и энергетическая структура модели Эмери

при конечных значениях параметра кулоновского отталкивания для электронов, находящихся на ионах меди, U_d . Результаты исследований показывают, что простейшее приближение Хаббард-I является недостаточным для корректного учета ковалентных эффектов и описания основного состояния оксидов меди по сценарию диэлектрика Мотта-Хаббарда. В частности, демонстрируется, что из-за эффектов ковалентности без допирования при конечных

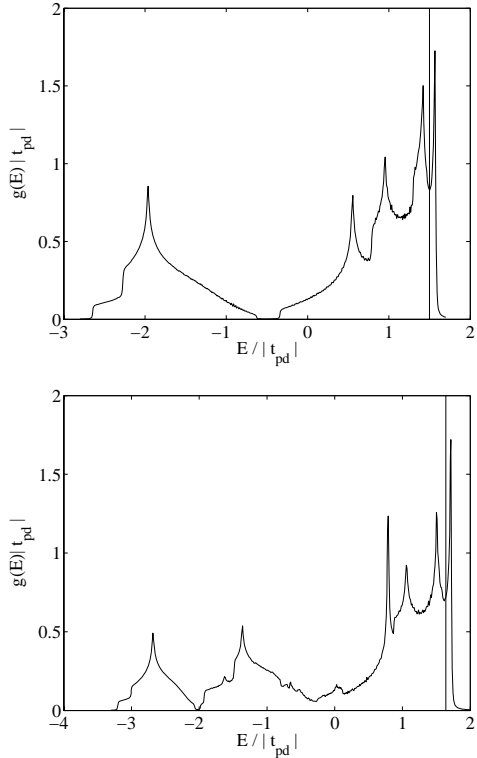


Рис.2. Плотность электронных состояний модели Эмери в режиме СЭК при учете МК в приближении Хаббард-I (сверху) и при учете зон флуктуационных состояний (снизу) при уровне легирования $P=0.27$. Сплошными вертикальными линиями показаны положения химического потенциала.

значениях параметра U_d хипотенциал находится ниже потолка верхней зоны, соответствующей электронным состояниям ионов кислорода.

Для воспроизведения диэлектрической фазы модели без легирования развивается теория, выходящая за рамки приближения, основанного на линейаризованной по параметру медь-кислородного перескока схеме, адекватно учитывающая процессы ковалентного смешивания состояний меди и кислорода. При использовании параметра малости, формируемого как отношение константы медь-кислородной гибридизации к энергетической разности затравочных энергий орбиталей меди и кислорода, с помощью операторной формы теории возмущений осуществляется переход к эффективному гамильтониану \hat{H}_{eff} , в котором процессы ковалентного смешивания отражаются посредством операторного ряда по степеням отмеченного параметра. Результирующая структура \hat{H}_{eff} такова, что процессы первого порядка по отмеченному параметру формально отсутствуют. В этом случае диэлектрическая фаза в нелегированном режиме получается естественным образом.

Для эффективного гамильтониана, полученного с точностью до членов четвертого порядка по параметру медь-кислородной гибридизации, показано, что при вычислении константы эффективного обменного взаимодействия МК приводят к снятию вырождения для многоэлектронных конфигураций. Принципиальным является тот факт, что для корректного учета МК рассматриваются не однокластерные конфигурации, а конфигурации, включающие кислородные окружения двух ближайших обменно связанных ионов меди. Только такой подход позволяет правильно учесть энергетические разности энергий виртуальных переходов, которые зависят, в частности, от концентрации дырок. Введение проекционных операторов для различных электронных конфигураций кислородных ионов, окружающих обменно связанные ионы меди, позволяет в явном виде получить слагаемые \hat{H}_{eff} и записать парциальные вклады в обменный интеграл. После статистического усреднения

по допустимым электронным конфигурациям вычисляется зависимость от легирования эффективного обменного интеграла.

В **четвертой главе** диссертации развитый во второй главе метод применяется для анализа влияния сильных МК на смешивание зонных и локализованных состояний в периодической модели Андерсона [10] с включенным кулоновским взаимодействием между двумя группами электронов. Гамильтониан модели имеет вид

$$\hat{H} = \sum_{f\sigma} (E_0 + 4U_{fd}n_d) X_f^{\sigma\sigma} + \sum_{l\sigma} (\varepsilon_d^0 + 4U_{fd}(1-h)) d_{l\sigma}^\dagger d_{l\sigma} + t \sum_{l'\sigma} d_{l'\sigma}^\dagger d_{l\sigma} + \sum_{fl\sigma} V_{fl} (X_f^{\sigma 0} d_{l\sigma} + d_{l\sigma}^\dagger X_f^{0\sigma}) - U_{fd} \sum_{\langle fl \rangle} (X_f^{00} - h)(\hat{n}_l - n_d). \quad (2)$$

Здесь операторы Хаббарда X_f^{mn} строятся на базисе трех одноузельных состояний $\{|m\rangle\}$: $|0\rangle$ - состояние без электронов, и $|\sigma\rangle$ - два состояния, различающиеся проекцией спинового момента $\sigma = \pm 1/2$. В пределе $U \rightarrow \infty$ состояния с двумя электронами на одном узле $|2\rangle$ запрещены. Первое слагаемое гамильтониана описывает систему f -электронов, локализованных на узлах; второе и третье слагаемые описывают систему коллективизированных d -электронов; четвертое слагаемое отражает гибридизацию локализованных и коллективизированных состояний, пятое слагаемое описывает кулоновское взаимодействие коллективизированных электронов и дырок в локализованных состояниях, h - число дырок в локализованных состояниях, n_d - среднее число зонных электронов в расчете на один узел. Для расчета энергетической структуры применяется расширенный ортогональный базис неприводимых операторов

$$\{X_f^{0\sigma}, d_{l\sigma}, \hat{\Phi}_f^\sigma, \hat{\Psi}_l^\sigma\},$$

где

$$\hat{\Phi}_f^\sigma = \sum_\delta X_f^{0\sigma} (\hat{n}_{f+\delta} - n_d), \quad \hat{\Psi}_l^\sigma = \sum_\delta d_{l\sigma} (X_{l+\delta}^{00} - h).$$

После составления уравнений движений для данных операторов и проецирования этих уравнений на выбранный базис записывается замкнутая система четырех уравнений для функций Грина. Полученная система показывает, что

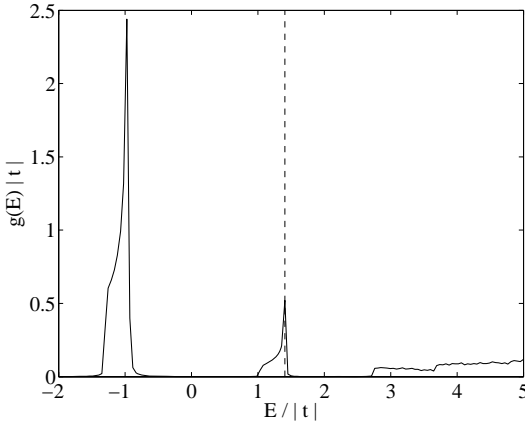


Рис.3. Плотность электронных состояний ($n_f=0.98$, $n_d=0.05$, $\mu=1.4$). Пунктирной линией показано положение химического потенциала.

корректный учет МК в модели Андерсона, как и в модели Эмери, приводит к возникновению дополнительных уровней энергии, обусловленных зарядовыми флуктуациями. В частности, имеет место возникновение двухуровневой картины локализованных состояний с перераспределенной спектральной интенсивностью. Это приводит к формированию двух пиков плотности электронных состояний в окрестности нижнего и верхнего квазилокализованных уровней (рис.3). Следует подчеркнуть, что пик плотности состояний в окрестности химического потенциала получен без привлечения идеологии слэив-бозонного представления.

Пятая глава посвящена исследованию сверхпроводящей фазы в условиях, когда куперовская неустойчивость развивается не для затравочных фермионов, а в подсистеме спиновых поляронов [11,12]. Рассматривается гамильтониан решетки Кондо

$$\hat{H} = J \sum_f (\bar{S}_f \bar{S}_f) + U \sum_f \hat{n}_{f\uparrow} \hat{n}_{f\downarrow} + \sum_{f m \alpha} t_{f m} c_{f\alpha}^\dagger c_{m\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{f m} I_{f m} (\bar{S}_f \bar{S}_m), \quad (3)$$

в котором первое слагаемое описывает s - d -обменное взаимодействие АФМ типа ($J > 0$) между локализованными спиновыми моментами ионов меди и спиновыми моментами дырок, второе слагаемое соответствует Хаббардовскому отталкиванию двух дырок на одном узле, третье и четвертое слагаемые учитывают кинетическую энергию дырок, а также гейзенберговское АФМ обменное взаимодействие в подсистеме локализованных спинов.

Вывод эффективных взаимодействий, возникающих между спин-поляронными квазичастицами, основан на использовании условия, что s - d -обменный интеграл J и энергия Хаббарда U являются наибольшими энергетическими параметрами рассматриваемой системы. В этих условиях осуществляется переход к эффективному гамильтониану,

$$\hat{H}_{eff} = \sum_f (\varepsilon_{sp} - \mu) X_f^{SS} + \frac{1}{2} \sum_{fm\sigma} t_{fm} X_f^{S\sigma} X_m^{\sigma S} + \frac{1}{2} \sum_{fm} I_{fm} (\tilde{S}_f \tilde{S}_m) + \frac{1}{2} \sum_{fm} V_{fm} X_f^{SS} X_m^{SS} + \hat{H}_{(3)}, \quad (4)$$

в котором вклады от высших по энергии одноузельных состояний учтены в рамках операторной формы теории возмущений и отражены посредством появления новых взаимодействий. Для получения уравнений самосогласования в сверхпроводящей фазе используется метод неприводимых функций Грина [13]. В рамках данного метода находится уравнение, решения которого определяют температуру перехода в сверхпроводящую фазу с $d_{x^2-y^2}$ -типом симметрии параметра порядка,

$$1 = \frac{\tilde{G}}{N} \sum_{\bar{q}} \frac{3}{8} \frac{(\cos q_x - \cos q_y)^2}{(\varepsilon_{\bar{q}} - \mu)} \text{th} \left(\frac{\varepsilon_{\bar{q}} - \mu}{2T_c} \right), \quad (5)$$

с константой связи

$$\tilde{G} = I - \frac{2(2-n)t^2}{3J} + \frac{(4-n)t^2}{3(U+3J/4)} - \frac{(5-4n)I^2}{24J}. \quad (6)$$

Эффективная константа связи \tilde{G} формируется в результате действия нескольких факторов. Первое слагаемое соответствует притяжению спиновых поляронов и обеспечивает положительный вклад в суммарный механизм куперовского спаривания. Второе, третье и четвертое слагаемые (6) обязаны

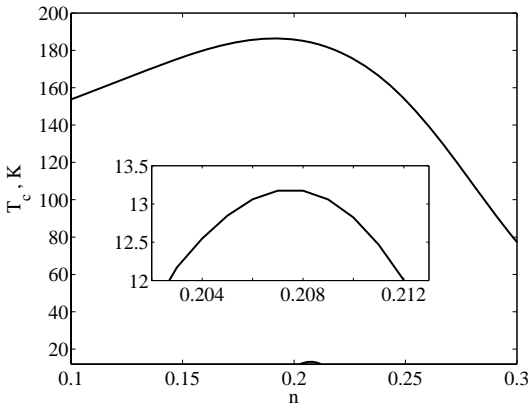


Рис.4. Концентрационная зависимость критической температуры, рассчитанная при учете $\hat{H}_{(3)}$ (верхняя кривая) и без их учета (нижняя кривая) для набора параметров $t' = 0.6|t|$, $t'' = 0.22|t|$, $J = 5|t|$, $U = 5|t|$, $I = 0.33|t|$. На вставке в мелком масштабе представлена нижняя кривая.

своим происхождением своему происхождением к учету двух- и трехцентровых взаимодействий $\hat{H}_{(3)}$ между спиновыми поляронами. Второе и четвертое слагаемые происходят от процессов виртуальных переходов в триплетные спин-поляронные состояния как за счет перескоков дырок, так и за счет обменного взаимодействия. Эти вклады формируют отталкивание спиновых поляронов. Третье слагаемое происходит от процессов «заброса» в одноузловые состояния с двумя дырками, которые приводят к взаимному притяжению поляронов. Таким образом, $\hat{H}_{(3)}$ частично компенсируют уменьшение константы связи, вызванное отталкиванием спиновых поляронов, и, тем самым, существенно влияют на условия реализации сверхпроводящей фазы.

При расчете концентрационной зависимости T_c параметры выбираются таким образом, чтобы без учета $\hat{H}_{(3)}$ существовала область реализации сверх-

своим происхождением к учету двух- и трехцентровых взаимодействий $\hat{H}_{(3)}$ между спиновыми поляронами. Второе и четвертое слагаемые происходят от процессов виртуальных переходов в триплетные спин-поляронные состояния как за счет перескоков дырок, так и за счет обменного взаимодействия. Эти вклады формируют отталкивание спиновых поляронов. Третье слагаемое происходит от процессов «за-

проводящей фазы. Из рис.4 видно, что при учете $\hat{H}_{(3)}$ критические температуры в данной области параметров достигают достаточно высоких значений T_c в области оптимального допирования (~ 180 K). Если же $\hat{H}_{(3)}$ не принимаются во внимание, то максимальное значение T_c достигает лишь 13 K. В случае, когда параметры выбираются так, чтобы в области оптимального допирования реализовывались T_c , характерные для купратных сверхпроводников, то без учета $\hat{H}_{(3)}$ сверхпроводящая фаза оказывается подавленной. Также показано, что возрастание U приводит к понижению T_c в соответствии с тем, что при таком изменении U эффективность виртуальных «забросов» в состоянии с двумя дырками подавляется, и суммарная константа связи уменьшается.

В конце главы анализируется структура спин-поляронных квазичастиц, по отношению к которым реализуется рассмотренный механизм куперовской неустойчивости, приводящий к ВТСП.

В заключении сформулированы основные результаты, полученные в диссертационной работе.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. На основе расширенного ортогонального по Мори базиса неприводимых операторов в рамках модели Эмери развита методика, позволяющая корректно описывать межузельные корреляции. Качественно новый результат предложенной теории заключается в предсказании зон флуктуационных состояний, спектральная интенсивность которых растет с увеличением средних квадратичных флуктуаций чисел заполнения. Возрастание этих флуктуаций при легировании ВТСП лежит в основе перераспределения интегральной плотности фермиевских состояний и может индуцировать модуляцию спектральной интенсивности на контуре Ферми.

2. Методом операторной формы теории возмущений для модели Эмери при конечных значениях энергии хаббардовского отталкивания электронов на ионах меди и кислорода вычислена зависимость обменного интеграла между спиновыми моментами ионов меди от концентрации дырок. При получении этой зависимости существенными оказались два фактора. Первый из них связан с необходимостью учета не только нульдырочных конфигураций ионов кислорода, являющихся ближайшими к ионам меди, но и конфигураций, содержащих одну, а также две дырки. Второй фактор обусловлен тем, что интенсивность вкладов отмеченных одно- и двухдырочных конфигураций ионов кислорода в обменный интеграл существенно зависит от межузельных корреляций и правильно воспроизводится только при учете семи ионов кислорода, окружающих обменно связанные ионы меди.

3. В рамках периодической модели Андерсона показано, что включение межузельных корреляций, как и в модели Эмери, приводит к возникновению дополнительных уровней энергии, обусловленных зарядовыми флуктуациями. В частности, имеет место возникновение дополнительного квазилокализованного уровня, существенно влияющего на структуру плотности электронных состояний рассматриваемой модели.

4. Показано, что в режиме сильной связи для 2D решетки Кондо эффективный гамильтониан описывает ансамбль спиновых поляронов, взаимодействие между которыми формируется в результате виртуальных забросов в однодырочные триплетные и двухдырочные синглетные состояния. Переходы в триплетные состояния индуцируют отталкивание между спиновыми поляронами, тогда как косвенная связь через двоечные состояния приводит к притяжению поляронов. Отмеченные виртуальные процессы приводят также и к трехцентровым взаимодействиям, описывающим коррелированную динамику спиновых поляронов. Показано, что в отличие от t - J^* -модели, трехцентровые взаимодействия способствуют куперовскому спариванию, обеспечивая реализацию сверхпроводящей фазы d -типа симметрии параметра по-

рядка с высокой критической температурой. Полученная концентрационная зависимость критической температуры показывает, что рассмотренная модель взаимодействующего ансамбля спиновых поляронов является реальной альтернативой t - J^* -модели для интерпретации свойств ВТСП.

Список публикаций по теме диссертации

1. Вальков В.В., Коровушкин М.М. Влияние межузельного кулоновского взаимодействия на электронную структуру модели Эмери. // Известия РАН. Серия физическая. – 2007. – Т.71. – В.2. – С.261-263.
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. – В.4. – С.234-239.
3. Вальков В.В., Коровушкин М.М. Эффективный гамильтониан для медных оксидов. // Известия РАН. Серия физическая. – 2008. – Т.72. – В.8. – С.1149-1151.
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. – В.6. – С.426-430.
5. Вальков В.В., Коровушкин М.М. Ренормировка энергетической структуры оксидов меди сильными межузельными взаимодействиями. // Труды 9-го Международного симпозиума «Порядок, беспорядок и свойства оксидов» (ОДРО-9). – Ростов-на-Дону, п. Лоо. – 19-23 сентября 2006. – Ч.1. – С.59-63.
6. Вальков В.В., Коровушкин М.М. Влияние межузельного кулоновского взаимодействия на электронную структуру модели Эмери. // Труды 34 совещания по физике низких температур (НТ-34). – Ростов-на-Дону, п. Лоо. – 26-30 сентября 2006. – Т.2. – С.223-224.
7. Вальков В.В., Коровушкин М.М. О роли межузельного взаимодействия в формировании мотт-хатбардовского диэлектрического состояния модели Эмери. // Сборник трудов второй Международной конференции «Фундаментальные проблемы высокотемпературной сверхпроводимости» (ФПС'06). – Москва, ФИАН. – 9-13 октября 2006. – С.54-55.

8. Вальков В.В., Коровушкин М.М. Эффективный гамильтониан для медных оксидов. // Труды 10-го Международного симпозиума «Порядок, беспорядок и свойства оксидов» (ODPO-10). – Ростов-на-Дону, п. Лоо. – 12-17 сентября 2007. – Ч.2. – С.60-62.
9. Вальков В.В., Коровушкин М.М., Барабанов А.Ф. Обменный механизм куперовского спаривания спиновых поляронов в решетке Кондо купратных сверхпроводников. // Сборник трудов третьей Международной конференции «Фундаментальные проблемы высокотемпературной сверхпроводимости» (ФПС'08). – Москва, ФИАН. – 13-17 октября 2008. – С.54.
10. Вальков В.В., Коровушкин М.М. Влияние негемиполярности ионов меди на эффективный гамильтониан и энергетическую структуру модели Эмери. // Тезисы докладов XXXI международной зимней школы физиков-теоретиков «Коуровка-2006», «Дальняя дача», Кыштым, Челябинская обл. 19-25 февраля 2006 г., стр. 23.
11. Val'kov V.V., Korovushkin M.M. The influence of copper ion non-homeopolarity on energy structure of the Emery model. // International Conference on Magnetism (ICM-2006). Books of Abstracts, Kyoto, Japan. August 20-25, 2006, p.255.
12. Вальков В.В., Коровушкин М.М. Основное состояние и энергетическая структура сильно коррелированных систем при учете межузельного кулоновского взаимодействия. // Тезисы докладов XXXII международной зимней школы физиков-теоретиков «Коуровка-2008», «Зеленый мыс», Новоуральск, Свердловская обл. 25 февраля – 2 марта 2008 г., стр. 21.
13. Вальков В.В., Коровушкин М.М. О влиянии межузельных взаимодействий на энергетическую структуру модели Андерсона в режиме сильных корреляций. // Тезисы докладов XXXII международной зимней школы физиков-теоретиков «Коуровка-2008», «Зеленый мыс», Новоуральск, Свердловская обл. 25 февраля – 2 марта 2008 г., стр. 32.

СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Bednorz J.G., Müller K.A., Possible high- T_c superconductivity in the Ba-La Cu-O system. // Z. Phys. B. – 1986. – Vol.64. – P.189.
2. Hubbard J.C., Electron correlations in narrow energy bands. // Proc. Roy. Soc. London A. - 1963. - Vol.276. - P.238.
3. Зайцев Р.О., Иванов В.А., О возможности парной конденсации в модели Хаббарда. // ФТТ. – 1987. – Т.29. – С.2554.
4. Emery V.J., Theory of high- T_c superconductivity in oxides. // Phys. Rev. Lett. – 1987. - Vol.58. - P.2794.
5. Varma C.M., Schmitt-Rink S., Abrahams E., Charge transfer excitations and superconductivity in “Ionic” metals. // Solid State Commun. - 1987. - Vol.62. P.681.
6. Gaididei Yu.B. and Loktev V.M., On a theory of the electronic spectrum and magnetic properties of high- T_c superconductors. // Phys. Status Solidi B. - 1988. Vol.147. - P.307.
7. Di Castro C., Feiner L.F., and Grilli M., Symmetry of hole states in superconducting oxides: correlation with T_c . // Phys. Rev. Lett. - 1991. - Vol.66.- P.3209.
8. Гавричков В.А., Овчинников С.Г., Низкоэнергетический спектр электронов в оксидах меди в многозонной p - d -модели. // ФТТ. - 1998. - Т.40. - С.184.
9. Matsukawa H., Fukuyama H., Effective Hamiltonian for high- T_c Cu oxides. // J. Phys. Soc. Jpn. - 1989. - Vol.58. - P.2845.
10. Anderson P.W., Localized magnetic states in metals. // Phys. Rev. –1961. – Vol.124. - P.41.
11. Барабанов А.Ф., Максимов Л.А., Уймин Г.В., Элементарные дырочные возбуждения в плоскостях CuO_2 . // ЖЭТФ. – 1989. – Т.96. – С.655.
12. Барабанов А.Ф., Максимов Л.А., Михеенков А.В., О сверхпроводимости в подходе спинового полярона. // Письма в ЖЭТФ. – 2001. - Т.74. – С.362.
13. Plakida N.M., Yushankhay V.Yu., and Stasyuk I.V., On d -wave pairing in one band Hubbard model. // Physica C. – 1989. – Vol.162-164. – P.787.

Подписано в печать 19.11.08

Формат 60×84/16. Усл. печ. л. 1. Тираж 70 экз. Заказ № .

Отпечатано в типографии Института физики СО РАН
660036, Красноярск, Академгородок, ИФ СО РАН