

Иерархия низкоэнергетических моделей электронного строения купратных ВТСП: роль дальних спин-коррелированных перескоков

В.В. Вальков¹, В.А. Мицкан^{1,2}, Д.М. Дзедзисашвили^{1,2}, А.Ф. Барабанов³

¹Институт физики им. Л.В. Киренского, ФИЦ КНЦ СО РАН, г. Красноярск, 660036, Россия
E-mail: vvv@iph.krasn.ru

²Сибирский государственный университет науки и технологий им. М.Ф. Решетнева
г. Красноярск, 660037, Россия

³Институт физики высоких давлений РАН, г. Троицк, 142190, Россия

Статья поступила в редакцию 7 июня 2017 г., опубликована онлайн 26 декабря 2017 г.

Показано, что для трехзонной $p-d$ -модели Эмери, отражающей реальную структуру CuO_2 -плоскости высокотемпературных сверхпроводников, в режиме сильных электронных корреляций можно реализовать последовательность редукций к эффективным моделям, воспроизводящим низкоэнергетические особенности спектра элементарных возбуждений и вскрывающим спин-поляронную природу фермиевских квазичастиц. Первая редукция приводит к спин-фермионной модели, в которой подсистема обменно-связанных спиновых моментов, локализованных на ионах меди, сильно взаимодействует с кислородными дырками. Вторая редукция связана с переходом от спин-фермионной модели к $\phi-d$ -обменной модели. Важная особенность такого перехода определяется большой энергией $\phi-d$ -обменной связи, приводящей к формированию спиновых поляронов. Использование этого факта позволяет провести третью редукцию, в результате которой возникает $\tilde{t} - \tilde{J}^* - I$ -модель. Ее отличительная особенность связана с существенно большей важностью спин-коррелированных перескоков по сравнению с ролью таких процессов в обычной $t - J^*$ -модели, выводимой из модели Хаббарда. На основе сравнительного анализа спектра фермиевских возбуждений, рассчитанного для полученных эффективных моделей CuO_2 -плоскости высокотемпературных сверхпроводников, установлена важная роль обычно отбрасываемых дальних спин-коррелированных перескоков.

Показано, що для трьохзонної $p-d$ -моделі Емері, що відображає реальну структуру CuO_2 -площини високотемпературних надпровідників, у режимі сильних електронних кореляцій можна реалізувати послідовність редукцій до ефективних моделей, відтворюючих низькоенергетичні особливості спектра елементарних збуджень та розкриваючих спин-поляронну природу фермієвських квазічастинок. Перша редукція призводить до спин-ферміонної моделі, в якій підсистема обмінно-пов'язаних спинових моментів, які локалізовані на іонах міді, сильно взаємодіє з кисневими дірками. Друга редукція пов'язана з переходом від спин-ферміонної моделі до $\phi-d$ -обмінної моделі. Важлива особливість такого переходу визначається великою енергією $\phi-d$ -обмінного зв'язку, що призводить до формування спинових поляронів. Використання цього факту дозволяє провести третю редукцію, в результаті якої виникає $\tilde{t} - \tilde{J}^* - I$ -модель. Її відмінна особливість пов'язана з істотно більшою важливістю спин-корельованих перескоків в порівнянні з роллю таких процесів у звичайній $t - J^*$ -моделі, що виводиться з моделі Хаббарда. На основі порівняльного аналізу спектру фермієвських збуджень, які розраховано для отриманих ефективних моделей CuO_2 -площини високотемпературних надпровідників, встановлено важливу роль зазвичай відкинутих далеких спин-корельованих перескоків.

PACS: 74.20.-z Теории и модели сверхпроводящего состояния;
74.72.-h Купратные сверхпроводники.

Ключевые слова: высокотемпературные сверхпроводники, спиновый полярон, низкоэнергетическая модель электронного строения купратов.

1. Введение

Известно, что трехзонная $p-d$ -модель [1–4] включает взаимодействия, позволяющие описывать главные особенности электронного строения CuO_2 -плоскости высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП). Однако возникающая при этом громоздкость теоретического описания, обусловленная наличием трех ионов в элементарной ячейке и сильными электронными корреляциями (СЭК), инициировала появление исследований, направленных на сведение трехзонной $p-d$ -модели к более простым эффективным моделям.

В работе [5] для учета сильной гибридизации между d -состояниями ионов меди и p -состояниями четырех ближайших ионов кислорода была введена симметричная кислородная орбиталь. Дырка, находящаяся на такой орбитали, образует сильно связанное состояние с локализованным спиновым моментом иона меди (синглет Жанга–Райса). Учитывая большую энергию отмеченной связи, описание динамики носителей тока в CuO_2 -плоскости осуществлялось с привлечением только синглетных состояний. Предполагалось, что такой подход обосновывает возможность проведения анализа электронных свойств купратов в рамках однозонной $t-J$ -модели [6,7].

Концепция о формировании синглетных состояний [5] развивалась также в работах [8–12]. В них, аналогично [5], осуществлялся переход от p_x - и p_y -орбиталей ионов кислорода к функциям Ванье (ϕ - и ψ -орбиталам), относящимся к элементарным ячейкам, в центре которых находятся ионы меди. Важное свойство этих орбиталей определялось тем, что только орбиталь ϕ гибридизовалась с d -состояниями ионов меди, формируя синглет Жанга–Райса, а вторая орбиталь ψ оказывалась неактивной. В результате происходило значительное упрощение задачи о нахождении энергетического спектра и собственных состояний для отдельной элементарной ячейки при учете СЭК [12,13].

Введение одноячеечных состояний позволяло перейти к атомному представлению для гамильтониана трехзонной $p-d$ -модели. Такой подход, названный авторами [12] как обобщенный метод сильной связи (generalized tight-binding (GTB) approach), приводил к сложной и непрозрачной структуре гамильтониана, поскольку некоторые типы кулоновского (V_{pd} , V_{pp} , U_p), а также гибридизационного (t_{pd}) взаимодействий становились существенно нелокальными. Поэтому при конкретных вычислениях ограничивались учетом только небольшого числа одноячеечных состояний, отвечающих самым нижним уровням энергии, и межячеечными взаимодействиями для ближайших соседей. Последнее обстоятельство являлось существенным недостатком метода в том случае, когда малость отбрасываемых взаимодействий компенсирует-

ся нарастанием их числа за счет увеличения количества ионов в дальних координационных сферах [14].

В рамках метода GTB был выполнен анализ различных взаимодействий, возникающих в эффективном гамильтониане трехзонной $p-d$ -модели [15]. Были проведены исследования, направленные на обоснование правомерности использования $t-J-V$ -модели для описания электронных свойств купратов [16], а также осуществлено обобщение метода на случай многозонной $p-d$ -модели, учитывающей состояния вершинного кислорода [4,17,18].

Альтернативный способ построения эффективного гамильтониана $p-d$ -модели был предложен в работах [14,19,20] и использовался при изучении свойств ВТСП купратов как в нормальной [21–25], так и в сверхпроводящей [26,27] фазах. Этот способ основан на малости параметра гибридизационного смешивания между p -состояниями ионов кислорода и d -состояниями ионов меди t_{pd} по сравнению с разностью энергий отмеченных состояний ($\Delta_{pd} = \epsilon_p - \epsilon_d$) и параметром кулоновского отталкивания двух дырок на ионе меди U_d . Отмеченные условия позволяли во втором порядке теории возмущений по параметрам t_{pd}/Δ_{pd} и $t_{pd}/(U_d - \Delta_{pd})$ получить эффективный гамильтониан трехзонной $p-d$ -модели в виде $SU(2)$ -инвариантной спин-фермионной модели, в которой состояния ионов меди описывались в подпространстве гомеополярных состояний.

Следует отметить, что в цитированных выше работах [14,19–27] по исследованию свойств спин-фермионной модели не использовались ϕ - и ψ -орбитали. Переход к симметризованным орбиталам для спин-фермионной модели был реализован в работе [28]. Было показано, что в этом случае возникает $\phi-d$ -обменная модель, содержащая спин-коррелированные перескоки между узлами, относящимися к далеким ячейкам. Однако при вычислении спектральных свойств купратов на основе этой расширенной $\phi-d$ -обменной модели в работах [28,29] спин-коррелированные перескоки учитывались только между ближайшими соседями.

В настоящей работе, стартуя с трехзонной $p-d$ -модели, последовательно строятся отмеченные выше три эффективные модели электронного строения купратных сверхпроводников и сравниваются их спектральные свойства. Во втором разделе формулируется гамильтониан трехзонной $p-d$ -модели в представлении вторичного квантования. В разделе 3 этот гамильтониан с целью корректного описания СЭК с помощью операторов Хаббарда формулируется в атомном представлении. В четвертом разделе, используя операторную форму теории возмущений, выводится гамильтониан спин-фермионной модели до второго порядка по параметрам малости t_{pd}/Δ_{pd} и $t_{pd}/(U_d - \Delta_{pd})$. В разделе 5 осуществляется переход к функциям Ванье и формулируется $\phi-d$ -обменная модель. В шестом разделе проводится строгая редукция к низкоэнергетической $\tilde{t}-\tilde{J}^*-I$ -модели. Обсуж-

дается важное отличие этой модели от обычной $t-J^*$ -модели, получаемой из однозонной модели Хаббарда. Седьмой раздел посвящен расчету фермиевского спектра спин-поляронных возбуждений в рамках каждой из представленных в работе эффективных моделей. На основе сравнительного анализа полученных дисперсионных кривых делается вывод о важной роли дальних спин-коррелированных перескоков. Основные выводы работы формулируются в заключительном восьмом разделе.

2. Гамильтониан модели Эмери

Как известно, главные особенности электронного строения CuO_2 -плоскости высокотемпературных сверхпроводников хорошо отражаются моделью Эмери [1–3], описывающей систему дырок на ионах меди и кислорода. Гамильтониан этой модели можно представить в виде

$$\hat{H} = \varepsilon_d \sum_f \hat{n}_f^d + \varepsilon_p \sum_l \hat{n}_l^p + U_d \sum_f \hat{n}_{f\uparrow}^d \hat{n}_{f\downarrow}^d + U_p \sum_l \hat{n}_{l\uparrow}^p \hat{n}_{l\downarrow}^p + \hat{V}_{pd} + \hat{T}_{pd} + \hat{T}_{pp} + \hat{V}_{pp}, \quad (1)$$

где

$$\begin{aligned} \hat{V}_{pd} &= V_{pd} \sum_{f\delta} \hat{n}_f^d \hat{n}_{f+\delta}^p, \\ \hat{T}_{pd} &= \sum_{f\delta\sigma} t_{pd} \left[\vartheta(\delta) d_{f\sigma}^+ p_{f+\delta,\sigma} + \text{h.c.} \right], \\ \hat{T}_{pp} &= \sum_{l\Delta\sigma} t_{pp}(\Delta) p_{l\sigma}^+ p_{l+\Delta,\sigma}, \\ \hat{V}_{pp} &= \sum_{ll'} V_{pp}(l-l') \hat{n}_l^p \hat{n}_{l'}^p. \end{aligned} \quad (2)$$

Первое и второе слагаемые гамильтониана (1) описывают энергию связи дырки на ионе меди и кислорода. Позиции ионов меди и кислорода обозначены индексами f и l соответственно. При суммировании по l учитывается, что на одну элементарную ячейку CuO_2 -плоскости приходится два иона кислорода. Операторы числа частиц на ионах меди и кислорода определяются выражениями

$$\hat{n}_f^d = \sum_{\sigma} \hat{n}_{f\sigma}^d = \sum_{\sigma} d_{f\sigma}^+ d_{f\sigma}, \quad \hat{n}_l^p = \sum_{\sigma} \hat{n}_{l\sigma}^p = \sum_{\sigma} p_{l\sigma}^+ p_{l\sigma},$$

где $d_{f\sigma}^+$ ($d_{f\sigma}$) — оператор рождения (уничтожения) дырки на ионе меди в позиции f со спином $\sigma = \pm 1/2$, а $p_{l\sigma}^+$ ($p_{l\sigma}$) — оператор рождения (уничтожения) дырки на ионе кислорода в узле l со спином σ . ε_d — затравочная энергия дырки на ионе меди, а ε_p — на ионе кислорода.

Третье (четвертое) слагаемое гамильтониана \hat{H} учитывает энергию хаббардовского отталкивания двух дырок с противоположными проекциями спинов, находящихся на одном ионе меди (кислорода). Параметр отталкивания обозначен посредством U_d (U_p).

Оператор \hat{V}_{pd} в выражении (1) описывает кулоновое взаимодействие дырок, находящихся на соседних ионах меди и кислорода. Величина этого взаимодействия определяется параметром V_{pd} . Вектор δ , соединяющий ион меди с ближайшими ионами кислорода, принимает четыре значения: $\delta = (\pm a/2, 0), (0, \pm a/2)$.

Слагаемое, отвечающее процессам гибридизации в гамильтониане p - d -модели, обозначено посредством \hat{T}_{pd} . Параметр t_{pd} определяет интенсивность процесса перехода дырки с иона меди на любой из ближайших ионов кислорода и обратно. Функция $\vartheta(\delta)$ учитывает влияние соотношений между фазами медных и кислородных орбиталей на процессы гибридизации. Для показанных на рис. 1 профилей орбиталей функция $\vartheta(\delta)$ принимает следующие значения: $\vartheta(\delta) = 1$ при $\delta = (-a/2, 0), (0, -a/2)$, и $\vartheta(\delta) = -1$ при $\delta = (a/2, 0), (0, a/2)$.

Оператор \hat{T}_{pp} в гамильтониане (1) описывает перескоки дырок по кислородным орбиталям. Интеграл перескока дырки между ближайшими кислородными орбиталями обозначен через $t_{pp}(\Delta) = t_{pp}\rho(\Delta)$. Знак интеграла определяется функцией $\rho(\Delta)$, где вектор Δ соединяет ближайшие ионы кислорода. При выбранной последовательности фаз кислородных орбиталей $\rho(\Delta) = 1$ при $\Delta = (a/2, a/2), (-a/2, -a/2)$, и $\rho(\Delta) = -1$ при $\Delta = (a/2, -a/2), (-a/2, a/2)$.

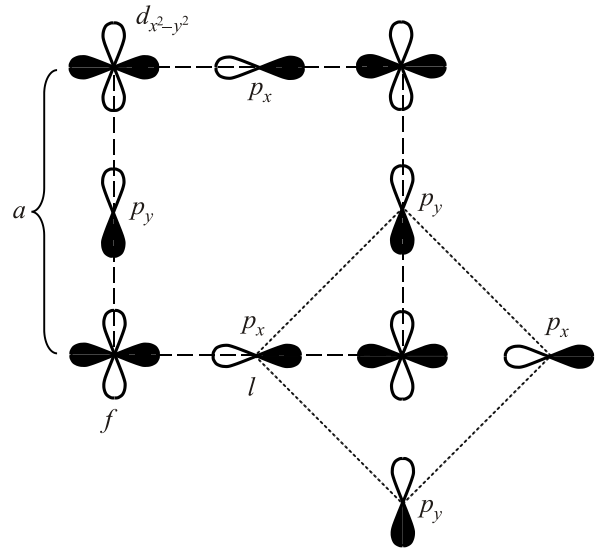


Рис. 1. Орбитали медных ($d_{x^2-y^2}$) и кислородных (p_x, p_y) дырок CuO_2 -плоскости, учитываемых в модели Эмери. Штриховая линия ограничивает элементарную ячейку с параметром a . Пунктирная линия соединяет четыре кислородные орбитали, являющиеся ближайшими к медной орбитали, находящейся в правом нижнем углу элементарной ячейки.

Последнее слагаемое в (1) представлено оператором \hat{V}_{pp} , который определяет кулоновское взаимодействие между дырками, находящимися на кислородных узлах l и l' . Интенсивность этого взаимодействия характеризуется функцией $V_{pp}(l-l')$.

3. Модель Эмери в режиме сильных корреляций. Атомное представление

Если на одну элементарную ячейку CuO_2 -плоскости приходится одна дырка, то в соответствии с экспериментальными данными состояние системы является мотт-Хаббардовским диэлектриком. В модели Эмери такой тип основного состояния реализуется в режиме сильных электронных корреляций, когда

$$(U_d - \Delta_{pd}), \Delta_{pd} \gg t_{pd} > 0. \quad (3)$$

Большая величина щели s с переносом заряда $\Delta_{pd} = \varepsilon_p - \varepsilon_d$ и разности $U_d - \Delta_{pd}$ требует их корректного учета. Это достигается в два этапа. На первом шаге с помощью операторов Хаббарда вводится атомное представление, позволяющее эффекты сильных электронных корреляций включить в гамильтониан нулевого приближения. На втором этапе в рамках операторной формы теории возмущений строится эффективный гамильтониан $\hat{\mathcal{H}}_{\text{eff}}$, для которого гильбертово пространство не содержит высокоэнергетических «двоечных» (с двумя дырками) и «нулевых» (без дырок) состояний на ионе меди. При этом процессы заброса в такие состояния учитываются по теории возмущений и отражаются в $\hat{\mathcal{H}}_{\text{eff}}$ посредством появления дополнительных взаимодействий.

Операторы Хаббарда Z_f^{mn} , относящиеся к подсистеме ионов меди, определяются обычным образом: $Z_f^{mn} = |f; m\rangle \langle f; n|$, где $|f; m\rangle$ — состояния иона меди на узле f . Таких состояний четыре: $|f; 0\rangle$ — состояние иона меди без дырки; $|f; \sigma\rangle = d_{f\sigma}^+ |f; 0\rangle$ — однодырочное состояние с проекцией спина σ ; $|f; 2\rangle = d_{f\uparrow}^+ d_{f\downarrow}^+ |f; 0\rangle$ — состояние с двумя дырками на узле f . Гильбертово подпространство для всей медной подсистемы определяется как прямое произведение подпространств для каждого иона меди.

Переход к атомному представлению для операторов, относящихся к медной подсистеме, осуществляется на основе связи фермиевских операторов с операторами Хаббарда:

$$d_{f\sigma} = Z_f^{0\sigma} + 2\sigma Z_f^{\bar{\sigma}2}, \quad (\sigma = \pm 1/2, \bar{\sigma} \equiv -\sigma). \quad (4)$$

Поскольку главная цель работы состоит в исследовании роли дальних спин-коррелированных перескоков при формировании спин-поляронного спектра, то для простоты отбросим в гамильтониане (1) те взаимодействия, которые не имеют прямого отношения к данной задаче, т.е. положим: $t_{pp} = 0$, $U_p = 0$, $V_{pp} = 0$

и $V_{pd} = 0$. Тогда гамильтониан модели Эмери в атомном представлении примет вид

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_{\text{int}}, \quad (5)$$

где

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \varepsilon_d \sum_{f\sigma} Z_f^{\sigma\sigma} + (2\varepsilon_d + U_d) \sum_f Z_f^{22} + \varepsilon_p \sum_f (\hat{n}_{f+\frac{x}{2}}^p + \hat{n}_{f+\frac{y}{2}}^p), \quad (6)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{int}} = \hat{T}_{pd} = \sum_{f\delta\sigma} t_{pd} \left[\vartheta(\delta) (Z_f^{\sigma 0} + 2\sigma Z_f^{2\bar{\sigma}}) p_{f+\delta, \sigma} + \text{h.c.} \right]. \quad (7)$$

4. Редукция к спин-фермионной модели

Как уже отмечалось, в нелегированном случае, когда на одну элементарную ячейку приходится одна дырка, основным состоянием системы является антиферромагнитный диэлектрик. Дырка при этом находится на ионе меди. Учитывая, что «двоечные» и «нулевые» состояния на ионах меди проявляются лишь виртуальным образом, при построении эффективного гамильтониана по операторной форме теории возмущений воспользуемся проекционным оператором:

$$\mathcal{P} = \prod_f (Z_f^{\uparrow\uparrow} + Z_f^{\downarrow\downarrow}). \quad (8)$$

Тогда эффективный гамильтониан можно представить в виде разложения [30]:

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{eff}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}^{(2)} + \hat{\mathcal{H}}^{(3)} + \hat{\mathcal{H}}^{(4)} + \dots, \quad (9)$$

где

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \varepsilon_d \sum_{f\sigma} Z_f^{\sigma\sigma} + \varepsilon_p \sum_f (\hat{n}_{f+\frac{x}{2}}^p + \hat{n}_{f+\frac{y}{2}}^p), \quad (10)$$

$$\hat{\mathcal{H}}^{(2)} = -(\mathcal{P}\hat{\mathcal{H}}_{\text{int}} - \mathcal{P}\hat{\mathcal{H}}_{\text{int}}\mathcal{P})(\hat{\mathcal{H}}_0 - E_0)^{-1}(\hat{\mathcal{H}}_{\text{int}}\mathcal{P} - \mathcal{P}\hat{\mathcal{H}}_{\text{int}}\mathcal{P}). \quad (11)$$

Проведя несложные вычисления, получим, что вклад в эффективный гамильтониан от «двоечных» и «нулевых» состояний ионов меди во втором порядке теории возмущений определяется выражением

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}^{(2)} = & -4N \frac{t_{pd}^2}{\Delta_{pd}} + \varepsilon_2 \sum_{f\delta\delta_1\sigma} u_{\delta\delta_1} p_{f+\delta, \sigma}^+ p_{f+\delta_1, \sigma} + \\ & + J \sum_{f\delta\delta_1\sigma\sigma'} u_{\delta\delta_1} p_{f+\delta, \sigma}^+ (S_f S_{\sigma\sigma'}) p_{f+\delta_1, \sigma'}, \end{aligned} \quad (12)$$

где первое слагаемое определяет вклад в энергию связи за счет процессов ковалентного смешивания. Второе слагаемое приводит к ренормировке затравочного спектра дырочных состояний на ионах кислорода. Интенсивность такой ренормировки зависит от величин

$$\varepsilon_2 = 2t_{pd}^2 \left(\frac{1}{\Delta_{pd}} - \frac{1}{U_d - \Delta_{pd}} \right), \quad u_{\delta\delta_1} = \frac{1}{4} \vartheta(\delta)\vartheta(\delta_1). \quad (13)$$

Третье слагаемое обусловлено возникновением обменной связи между спинами фермиевской подсистемы кислородных дырок и спинами подсистемы ионов меди. Параметр этой связи J определяется следующим выражением:

$$J = 8t_{pd}^2 \left(\frac{1}{\Delta_{pd}} + \frac{1}{U_d - \Delta_{pd}} \right). \quad (14)$$

В выражении (12) \mathbf{S}_f — векторный оператор локализованного на узле f спина, а оператор $\mathbf{s} = \boldsymbol{\tau}/2$, где вектор $\boldsymbol{\tau}$ составлен из матриц Паули: $\boldsymbol{\tau} = (\tau^x, \tau^y, \tau^z)$.

В четвертом порядке по параметру t_{pd} , как известно [31], возникает обменное взаимодействие между спиновыми моментами ионов меди

$$\mathcal{H}_{\text{exch}} = \frac{1}{2} \sum_{fm} I_{fm} (\mathbf{S}_f \mathbf{S}_m), \quad (15)$$

с величиной обменного параметра [32,33]:

$$I = \frac{4t_{pd}^4}{\Delta_{pd}^2} \left(\frac{1}{U_d} + \frac{1}{\Delta_{pd}} \right). \quad (16)$$

Приведенные в формулах (10), (12) и (15) слагаемые определяют гамильтониан спин-фермионной модели

$$\mathcal{H}_{sp-f} = \varepsilon_p \sum_l \hat{n}_l^p + \hat{\mathcal{H}}^{(2)} + \mathcal{H}_{\text{exch}}, \quad (17)$$

описывающей две энергетические зоны кислородных дырок, обменным образом взаимодействующих со спиновыми моментами ионов меди. Эти спиновые моменты взаимодействуют между собой посредством обменной связи, имеющей антиферромагнитный характер.

5. Редукция к ϕ - d -обменной модели

Расщепленный характер функции $u_{\delta\delta_1}$ относительно переменных δ и δ_1 позволяет значительно упростить вычисления энергетической структуры и физических свойств купратных сверхпроводников.

Введя преобразование Фурье для операторов $p_{f+\frac{x}{2},\sigma}$ и $p_{f+\frac{y}{2},\sigma}$:

$$p_{f+\frac{x}{2},\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ik(f+x/2)} a_{k\sigma},$$

$$p_{f+\frac{y}{2},\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ik(f+y/2)} b_{k\sigma}, \quad (18)$$

получим, что

$$\sum_{\delta} \vartheta(\delta) p_{f+\delta,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikf} (-2i)(v_{kx} a_{k\sigma} + v_{ky} b_{k\sigma}),$$

где $v_{kx} = \sin(k_x/2)$, $v_{ky} = \sin(k_y/2)$.

Определяя фермиевские операторы $\phi_{k\sigma}$ и $\psi_{k\sigma}$ посредством преобразования [8]:

$$\phi_{k\sigma} = (v_{kx} a_{k\sigma} + v_{ky} b_{k\sigma})/v_k,$$

$$\psi_{k\sigma} = (v_{kx} b_{k\sigma} - v_{ky} a_{k\sigma})/v_k, \quad v_k = \sqrt{v_{kx}^2 + v_{ky}^2}, \quad (19)$$

приходим к следующему виду эффективного гамильтониана:

$$\hat{\mathcal{H}}_{sp-f} = \sum_{k\sigma} \varepsilon_p \psi_{k\sigma}^+ \psi_{k\sigma} + \sum_{k\sigma} \xi_k \phi_{k\sigma}^+ \phi_{k\sigma} +$$

$$+ \frac{J}{N} \sum_{fkq\sigma\sigma'} e^{if(q-k)} v_k v_q \phi_{k\sigma}^+ (\mathbf{S}_f \mathbf{S}_{\sigma\sigma'}) \phi_{q\sigma'} + \frac{1}{2} \sum_{fm} I_{fm} (\mathbf{S}_f \mathbf{S}_m), \quad (20)$$

где

$$\xi_k = \varepsilon_p + \varepsilon_2(1 - \gamma_{1k}), \quad \gamma_{1k} = (\cos k_x + \cos k_y)/2. \quad (21)$$

В выражении (20) опущены несущественные для нашего рассмотрения постоянные. Главная особенность представленного гамильтониана заключается в том, что он описывает две подсистемы фермионов, не связанные между собой. При этом только одна из них, отвечающая ϕ -фермионам, взаимодействует с подсистемой локализованных спинов. Свободным ψ -фермионам соответствует бездисперсный уровень ε_p . Как будет видно из дальнейшего, эти степени свободы не дают вклада в низкотемпературную термодинамику рассматриваемой модели.

С учетом сказанного получаем, что эффективной моделью, описывающей спектр элементарных возбуждений купратных ВТСП, как фермиевский, так и бозевский, является ϕ - d -обменная модель:

$$\hat{\mathcal{H}}_{\phi-d} = \sum_{k\sigma} \xi_k \phi_{k\sigma}^+ \phi_{k\sigma} +$$

$$+ \frac{J}{N} \sum_{fkq\sigma\sigma'} e^{if(q-k)} v_k v_q \phi_{k\sigma}^+ (\mathbf{S}_f \mathbf{S}_{\sigma\sigma'}) \phi_{q\sigma'} + \frac{1}{2} \sum_{fm} I_{fm} (\mathbf{S}_f \mathbf{S}_m). \quad (22)$$

6. Редукция к эффективной $\tilde{t} - \tilde{J} - I$ -модели

Важнейшей особенностью полученной ϕ - d -обменной модели (22) является большая величина параметра обменной связи J между спиновыми моментами ионов меди и ϕ -фермионной подсистемой дырок, описываемых операторами $\phi_{k\sigma}$. При значениях параметров модели Эмери, соответствующих купратным ВТСП [32,33] (в единицах эВ):

$$U_d = 10,5, \quad \Delta_{pd} = 3,6, \quad t_{pd} = 1,3, \quad (23)$$

получаем, что $J = 5,72$ эВ.

Большая величина константы связи J и ее положительный знак обуславливают существенный выигрыш по энергии синглетного состояния элементарной ячейки в сравнении с триплетным. На основании данного факта в работе [5] было предложено в гильбертовом пространстве одноячеечных состояний оставить только синглетное состояние $|S\rangle$ и два состояния без дырки $|\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\rangle$, которые учитывают степень свободы локализованного на ионе меди спина. В качестве подходящей модели для описания низкоэнергетической динамики дырок в CuO_2 -плоскости авторы [5] предложили (без доказательства) использовать t - J -модель. В этой модели перенос синглета Жанга–Райса с ячейки на ячейку трактуется как перескок квазичастицы со спина в обратном направлении.

В данном разделе приведен строгий вывод эффективного гамильтониана, действующего на указанном гильбертовом подпространстве, показано, что он существенно отличается от обычно используемого гамильтониана t - J^* -модели, получаемого из модели Хаббарда в режиме СЭК.

Применяя преобразования

$$\varphi_{f\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikf} \varphi_{k\sigma}, \quad v_m = \frac{1}{N} \sum_k e^{ikm} v_k, \quad (24)$$

запишем гамильтониан φ - d -обменной модели (22) в представлении Ванье [20,28]:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\varphi-d} = & (\varepsilon_p + \varepsilon_2) \sum_{f\sigma} \varphi_{f\sigma}^+ \varphi_{f\sigma} - \frac{\varepsilon_2}{4} \sum_{f\delta\sigma} \varphi_{f\sigma}^+ \varphi_{f+2\delta,\sigma} + \\ & + J \sum_{f m \sigma \sigma'} v_n v_m \varphi_{f+n,\sigma}^+ (\mathbf{S}_f \mathbf{s}_{\sigma\sigma'}) \varphi_{f+m,\sigma'} + \frac{1}{2} \sum_{f m} I_{f m} (\mathbf{S}_f \mathbf{S}_m). \end{aligned} \quad (25)$$

Такая запись явным образом показывает, что φ - d -обменные взаимодействия ($m = n$) и спин-коррелированные перескоки φ -фермионов ($m \neq n$) в общем случае осуществляются между сколь угодно далекими узлами. Интенсивность этих взаимодействий определяется параметрами v_m и, как видно из табл. 1, довольно быстро убывает с расстоянием.

Выделим из гамильтониана (25) одноячеечную часть, содержащую самое сильное обменное взаимодействие при $m = n = 0$:

$$\hat{H}(f) = (\varepsilon_p + \varepsilon_2) \sum_{\sigma} \varphi_{f\sigma}^+ \varphi_{f\sigma} + J v_0^2 \sum_{\sigma\sigma'} \varphi_{f\sigma}^+ (\mathbf{S}_f \mathbf{s}_{\sigma\sigma'}) \varphi_{f\sigma'}. \quad (26)$$

Спектр собственных значений оператора (26) в одночастичном секторе определяется энергией синглетного состояния $E_S = \varepsilon_p + \varepsilon_2 - (3/4)Jv_0^2$ и энергией триплетных состояний $E_T = \varepsilon_p + \varepsilon_2 + Jv_0^2/4$. При выбранных параметрах модели: $E_T - E_S = Jv_0^2 = 5,25$ эВ. Существенная разнесенность уровней E_S и E_T по энергии означает, что в однодырочном секторе базиса гильбертова пространства на одной ячейке можно в главном приближении не учитывать триплетные состояния. В этом случае усеченный базис ячейки состоит из трех, отмечавшихся в начале раздела, состояний: $|S\rangle$ и $|\sigma\rangle$ ($\sigma = \uparrow, \downarrow$).

Вводя операторы Хаббарда ячейки с индексом f $X_f^{mn} = |f; m\rangle\langle n; f|$ ($m, n = \uparrow, \downarrow, S$), и используя условия полноты введенного базиса $\sum_m X_f^{mm} = 1$, нетрудно получить представления для φ -операторов и операторов спина через операторы Хаббарда:

$$\varphi_{f\sigma} = \frac{2\bar{\sigma}}{\sqrt{2}} X_f^{\bar{\sigma}S}, \quad S_f^+ = X_f^{\uparrow\downarrow}, \quad S_f^- = X_f^{\downarrow\uparrow}, \quad S_f^z = \sum_{\sigma} \sigma X_f^{\sigma\sigma}. \quad (27)$$

Подставляя выражения (27) в гамильтониан φ - d -обменной модели (29), приходим к искомому гамильтониану $\tilde{t} - \tilde{J}^* - I$ -модели:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\tilde{t}-J-I} = & E_S \sum_f X_f^{SS} + \sum_{f\delta\sigma} t_1 X_f^{S\sigma} X_{f+2\delta}^{\sigma S} + \\ & + \sum_{\substack{f m \sigma \\ m \neq 0, 2\delta}} t_m X_f^{S\sigma} X_{f+m}^{\sigma S} + \frac{1}{2} \sum_{f m} I_{f m} \mathbf{S}_f \mathbf{S}_m + \hat{H}_3, \end{aligned} \quad (28)$$

где

$$\begin{aligned} \hat{H}_3 = & \frac{J}{4} \sum'_{f m \sigma} v_n v_m \left[X_{f+n}^{S\sigma} X_f^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} X_{f+m}^{\sigma S} - \right. \\ & \left. - X_{f+n}^{S\bar{\sigma}} X_f^{\sigma\sigma} X_{f+m}^{\sigma S} + \frac{1}{2} X_{f+n}^{S\bar{\sigma}} X_f^{SS} X_{f+m}^{\sigma S} \right], \end{aligned} \quad (29)$$

$$E_S = \varepsilon_p + \varepsilon_2 - \frac{3}{4} J v_0^2,$$

$$t_1 = -\frac{\varepsilon_2}{8} + \frac{J}{32} - \frac{J}{2} v_0 v_1, \quad t_m = -\frac{1}{2} J v_0 v_m.$$

В выражении (28) во втором слагаемом суммирование ведется по ближайшим соседям, а в третьем — по второй и более удаленным координационным сферам.

Таблица 1. Значения функций v_m для пяти ближайших координационных сфер, m — номер координационной сферы, соответствующий радиусу-вектору r_m

m	0	1	2	3	4	5
v_m	-0,9581	-0,1401	-0,0235	-0,0137	-0,0069	-0,0035

Штрих у суммы в формуле (29) означает, что индексы m и n не равны нулю и не равны друг другу. Величины J, ε_2 и I определены в (13)–(16).

Знак «тильда» над символами t и J в названии модели отражает тот факт, что в модели присутствуют перескоки (t) и трехцентровые взаимодействия (J) между узлами из дальних координационных сфер. Наличие обменного взаимодействия между спинами ионов меди отражено символом I .

Полученная нами $\tilde{t} - \tilde{J}^* - I$ -модель (28) имеет существенное отличие от $t - J^*$ -модели, выводимой из однозонной модели Хаббарда. $t - J^*$ -модель представляет собой обычную $t - J$ -модель, в которой учтены трехцентровые слагаемые, описывающие спин-коррелированные перескоки квазичастиц [7]. Обменные и трехцентровые взаимодействия в $t - J^*$ -модели имеют одинаковый порядок малости и, вообще говоря, должны рассматриваться на равных правах [34–36]. Тем не менее в подавляющем числе исследований трехцентровыми взаимодействиями пренебрегают на том основании, что их интенсивность пропорциональна степени легирования x [32]. Подобная аргументация обоснована при исследовании кинетических свойств фермиевских квазичастиц. Однако в тех случаях, когда масштаб характерных энергий задается величиной обменного интеграла, учет трехцентровых взаимодействий имеет существенное значение. Это имеет место, например, при описании сверхпроводимости d -типа [35] или коллективных спиновых колебаний [37].

Полученный гамильтониан $\tilde{t} - \tilde{J}^* - I$ -модели кардинально меняет существующее представление. В гамильтониане (28) трехцентровые слагаемые (29) пропорциональны параметру J и имеют второй порядок малости по константе гибридизации t_{pd} . Обменные же взаимодействия обусловлены параметром I , имеющим четвертый порядок малости по t_{pd} . Соотношение $J \gg I$ означает, что в $\tilde{t} - \tilde{J}^* - I$ -модели роль трехцентровых взаимодействий существенно более значима, чем в обычной $t - J^*$ -модели, и эти взаимодействия должны учитываться при исследовании купратных ВТСП как в нормальной, так и в сверхпроводящей фазах.

Следует также отметить, что в выражении для трехцентровых взаимодействий (29), помимо спин-коррелированных перескоков, возникают также зарядово-коррелированные перескоки (третье слагаемое), которые отсутствуют в обычной $t - J^*$ -модели.

7. Сравнительный анализ спин-поляронных спектров в эффективных моделях купратных ВТСП: роль дальних взаимодействий

В данном разделе мы проведем вычисление и сравнение дисперсионных кривых фермиевских спин-поляронных возбуждений в эффективных низкоэнергетических моделях купратных ВТСП: спин-фер-

мионной модели (17), ϕ - d -обменной модели (22) и $\tilde{t} - \tilde{J}^* - I$ -модели (28).

Расчет дисперсионных кривых выполним на основе метода уравнений движения для двухвременных запаздывающих функций Грина. Для замыкания цепочки уравнений движения воспользуемся проекционной техникой Цванцига–Мори [38,39]. Реализация данного подхода (эквивалентного методу неприводимых функций Грина [40,41]) для спин-поляронной модели (17) подробно изложена в работе [23]. В рамках данного метода вводится минимальный набор базисных операторов A_j ($j = 1, \dots, n$), достаточный для описания динамики квазичастиц с учетом имеющихся в системе взаимодействий. В качестве первого оператора A_1 выбирается оператор затравочной квазичастицы. Для A_1 пишется уравнение движения, правая часть которого, помимо затравочного оператора, содержит также более сложное операторное выражение, принимаемое далее в качестве следующего базисного оператора. Именно этот сложный оператор позволяет корректно учитывать специфику взаимодействий в системе. Как правило, полученного таким образом базиса оказывается достаточно. Далее осуществляется проецирование уравнений движения для всех базисных операторов на этот же базис.

Применение проекционного метода в рамках формализма запаздывающих функций Грина приводит к необходимости расчета энергетической матрицы $\hat{D}(k)$ с элементами $D_{ij}(k) = \langle \{ [A_{ik}, \hat{H}], A_{jk}^+ \} \rangle$ и матрицы $\hat{K}(k)$ с элементами $K_{ij}(k) = \langle \{ A_{ik}, A_{jk}^+ \} \rangle$, где угловые скобки обозначают термодинамическое среднее. Тогда матричная запаздывающая функция Грина $\hat{G}(k, \omega)$ с элементами $G_{ij}(k, \omega) = \langle \langle A_{ik} | A_{jk}^+ \rangle \rangle_{\omega}$ находится из выражения

$$\hat{G}(k, \omega) = \left(\omega \hat{I} - \hat{D}(k) \hat{K}^{-1}(k) \right)^{-1} \hat{K}(k), \quad (30)$$

где \hat{I} — единичная матрица. Спектр фермиевских возбуждений определяется полюсами функции Грина $\hat{G}(k, \omega)$.

Для гамильтониана спин-фермионной модели (17) в качестве затравочных выбираются два оператора: $a_{k\sigma}$ и $b_{k\sigma}$, которые, согласно (18), являются фурье-образами операторов $p_{f+\frac{x}{2},\sigma}$ и $p_{f+\frac{y}{2},\sigma}$ соответственно. Записывая уравнения движения для указанных операторов, получаем, что минимальный базис для модели (17) состоит из трех наборов операторов:

$$a_{k\sigma}, b_{k\sigma}, L_{k\sigma} = \frac{1}{N} \sum_{qf\alpha} e^{if(q-k)} (S_f \tau_{\sigma\alpha}) (v_{qx} a_{q\alpha} + v_{qy} b_{q\alpha}). \quad (31)$$

Элементы матриц $\hat{D}(k)$ и $\hat{K}(k)$, рассчитанные с использованием базиса (31) и гамильтониана спин-фермионной модели (17), содержатся в работе [24] и поэтому здесь не приводятся. В выражения для этих

матричных элементов входят парные спиновые корреляционные функции $C_j = \langle S_f S_{f+r_j} \rangle$, где r_j — радиус j -ой координационной сферы. Концентрационная зависимость спиновых корреляторов C_j для ВТСП купратов обсуждалась ранее в работах [21,23,24]. При этом считалось, что магнитная подсистема находится в состоянии SU(2)-инвариантной квантовой спиновой жидкости. Это, в частности, означает, что $\langle S_f^{x(y,z)} \rangle = 0$, а для спиновых корреляторов выполняется соотношение $\langle S_f^{x(y,z)} S_{f+r_j}^{x(y,z)} \rangle = \frac{1}{3} C_j$. Следуя работе [24], выбираем следующие значения спиновых корреляторов при концентрации дырок $x = 0,07$: $C_1 = -0,255$, $C_2 = 0,075$, $C_3 = 0,064$. Зарядовые и спин-зарядовые корреляционные функции, возникающие при вычислении элементов матриц $\hat{D}(k)$ и $\hat{K}(k)$, здесь не учитываются, поскольку интересующая нас степень легирования мала.

На рис. 2 представлены три ветви энергетического спектра фермиевских возбуждений в спин-фермионной модели (17). Эти спектры получены в результате численного решения дисперсионного уравнения третьей степени: $|\omega\hat{I} - \hat{D}(k)\hat{K}^{-1}(k)| = 0$, определяющего полюса функций Грина (30). При расчетах для параметров спин-фермионной модели были использованы значения $J = 5,72$ эВ, $\varepsilon_2 = 0,45$ эВ. Эти значения получаются из определений (13) и (14) при подстановке в них параметров p - d -модели (23). Константа обмена I для простоты была положена равной нулю.

Нижняя ветвь на рис. 2 представляет спектр спин-поляронных возбуждений. Значительное понижение энергий спин-поляронных состояний возникает благодаря учету третьего оператора $L_{k\sigma}$ в базисе (31). Важной особенностью полученного спин-поляронного спектра является наличие наблюдаемого в ARPES экспериментах минимума дисперсии в направлении ($\Gamma - M$) зоны Бриллюэна.

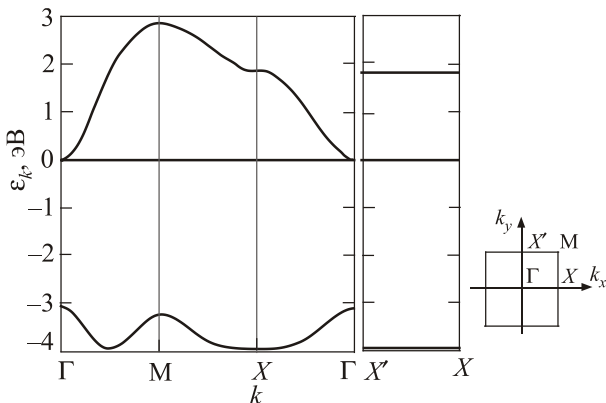


Рис. 2. Спектр фермиевских возбуждений в спин-фермионной модели (17). Параметры модели, эВ: $J = 5,72$, $\varepsilon_2 = 0,45$, $I = 0$. Спиновые корреляторы принимались равными: $C_1 = -0,255$, $C_2 = 0,075$, $C_3 = 0,064$.

люэна. Для актуальной области легирования ВТСП купратов химпотенциал всегда лежит в нижней спин-поляронной зоне, поэтому в дальнейшем мы будем обсуждать только эту нижнюю зону.

Расчет фермиевского спектра для гамильтониана ϕ - d -обменной модели (22) проведем в рамках той же проекционной техники. Теперь, однако, первым базисным оператором должен считаться $\phi_{k\sigma}$. Учитывая оператор, возникающий в уравнении движения для $\phi_{k\sigma}$, приходим к базису из двух операторов:

$$\phi_{k\sigma}, L_{k\sigma} = \frac{1}{N} \sum_{qf\alpha} e^{if(q-k)} (S_f \tau_{\sigma\alpha}) v_q \phi_{q\alpha}. \quad (32)$$

Видно, что второй оператор этого базиса совпадает с третьим оператором базиса (31).

Вычисляя элементы матриц $\hat{D}(k)$ и $\hat{K}(k)$ в базисе (32) и решая дисперсионное уравнение второго порядка $|\omega\hat{I} - \hat{D}(k)\hat{K}^{-1}(k)| = 0$, находим аналитическое выражение для нижней ветви спин-поляронных возбуждений в ϕ - d -обменной модели (22):

$$E_{sp}(k) = \frac{\xi_k + D_k/K_k}{2} - \frac{1}{2} \sqrt{(\xi_k - D_k/K_k)^2 + J^2 v_k^2 K_k}, \quad (33)$$

где

$$\begin{aligned} D_k &= (\varepsilon_p - J + 2\varepsilon_2)K_k + J(3 + C_1)/8 + \\ &+ \varepsilon_2(-9/16 + C_2\gamma_{2k}/2 + C_3\gamma_{3k}/4), \\ K_k &= 3/4 - C_1\gamma_{1k}, \quad \gamma_{2k} = \cos k_x \cos k_y, \\ \gamma_{3k} &= (\cos 2k_x + \cos 2k_y)/2. \end{aligned} \quad (34)$$

Результаты расчета спин-поляронного спектра ϕ - d -обменной модели по формуле (33) представлены на рис. 3 сплошной жирной линией. Эта линия в точности воспроизводит нижнюю кривую на рис. 2, отвечающую закону дисперсии спиновых поляронов в спин-фермионной модели (17). Такое совпадение дисперсионных кривых неслучайно, и объясняется тем, что в используемом нами приближении ($t_{pp} = 0$, $U_p = 0$, $V_{pp} = 0$, $V_{pd} = 0$) ψ -орбиталь оказывается неактивной, и поэтому базисы (31) и (32) эквивалентны. При включении любого из взаимодействий t_{pp} , U_p , V_{pp} или V_{pd} к основному состоянию системы начинают примешиваться ψ -состояния и указанные базисы операторов перестают быть эквивалентными. При этом предпочтительным оказывается базис (31), так как позволяет получить более низкое значение энергии основного состояния.

Важный вопрос, который возникает в данной теории, связан с ролью дальних взаимодействий. Дело в том, что корректная формулировка трехзонной модели Эмери с использованием диагонализующих ϕ - и ψ -орбиталей в представлении Ванье всегда сопряжена с

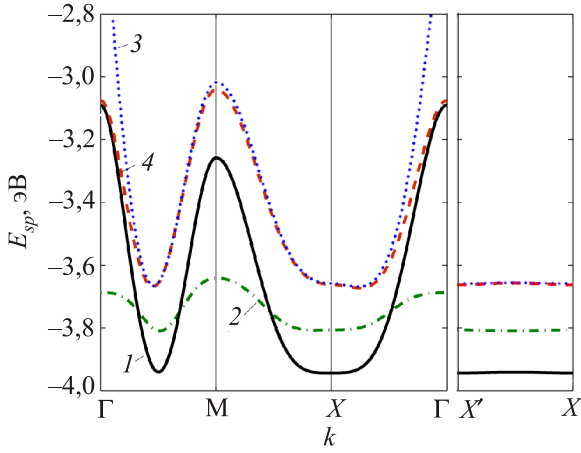


Рис. 3. (Онлайн в цвете) Сравнение спектров фермиевских возбуждений спин-поляронных квазичастиц, полученных в рамках различных моделей. Параметры модели и спиновые корреляторы такие же, как и на рис. 2. 1 — спектр в спин-фермионной модели (17) и ϕ - d -обменной модели (22), 2 — спин-поляронный спектр в редуцированной ϕ - d -обменной модели (35), 3 — спектр (37) $\tilde{t} - \tilde{J}^* - I$ -модели (28), а 4 — спектр спиновых поляронов в ϕ - d -обменной модели (25), рассчитанный при учете базиса из двух ($A_{1f\sigma}^{(r)}$ и $A_{2f\sigma}^{(r)}$) операторов (36).

появлением взаимодействий из дальних координационных сфер. Примером может служить гамильтониан ϕ - d -обменной модели в форме (25). Поскольку интенсивность отмеченных взаимодействий с расстоянием убывает, то на практике всегда ограничиваются взаимодействиями только между ближайшими соседями [29]. Адекватность подобных упрощений, однако, вызывает сомнения [14], поскольку уменьшение величины дальних взаимодействий может компенсироваться увеличением числа далеких соседей.

Для выяснения данного вопроса сравним спектр спин-поляронных возбуждений в ϕ - d -обменной модели и в ее редуцированном варианте. Последний определим на основе выражения (25), оставив в нем ϕ - d -обменные взаимодействия только на одной ячейке и между ближайшими ячейками:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{\phi-d}^{(r)} = & (\varepsilon_p + \varepsilon_2) \sum_{f\sigma} \Phi_{f\sigma}^+ \Phi_{f\sigma} - \frac{\varepsilon_2}{4} \sum_{f\tilde{\delta}\sigma} \Phi_{f\sigma}^+ \Phi_{f+2\tilde{\delta},\sigma} + \\ & + Jv_0^2 \sum_{f\sigma\sigma'} \Phi_{f\sigma}^+ (\mathbf{S}_f \mathbf{s}_{\sigma\sigma'}) \Phi_{f\sigma'} + \\ & + Jv_0v_1 \sum_{f\tilde{\delta}\sigma\sigma'} \left[\Phi_{f+2\tilde{\delta},\sigma}^+ (\mathbf{S}_f \mathbf{s}_{\sigma\sigma'}) \Phi_{f\sigma'} + \text{h.c.} \right] + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{fm} I_{fm} (\mathbf{S}_f \mathbf{S}_m). \end{aligned} \quad (35)$$

Четвертое слагаемое в (35) описывает такие перескоки дырок между ближайшими ячейками, которые учитывают корреляцию со спином на одной из этих ячеек. Подобные процессы, в частности, рассматривались в работе [29].

Для расчета спектра фермиевских возбуждений в системе, описываемой гамильтонианом редуцированной ϕ - d -обменной модели $\hat{\mathcal{H}}_{\phi-d}^{(r)}$, введем три набора базисных операторов:

$$A_{1f\sigma}^{(r)} = \Phi_{f\sigma}, \quad A_{2f\sigma}^{(r)} = \sum_{\alpha} (\mathbf{S}_f \boldsymbol{\tau}_{\sigma\alpha}) \Phi_{f\alpha},$$

$$A_{3f\sigma}^{(r)} = \sum_{\delta\alpha} (\mathbf{S}_f \boldsymbol{\tau}_{\sigma\alpha}) \Phi_{f+2\delta,\alpha}. \quad (36)$$

Этот базис строится тем же способом, что и базисы (31) и (32), но в представлении Ванье. Первый оператор $\Phi_{f\sigma}$ — затравочный, а два других возникают в уравнении движения для этого оператора.

Элементы матриц $\hat{D}^r(k)$ и $\hat{K}^r(k)$ для редуцированного гамильтониана $\mathcal{H}_{\phi-d}^{(r)}$, вычисленные в базисе (36), приведены в Приложении 1, а спектр спин-поляронных возбуждений модели (35), полученный согласно изложенной выше методике, представлен на рис. 3 штрихпунктирной линией.

Видно, что пренебрежение дальними спин-коррелированными перескоками привело к существенным последствиям. Во-первых, почти в четыре раза уменьшилась ширина спин-поляронной зоны. Во-вторых, минимальная энергия квазичастицы, достигаемая в окрестности точки $(\pi/2, \pi/2)$ зоны Бриллюэна, заметно подросла.

Может возникнуть подозрение, что сильное различие полученных дисперсионных кривых связано не только с пренебрежением дальних спин-коррелированных перескоков в одном из гамильтонианов, но и с использованием разных базисов операторов (32) и (36). Однако расчет спектра спин-поляронных возбуждений в полной ϕ - d -обменной модели при использовании базиса (36) показывает, что спектр нижней энергетической зоны с точностью до нескольких процентов совпадает с жирной сплошной линией на рис. 3. Следовательно, оба базиса операторов, как (32), так и (36), одинаково хорошо воспроизводят поведение спиновых поляронов, и различие в спектрах полной и редуцированной ϕ - d -обменных моделей обусловлено только пренебрежением дальних спин-коррелированных перескоков в гамильтониане (35).

Спектр полученной нами $\tilde{t} - \tilde{J}^* - I$ -модели рассмотрим в простейшем приближении, включив в базис только один оператор $X_f^{0\sigma}$. В отличие от спин-фермионной и ϕ - d -обменной моделей здесь уже «затравочный» оператор учитывает одноузельные корреляции, обусловленные сильным ϕ - d -обменным взаимодействием. Поэтому зона затравочных квазичастиц в $\tilde{t} - \tilde{J}^* - I$ -мо-

дели уже по определению отвечает спин-поляронным возбуждениям.

В рамках проекционного метода спин-поляронный спектр $\tilde{t} - \tilde{J}^* - I$ -модели определяется выражением $E_{t-J-I}(k) = \langle \{ [X_k^{\sigma S}, \hat{H}_{t-J-I}], X_k^{\sigma S} \} \rangle / \langle \{ X_k^{\sigma S}, X_k^{\sigma S} \} \rangle$, где $X_k^{\sigma S} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_f e^{-ikf} X_f^{\sigma S}$. Проводя в выражении для $E_{tJ}(k)$ вычисление средних и учитывая режим слабого легирования, получаем:

$$E_{t-J-I}(k) = \varepsilon_p + \varepsilon_2 - \varepsilon_2 (C_1 + 1/4) \gamma_{1k} + \frac{J}{2} \left[-\bar{C}_k (v_k + 2v_0) + \sum_f v_f^2 C_f \right], \quad (37)$$

где $\bar{C}_k = \sum_f e^{ikf} v_f C_f$ и $v_0 \equiv v_{f=0}$.

Рассчитанный по формуле (37) спин-поляронный спектр представлен на рис. 3 пунктирной линией. Видно, что этот спектр по-прежнему воспроизводит главную особенность, характерную для спектра фермиевских возбуждений в купратах — наличие минимума в окрестности точки $(\pi/2, \pi/2)$ зоны Бриллюэна в направлении $\Gamma - M$. Однако минимальная энергия квазичастицы в сравнении с дисперсией спин-фермионной модели (сплошная жирная линия на рис. 3) увеличилась примерно на 0,3 эВ. Отмеченное увеличение произошло из-за отсутствия в выбранном нами базисе $\tilde{t} - \tilde{J}^* - I$ -модели оператора типа $Y_{f\sigma} = \sum_{\delta\alpha} (\mathbf{S}_f \cdot \mathbf{s}_{\sigma\alpha}) X_{f+2\delta}^{\alpha S}$, позволяющего учитывать межузельные ϕ - d -обменные корреляции.

Для доказательства данного утверждения следует рассчитать спектр $\tilde{t} - \tilde{J}^* - I$ -модели в базисе двух операторов $X_f^{\sigma S}$, $Y_{f\sigma}$ и убедиться, что низкоэнергетическая часть этого спектра совпадает с законом дисперсии спин-поляронных возбуждений в ϕ - d -обменной модели (25). Поскольку, однако, из-за сложной алгебры операторов Хаббарда эти расчеты представляются трудоемкими, мы поступим наоборот: исключим из базиса (36) третий оператор $A_{3f\sigma}^{(r)}$, учитывающий межузельные ϕ - d -обменные корреляции, рассчитаем в базисе оставшихся двух операторов спектр спиновых поляронов ϕ - d -обменной модели и сравним его со спектром в $\tilde{t} - \tilde{J}^* - I$ -модели.

Представленный на рис. 3 штриховой линией спин-поляронный спектр ϕ - d -обменной модели, рассчитанный при учете только двух ($A_{1f\sigma}^{(r)}$ и $A_{2f\sigma}^{(r)}$) операторов, действительно демонстрирует совпадение со спектром $\tilde{t} - \tilde{J}^* - I$ -модели в низкоэнергетическом секторе. Отличия в высокоэнергетической части спектров обусловлены тем, что в гамильтониане $\tilde{t} - \tilde{J}^* - I$ -модели отсутствуют вклады от одноячеечных триплетных состояний, которые учитываются при построении спектра ϕ - d -обменной модели.

В заключение данного раздела отметим, что в рассматриваемом режиме слабого легирования при построении спектров фермиевских возбуждений не возникло необходимости в использовании химического потенциала. Однако описание термодинамических или сверхпроводящих свойств спин-поляронных квазичастиц следует проводить в рамках большого канонического ансамбля. В этом случае в гамильтониан спин-фермионной и ϕ - d -обменной модели необходимо добавить слагаемое $-\mu \sum_l \hat{n}_l^p$, а в гамильтониан

$\tilde{t} - \tilde{J}^* - I$ -модели — слагаемое $-\mu \sum_f X_f^{SS}$.

8. Заключение

В работе последовательно выводятся три низкоэнергетические модели электронного строения купратных высокотемпературных сверхпроводников. На первом шаге, исходя из реалистичной трехзонной модели Эмери при параметрах, соответствующих режиму сильных электронных корреляций, в рамках операторной теории возмущений выводится спин-фермионная модель [14,19]. Особенность этой модели связана с двумя существенными факторами. Первый определяется тем, что в рамках получаемой эффективной модели состояния ионов меди приобретают свойство гомеополарности и характеризуются спиновым моментом $S = 1/2$. Вторая особенность связана с наличием в модели спин-коррелированных перескоков кислородных дырок. В результате движение дырок по ионам кислорода сопровождается коррелированной динамикой спиновых степеней свободы в подсистеме спиновых моментов ионов меди. Именно эти процессы определяют характерные особенности энергетического спектра фермиевских состояний, обусловленные, например, возникновением минимума энергии в точке $(\pi/2, \pi/2)$ зоны Бриллюэна.

Второй этап редукции модели Эмери связан с введением функций ϕ и ψ [8,10,15,17], построенных на основе кислородных p_x - и p_y -орбиталей. Это позволяет реализовать переход от спин-фермионной модели к ϕ - d -обменной модели, характеризующейся наличием обменных взаимодействий и спин-коррелированных перескоков из дальних координационных сфер.

Заключительный этап редукции модели Эмери основан на введении атомного представления для описания локальных сильно связанных спиновых поляронов. Такой подход приводит к модели, названной нами $\tilde{t} - \tilde{J}^* - I$ -модель. Обозначение \tilde{t} используется для подчеркивания того факта, что перескоки между узлами, относящимися к дальним координационным сферам, присутствуют в модели явно и имеют существенное значение. Символ \tilde{J}^* отражает наличие в модели трехцентровых слагаемых, описывающих коррелированные перескоки кислородных дырок с учетом пере-

скоков из дальних координационных сфер. При этом в модель входят как спиновые, так и зарядовые корреляции. Присутствие обменного взаимодействия между спинами ионов меди отражено символом I .

На основе сравнения спектров спин-поляронных квазичастиц в первых двух моделях с соответствующим спектром редуцированной ϕ - d -обменной модели (в которой оставлены только взаимодействия между ближайшими ячейками) делается вывод о важности дальних спин-коррелированных перескоков, которыми обычно пренебрегают. В частности, показано, что учет дальних взаимодействий приводит к значительному увеличению ширины спин-поляронной зоны, а также к дополнительному понижению энергии спин-поляронной квазичастицы (см. рис. 3).

Показано, что полученная $\tilde{t}-\tilde{J}^*-I$ -модель существенно отличается от обычной $t-J^*$ -модели, следующей из модели Хаббарда в режиме сильных электронных корреляций [42]. Главное отличие состоит в том, что в $\tilde{t}-\tilde{J}^*-I$ -модели трехцентровые взаимодействия, описывающие спин-коррелированные перескоки квазичастиц, существенно превосходят по величине обменные взаимодействия. Отмеченное обстоятельство определяет новый взгляд на роль трехцентровых взаимодействий в теории купратных ВТСП. В частности, как отмечалось выше, именно учет трехцентровых взаимодействий обуславливает появление в дисперсионных зависимостях спин-поляронных возбуждений минимума в окрестности точки $(\pi/2, \pi/2)$ зоны Бриллюэна в направлении $\Gamma-M$. Этот минимум характерен для всех, приведенных на рис. 3, спектральных кривых.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, Правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда поддержки научной и научно-технической деятельности в рамках научного проекта № 16-42-240435, а также комплексной программы СО РАН № II.2П (проект № 0356-2015-0405). Работа А.Ф. Барабанова поддержана РФФИ (грант № 16-02-00304).

Приложение

Для системы, описываемой редуцированным гамилтонианом ϕ - d -обменной модели (35), элементы матриц $\hat{D}^r(k)$ и $\hat{K}^r(k)$, рассчитанные в базисе трех операторов (36), имеют следующий вид ($D_{ij}^r = D_{ji}^r$, $K_{ij}^r = K_{ji}^r$):

$$K_{11}^r = 1; \quad K_{12}^r = K_{13}^r = 0, \quad K_{22}^r = 3/4;$$

$$K_{23}^r = 4C_1\gamma_{1k}; \quad K_{33}^r = 3 + 8C_2\gamma_{2k} + 4C_3\gamma_{3k}.$$

$$D_{11}^r = \epsilon_p + \epsilon_2(1 - \gamma_{1k}),$$

$$D_{12}^r = Jv_0^2/3 + Jv_1v_0(3/2 + 2C_1)\gamma_{1k}, \quad (\text{П1})$$

$$D_{13}^r = 2Jv_0^2C_1\gamma_{1k} + Jv_1v_0(3/2 + 8C_1\gamma_{1k}^2 + 4C_2\gamma_{2k} + 2C_3\gamma_{3k}),$$

$$D_{22}^r = (\epsilon_p + \epsilon_2)3/4 - \epsilon_2C_1\gamma_{1k} - Jv_0^2/3 - 4Jv_1v_0C_1\gamma_{1k},$$

$$D_{23}^r = (\epsilon_p + \epsilon_2)4C_1\gamma_{1k} - \epsilon_2(3/4 + 2C_2\gamma_{2k} + C_3\gamma_{3k}) -$$

$$- 2Jv_0^2C_1\gamma_{1k} - 2Jv_1v_0(3/4 - C_1 + 2C_2\gamma_{2k} + C_3\gamma_{3k}),$$

$$D_{33}^r = (\epsilon_p + \epsilon_2)(3 + 8C_2\gamma_{2k} + 4C_3\gamma_{3k}) -$$

$$- \epsilon_2(9C_1\gamma_{1k} + 6C_4\gamma_{4k} + C_6\gamma_{6k}) +$$

$$+ 2Jv_0^2C_1 + 16Jv_1v_0C_1(1 - \gamma_{1k}),$$

где функции γ_{jk} ($j = 1, 2, 3, 4, 6$) — базисные функции квадратной решетки:

$$\gamma_{1k} = (\cos k_x + \cos k_y)/2, \quad \gamma_{2k} = \cos k_x \cos k_y,$$

$$\gamma_{3k} = (\cos 2k_x + \cos 2k_y)/2,$$

$$\gamma_{4k} = (\cos 2k_x \cos k_y + \cos 2k_y \cos k_x)/2,$$

$$\gamma_{6k} = (\cos 3k_x + \cos 3k_y)/2.$$

При получении выражений (П1) учитывались соотношения ($\tilde{S}_m = \mathbf{S}_m \boldsymbol{\tau}$)

$$\langle \tilde{S}_m \tilde{S}_n \rangle = C_{m-n}, \quad \langle \tilde{S}_f \tilde{S}_m \tilde{S}_n \rangle =$$

$$= -\delta_{f,m} C_{f-n} - \delta_{m,n} C_{f-m} + \delta_{f,n} C_{f-m},$$

справедливые в $SU(2)$ -инвариантной спин-жидкостной фазе.

1. V.J. Emery, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2794 (1987).
2. C.M. Varma, S. Schmitt-Rink, and E. Abrahams, *Solid State Commun.* **62**, 681 (1987).
3. J.E. Hirsch, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 228 (1987).
4. Y.B. Gaididei and V.M. Loktev, *Phys. Status Solidi B* **147**, 307 (1988).
5. F.C. Zhang and T.M. Rice, *Phys. Rev. B* **37**, 3759 (1988).
6. В.М. Локтев, *ФНТ* **22**, 3 (1996) [*Low Temp. Phys.* **22**, 1 (1996)].
7. Y.A. Izyumov, *Phys. Usp.* **40**, 445 (1997).
8. B.S. Shastry, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 1288 (1989).
9. S. Lovtsov and V. Yushankhai, *Physica C* **179**, 159 (1991).
10. J.H. Jefferson, H. Eskes, and L.F. Feiner, *Phys. Rev. B* **45**, 7959 (1992).
11. М.В. Еремин, С.Г. Соловьянов, С.В. Варламов, *ЖЭТФ* **112**, 1763 (1997).
12. В.А. Гавричков, С.Г. Овчинников, *ФТТ* **40**, 184 (1998).
13. Д.Ф. Дигор, В.А. Москаленко, *ТМФ* **130**, 320 (2002).
14. J. Zaanen and A.M. Oles, *Phys. Rev. B* **37**, 9423 (1988).
15. L.F. Feiner, J.H. Jefferson, and R. Raimondi, *Phys. Rev. B* **53**, 8751 (1996).

16. V.Y. Yushankhai, V.S. Oudovenko, and R. Hayn, *Phys. Rev. B* **55**, 15562 (1997).
17. R. Raimondi, J.H. Jefferson, and L.F. Feiner, *Phys. Rev. B* **53**, 8774 (1996).
18. В.А. Гавричков, С.Г. Овчинников, А.А. Борисов, Е.Г. Горячев, *ЖЭТФ* **118**, 422 (2000).
19. А.Ф. Барабанов, Л.А. Максимов, Г. Уймин, *Письма в ЖЭТФ* **47**, 532 (1988).
20. P. Prelovsek, *Phys. Lett. A* **126**, 287 (1988).
21. А.Ф. Барабанов, В. Березовский, Э. Жасинас, Л.А. Максимов, *ЖЭТФ* **110**, 1480 (1996).
22. A.F. Barabanov, R.O. Kuzian, and L.A. Maksimov, *Phys. Rev. B* **55**, 4015 (1997).
23. А.Ф. Барабанов, Р. Хайн, А. Ковалев, О.В. Уразаев, А.М. Белемук, *ЖЭТФ* **119**, 777 (2001).
24. Д.М. Дзебисашвили, В.В. Вальков, А.Ф. Барабанов, *Письма в ЖЭТФ* **98**, 596 (2013).
25. В.В. Вальков, Д.М. Дзебисашвили, А.Ф. Барабанов, *ЖЭТФ* **145**, 1087 (2014).
26. V.V. Val'kov, D.M. Dzebisashvili, and A.F. Barabanov, *Phys. Lett. A* **379**, 421 (2015).
27. V.V. Val'kov, D.M. Dzebisashvili, M.M. Korovushkin, and A.F. Barabanov, *JETP Lett.* **103**, 385 (2016).
28. A. Ramsak and P. Prelovsek, *Phys. Rev. B* **40**, 2239 (1989).
29. A. Ramsak and P. Prelovsek, *Phys. Rev. B* **42**, 10415 (1990).
30. Н. Боголюбов, *Введение в квантовую статическую механику*, Наука, Москва (2007), т. 7.
31. V.J. Emery and G. Reiter, *Phys. Rev. B* **38**, 4547 (1988).
32. M. Ogata and H. Fukuyama, *Rep. Prog. Phys.* **71**, 036501 (2008).
33. M.S. Hybertsen, M. Schlüter, and N.E. Christensen, *Phys. Rev. B* **39**, 9028 (1989).
34. V.Yu. Yushankhai, G. Vujicic, and R. Zakula, *Phys. Lett. A* **151**, 254 (1990).
35. В.В. Вальков, Т.А. Валькова, Д.М. Дзебисашвили, С.Г. Овчинников, *Письма в ЖЭТФ* **75**, 450 (2002).
36. В.В. Вальков, Д.М. Дзебисашвили, *ЖЭТФ* **127**, 686 (2005).
37. М.В. Еремин, М.А. Малахов, *Письма в ЖЭТФ* **104**, 13 (2016).
38. R. Zwanzig, *Phys. Rev.* **124**, 983 (1961).
39. H. Mori, *Prog. Theor. Phys.* **33**, 423 (1965).
40. Ю.А. Церковников, *ТМФ* **49**, 219 (1981).
41. N.M. Plakida, V.Yu. Yushankhay, and I.V. Stasyuk, *Physica C* **162–164**, 787 (1989).
42. K.A. Chao, J. Spalek, and A.M. Oles, *J. Phys. C* **10**, L271 (1977).

Hierarchy of low-energy models of the electronic structure of cuprate HTSCs: the role of long-range spin-correlated hoppings

V.V. Val'kov, V.A. Mitskan, D.M. Dzebisashvili, and A.F. Barabanov

It is shown that for the three-band Emery $p-d$ -model that reflects the real structure of the CuO_2 -plane of high-temperature superconductors, in the regime of strong electron correlations it is possible to carry out a sequence of reductions to the effective models reproducing low-energy features of elementary excitations spectrum and revealing the spin-polaron nature of the Fermi quasiparticles. The first reduction leads to the spin-fermion model in which the subsystem of spin moments, coupled by exchange interaction and localized on copper ions, strongly interacts with oxygen holes. The second reduction is connected with the transformation from the spin-fermion model to the $\phi-d$ -exchange model. An important feature of this transformation is the large energy of the $\phi-d$ -exchange coupling, which leads to the formation of spin polarons. The use of this fact allows us to carry out the third reduction, as a result of which a $\tilde{t} - \tilde{J}^* - I$ -model arises. Its distinctive feature is related to the much greater importance of spin-correlated hoppings as compared to the role of such processes in the commonly used $t - J^*$ -model derived from the Hubbard model. Based on the comparative analysis of the spectrum of Fermi excitations calculated for the obtained effective models of the CuO_2 -plane of high-temperature superconductors, the important role of the usually discarded long-range spin-correlated hoppings is determined.

PACS: 74.20.-z Theories and models of superconducting state;
74.72.-h Cuprate superconductors.

Keywords: high-temperature superconductors, spin polaron, low-energy model of the electronic structure of cuprates.