

# ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИОННО-ЗАВИСИМЫХ СПИН-ЗАРЯДОВЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ НА ЭВОЛЮЦИЮ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ ДВУМЕРНОЙ МОДЕЛИ ЭМЕРИ

*В. В. Вальков<sup>a\*</sup>, Д. М. Дзедзисавили<sup>a,b\*\*</sup>, А. Ф. Барабанов<sup>c</sup>*

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

*<sup>b</sup> Сибирский государственный аэрокосмический университет  
660014, Красноярск, Россия*

*<sup>c</sup> Институт физики высоких давлений Российской академии наук  
142190, Троицк, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 12 января 2014 г.

В рамках двумерной модели Эмери показано, что сильная связь между спиновой подсистемой ионов меди, находящейся в синглетном состоянии, и подсистемой кислородных дырок приводит к существенному уменьшению спектральной интенсивности корреляционной функции дырок на контуре Ферми. Спин-зарядовые корреляции проявляются через два канала. Первый из них обусловлен  $p$ - $d$ -обменной связью спинов кислородной и медной дырок. Второй канал возникает в результате спин-коррелированных перескоков, когда движение дырок по ионам кислорода сопровождается спин-флип-процессами, т. е. одновременными изменениями проекций спинов у кислородной дырки и у иона меди. В результате самосогласованных вычислений установлено, что учет концентрационной зависимости спиновых и многоцентровых спин-зарядовых корреляторов, входящих в дисперсионное уравнение, обеспечивает понижение энергии системы и существенно влияет на характер эволюции ферми-поверхности при дырочном допировании.

DOI: 10.7868/S0044451014060135

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Считается, что формирование энергетического спектра фермиевских возбуждений нормальной фазы высокотемпературных сверхпроводников происходит при взаимном влиянии спиновых и зарядовых степеней свободы [1–9]. Его происхождение в эффективной модели Эмери [10–12] с двумя ионами кислорода на одну элементарную ячейку связано с большой величиной обменной связи между спинами кислородных и медных дырок [13]. Важная особенность этого взаимодействия определяется тем, что оно приводит к спин-коррелированным перескокам [2, 3, 14], т. е. к перескокам, сопровождающимся спин-флип-процессами. В результате большую

роль начинает играть перенос заряда с одновременным изменением проекции спинового момента у кислородной дырки. При этом из закона сохранения суммарной проекции спинового момента всей системы инициируется изменение проекции спина у дырки на ионе меди.

Известно, что спин-поляронная концепция позволяет получить корректное описание ближних спин-фермионных корреляций при построении теории энергетической структуры двумерной модели Эмери [2, 3]. При таком подходе сильные спин-зарядовые флуктуации учитываются посредством расширения базисного набора операторов, в который включаются мультипликативные операторы, определяемые как произведение спиновых и фермиевских операторов, относящихся к соседним узлам. Тогда составление уравнений движения для введенного набора базисных операторов с последующим применением проекционного метода

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

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

Цванцига–Мори [4–6, 15, 16] позволяет самосогласованным образом строго учесть ближние спин-фермионные корреляции, поскольку для базисных мультипликативных операторов не используется процедура расщепления. В результате спектр фермиевских возбуждений приобретает зависимость от спин-фермионных корреляций, которая будет существенно сказываться на концентрационной эволюции ферми-контура.

Экспериментальные исследования фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES) свидетельствуют о неприменимости модели жесткой зоны для описания наблюдаемой трансформации поверхности Ферми (ПФ) при увеличении концентрации дырок в системе [17–21]. В частности, установлено значительное отличие спектра фермиевских возбуждений в оптимально допированных купратах от спектра в купратах-изоляторах. В недопированных соединениях реализуется изотропное дно зоны в окрестности точки  $N = (\pi/2, \pi/2)$  импульсного пространства [17, 22–25], тогда как в оптимально допированных купратах возникают большая ПФ с центром в точке  $M = (\pi, \pi)$  и область плоской зоны, которая имеет форму протяженной седловой точки в направлении  $(0, \pi/2) - (0, \pi)$  [18, 26–31]. При малом и промежуточном допировании область плоской зоны наблюдается и в направлении  $(0, \pi) - (\pi/2, \pi)$ . При промежуточном допировании наблюдается высокоэнергетическая псевдощель вблизи точек  $X = \{(\pi, 0), (0, \pi)\}$  с энергией порядка 0.1 эВ [23, 32–34].

В данной работе показывается, что наблюдаемые экспериментально [17, 22–25] особенности эволюции ПФ простым образом объясняются в рамках спин-поляронной природы фермиевских квазичастиц [2]. Механизм возникновения таких квазичастиц в купратных сверхпроводниках продемонстрирован в рамках эффективного гамильтониана для трехзонной модели [10–12], учитывающей прямые кислород-кислородные перескоки в  $\text{CuO}_2$ -плоскости, а также антиферромагнитное (АФМ) обменное взаимодействие между ближайшими ( $I_g$ ) и следующими за ближайшими ( $I_d$ ) соседями. Существенно, что при построении спектра дырочных возбуждений и при определении ПФ учитывается реальная структура  $\text{CuO}_2$ -плоскости, а также наличие сильной связи между спинами ионов меди и кислородных дырок.

Для описания магнитной подсистемы  $\text{CuO}_2$ -плоскости в  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  будут использованы результаты, полученные для двумерной АФМ-фруст-

рированной модели Гейзенберга с  $S = 1/2$ . Известно, что АФМ-взаимодействие между ближайшими спинами ионов  $\text{Cu}^{2+}$  в  $\text{CuO}_2$ -плоскости велико (порядка 0.13 эВ  $\approx 1500$  К для  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  [35]) и значительно больше межплоскостного обмена. Межплоскостной обмен в основном ответствен за дальний порядок, который наблюдается в диэлектрической фазе  $\text{CuO}_2$ -плоскостей (для  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  характерная температура Нееля  $T_N \sim 300$  К). Однако уже при сравнительно слабом допировании системы дырками дальний АФМ-порядок исчезает во всем диапазоне температур. Такое поведение достаточно хорошо моделируется посредством введения фрустрации [36]. Кластерные расчеты указывают на наличие достаточно большого параметра фрустрации  $I_d/I_g \sim 0.1$  даже для недопированного LSCO [37]. Количественное рассмотрение спиновой подсистемы проводится в рамках сферически-симметричной самосогласованной теории [38–40].

Будет показано, что в отличие от модели с большим числом подгоночных параметров в нашем случае трансформация контура Ферми происходит по двум причинам. Первая причина обусловлена сильной корреляцией между подсистемой локализованных спинов ионов меди, находящейся в состоянии квантовой спиновой жидкости, и подсистемой кислородных дырок. Вторая причина связана с изменением корреляционных характеристик квантовой спиновой жидкости, возникающих при возрастании уровня допирования.

Статья структурирована следующим образом. В разд. 2 представлен эффективный гамильтониан модели Эмери для режима большого, но конечного кулоновского отталкивания двух дырок на одном ионе меди. Этот гамильтониан действует в подпространстве гомеополярных состояний ионов меди и описывает сильную связь локализованных спиновых моментов и допированных дырок. В разд. 3 обсуждается методика расчета спектральных и термодинамических свойств рассматриваемой системы. Раздел 4 посвящен описанию операторного базиса, позволяющего строго учесть ближние спин-зарядовые флуктуации и найти спектр возбуждений спин-поляронных квазичастиц. В этом же разделе приведены уравнения движения для базисных операторов и проведен анализ многоцентровых спин-зарядовых корреляторов, играющих в нашей теории ключевую роль в механизме формирования концентрационной зависимости спектра квазичастичных возбуждений спин-поляронного ансамбля. В разд. 5 приводятся результаты самосогласованных численных расчетов концентрационной зави-

симости спин-зарядовых корреляционных функций и обсуждается влияние этих корреляторов на эволюции энергетического спектра фермиевских квазичастиц купратных сверхпроводников. В заключительном разделе сформулированы основные выводы, вытекающие из представленных результатов проведенных исследований.

## 2. ЭФФЕКТИВНЫЙ ГАМИЛЬТониАН МОДЕЛИ

В режиме сильных электронных корреляций трехзонная  $p$ - $d$ -модель [10–12], как известно, может быть представлена эффективным гамильтонианом [3, 13]

$$\hat{H} = N(\varepsilon_d - 4\tau) + \varepsilon_p \sum_l c_l^\dagger c_l - t \sum_{l\rho} c_l^\dagger c_{l+\rho} + \sum_{f\delta\delta'} c_{f+\delta}^\dagger \left[ \frac{\tau_-}{2} + \tilde{S}_f \tau_+ \right] c_{f+\delta'} + \hat{H}_{exch}, \quad (1)$$

где

$$\tau_{\pm} = \tau(1 \pm \eta), \quad \tau = \frac{(t_{pd})^2}{\Delta_{pd}},$$

$$\eta = \frac{\Delta_{pd}}{U_d - \Delta_{pd}}, \quad \tilde{S}_f = \mathbf{S}_f \cdot \boldsymbol{\sigma}.$$

Первое слагаемое этого гамильтониана обозначает энергию гомеоплярных состояний ионов меди  $\varepsilon_d$ , уменьшенную на величину  $4\tau$  за счет эффектов ковалентности с четырьмя ближайшими ионами кислорода. Степень перемешивания кислородных  $p$ - и медных  $d$ -орбиталей определяется параметром гибридизации  $t_{pd}$  и величиной диэлектрической щели с переносом заряда  $\Delta_{pd} = \varepsilon_p - \varepsilon_d$ , равной разности энергии дырки на ионе кислорода  $\varepsilon_p$  и меди  $\varepsilon_d$ ;  $N$  — число узлов меди в  $\text{CuO}_2$ -плоскости, равное числу элементарных ячеек.

Второе слагаемое в формуле (1) описывает энергию связи допированной дырки с ионом кислорода. Операторы  $c_l^\dagger = (c_{l\uparrow}^\dagger, c_{l\downarrow}^\dagger)$  в спинорном представлении соответствуют операторам рождения дырок с проекцией спиновых моментов  $\sigma = \pm 1/2$  на ионе кислорода в узле  $l$ .

Третье слагаемое  $\hat{H}$  отвечает прямым перескокам дырок между ближайшими ионами кислорода, связанными векторами  $\rho$ . Интенсивность перескоков определяется интегралом туннелирования  $t > 0$ . В дальнейшем считается, что параметр гибридизации  $t_{pd}$  превышает интеграл туннелирования:  $t_{pd} > t$ .

Происхождение четвертого слагаемого эффективного гамильтониана (1) обусловлено учетом процессов второго порядка по параметру гибридизации

$t_{pd}$ . Возникающий при этом оператор описывает перескоки дырки между ионами кислорода, непосредственно примыкающими к иону меди. Оператор  $\tilde{S}_f$  определен в виде скалярного произведения векторного оператора спинового момента  $\mathbf{S}_f$  на ионе меди в узле  $f$  и вектора  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z)$ , составленного из матриц Паули. Главная особенность этого оператора заключается в том, что он содержит вклады, соответствующие перескокам дырок, сопровождающиеся спин-флип-процессами. При таких перескоках происходит коррелированное изменение проекции спина не только у дырки, но и у иона меди. Как будет видно из дальнейшего, учет таких вкладов существенно сказывается на формировании структуры спин-поляронного спектра элементарных возбуждений и его зависимости от уровня допирования. Векторы  $\delta$  и  $\delta'$  независимо принимают четыре значения  $\{\pm a_x, \pm a_y\} = \frac{1}{2}\{\pm g_x, \pm g_y\}$ , где  $\{\pm g_x, \pm g_y\}$  — векторы ближайших соседей решетки меди.

Последнее слагаемое в (1) отвечает суперобменному взаимодействию между спиновыми моментами ионов меди. В дальнейшем мы ограничимся учетом взаимодействий спинов, находящихся в пределах двух координационных сфер:

$$\hat{H}_{exch} = \frac{I_g}{2} \sum_{fg} \mathbf{S}_f \mathbf{S}_{f+g} + \frac{I_d}{2} \sum_{fd} \mathbf{S}_f \cdot \mathbf{S}_{f+d}. \quad (2)$$

В этом выражении  $I_g$  обозначает обменный интеграл для ближайших спинов, а  $I_d$  ( $d = \pm g_x \pm g_y$ ) — обменный интеграл между следующими за ближайшими спинами. Обменные константы удобно выразить через параметр фрустрации  $p$  и эффективный обмен  $I$ :

$$I_g = (1 - p)I, \quad I_d = pI, \quad 0 \leq p \leq 1, \quad I > 0. \quad (3)$$

Величина  $p$  может быть связана с концентрацией дырок на один атом меди  $x$  [41]. Ниже такое соответствие будет использоваться для описания модификации спиновой подсистемы при допировании.

При выводе эффективного гамильтониана из трехзонной модели Эмери предполагалось, что энергия кулоновского взаимодействия двух дырок на одном ионе меди  $U_d$  является самым большим энергетическим параметром системы:  $U_d > \Delta_{pd} \gg t_{pd}$ . Влиянием кулоновского взаимодействия двух дырок, находящихся на одном ионе кислорода, а также взаимодействием кислородных и медных дырок пренебрегалось.

Будем считать, что подсистема локализованных спиновых моментов ионов меди находится в состоянии квантовой спиновой жидкости. В этом случае в спиновом пространстве сохраняется сферическая

симметрия. Это означает, что спиновые корреляционные функции  $C_r = \langle \mathbf{S}_f \cdot \mathbf{S}_{f+r} \rangle$  удовлетворяют соотношениям

$$C_r = 3 \langle S_f^{x(y,z)} S_{f+r}^{x(y,z)} \rangle. \quad (4)$$

Кроме того ( $\alpha, \beta = \uparrow, \downarrow$ ):

$$\begin{aligned} \langle S_f^{x(y,z)} \rangle &= 0, & \langle \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{S}_f \rangle &= 0, \\ \langle \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} \cdot [\mathbf{S}_f \times \mathbf{S}_m] \rangle &= 0. \end{aligned} \quad (5)$$

Заметим, что интегралы перескоков в третьем и четвертом слагаемых гамильтониана (1) в действительности могут отличаться знаком для разных направлений перескоков. Легко видеть, что эти знаки точно учитываются введением факторов  $\exp\{iQ(l-l')\}$ , где  $Q = (\pi, \pi)$ . После унитарного преобразования  $e^{iQl} c_l \rightarrow c_l$  эти факторы исчезают, а для восстановления спектра достаточно в конце вычислений провести сдвигку в  $k$ -пространстве:  $k \rightarrow k + Q$ .

Ниже применяются следующие значения параметров модели  $t_{pd} = 1.3$  эВ,  $\Delta_{pd} = 3.6$  эВ,  $U_d = 10.5$  эВ,  $t = 0.5$  эВ,  $I = 0.16$  эВ, которые соответствуют общепринятым [14, 42, 43]. При этом  $\tau = 0.47$  эВ, а  $\eta = 0.52$ .

### 3. ПРОЕКЦИОННЫЙ МЕТОД ЦВАНЦИГА – МОРИ

Проблема описания сильных спин-зарядовых флуктуаций может быть решена в два этапа. Первый этап связан с таким выводом замкнутых уравнений для семейства двухвременных функций Грина, при котором интересующие нас спин-зарядовые флуктуации будут отражаться без использования каких-либо методов линеаризации. На втором этапе реализуется численное решение системы уравнений для функций Грина при одновременном нахождении самосогласованных средних.

Замкнутая система уравнений для двухвременных функций Грина может быть получена в рамках метода неприводимых функций Грина и техники проецирования Цванцига – Мори [4–6, 15, 16]. Рассмотрим запаздывающие двухвременные функции Грина:

$$\begin{aligned} G_{ij}(k, t) &= \langle \langle A_{ik}(t) | A_{jk}^\dagger(0) \rangle \rangle = \\ &= -i\theta(t) \langle [A_{ik}(t), A_{jk}^\dagger(0)] \rangle, \end{aligned} \quad (6)$$

где  $A_{jk} = N^{-1/2} \sum_f e^{-ikf} A_{jf}$  — базисный набор операторов в импульсном представлении, а  $A_{jf}$  ( $j = 1, \dots, n$ ) — базисные операторы в представлении

Ванье. Вид этих операторов, а также их количество  $n$  при фиксированном значении квазиимпульса  $k$  определяются спецификой задачи.

Запишем систему из  $n \times n$  уравнений движения для введенных гриновских функций:

$$\omega \langle \langle A_{ik} | A_{jk}^\dagger \rangle \rangle_\omega = K_{ij} + \langle \langle [A_{ik}, \hat{H}] | A_{jk}^\dagger \rangle \rangle_\omega, \quad (7)$$

где величина  $K_{ij}$  равна среднему от антикоммутиатора базисных операторов  $A_{ik}$  и  $A_{jk}^\dagger$ :

$$K_{ij} = \langle \{A_{ik}, A_{jk}^\dagger\} \rangle. \quad (8)$$

Согласно проекционному методу функции Грина, возникающие в результате коммутирования  $[A_{ik}, \hat{H}]$ , записываются в виде линейной суперпозиции базисных функций Грина (6):

$$\langle \langle [A_{ik}, \hat{H}] | A_{jk}^\dagger \rangle \rangle_\omega = \sum_l L_{il}(k) \langle \langle A_{lk} | A_{jk}^\dagger \rangle \rangle_\omega, \quad (9)$$

где

$$L(k) = D(k)K^{-1}, \quad D_{ij}(k) = \langle \{[A_{ik}, \hat{H}], A_{jk}^\dagger\} \rangle. \quad (10)$$

Полученная система уравнений для функций Грина  $\langle \langle A_{ik} | A_{jk}^\dagger \rangle \rangle_\omega$  является замкнутой и для краткости запиши ее можно представить в матричной форме:

$$(\omega \hat{I} - D(k)K^{-1}) G(k, \omega) = K, \quad (11)$$

где  $\hat{I}$  — единичная матрица. При этом энергетический спектр квазичастиц  $E_{jk}$  определяется полюсами функции Грина  $G(k, \omega)$  и может быть получен из дисперсионного уравнения

$$\det \left| \omega \hat{I} - D(k)K^{-1} \right| = 0. \quad (12)$$

### 4. СПИН-ПОЛЯРОННЫЙ БАЗИС

Конкретный вид элементов матрицы  $K_{ij}$  и энергетической матрицы  $D_{ij}(k)$  зависит от выбора базисных операторов  $\{A_{jk}\}$ . При рассмотрении эффективного гамильтониана модели Эмери (1) минимальный набор базисных операторов, учитывающий сильную взаимосвязь между подсистемой локализованных спинов ионов меди и спинами кислородных дырок, состоит из трех операторов [3]:

$$\begin{aligned} A_{f1} &= c_{f+a_x}, & A_{f2} &= c_{f+a_y}, \\ A_{f3} &= \frac{1}{2} \tilde{S}_f \sum_\delta c_{f+\delta}, & \delta &= \pm a_x, \pm a_y. \end{aligned} \quad (13)$$

Оператор  $A_{f1}$  ( $A_{f2}$ ) уничтожает дырку в ячейке  $f$  на ионе кислорода в узле  $f + a_x$  ( $f + a_y$ ), находящуюся на  $p_x$  ( $p_y$ )-орбитали. Третий оператор  $A_{f3}$  вводится для строгого учета спин-фермионных корреляций и записывается в виде произведения спинового оператора, соответствующего ячейке с номером  $f$ ,

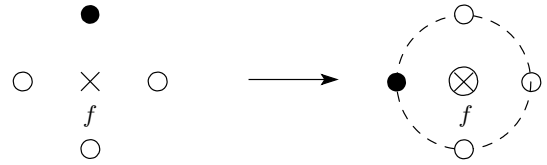
на оператор, записанный в виде линейной суперпозиции четырех ферми-операторов кислородных дырок, относящихся к четырем узлам, являющимся ближайшими к иону меди с номером  $f$ . Заметим, что спинорная форма записи этого оператора отражает  $SU(2)$ -инвариантность гамильтониана системы и спин-жидкостного состояния спиновых подсистем ионов меди и кислородных дырок. Существенно, что используемая форма записи оператора  $A_{fz}$  включает слагаемые, соответствующие отмеченным выше спин-флип-процессам. При этом все операторы действуют в гильбертовом пространстве состояний эффективного гамильтониана (1), включающем только гомеополарные состояния ионов меди.

Точные уравнения движения для базисных операторов (13) имеют вид

$$i \frac{dA_{1f\sigma}}{dt} = [A_{1f\sigma}, \hat{H}] = \varepsilon_p A_{1f\sigma} + \left( \frac{\tau_-}{2} - t \right) \times \\ \times (A_{2f\sigma} + A_{2,f-g_y,\sigma} + A_{2,f+g_x,\sigma} + A_{2,f+g_x-g_y,\sigma}) + \\ + \frac{\tau_-}{2} (2A_{1f\sigma} + A_{1,f-g_x,\sigma} + A_{1,f+g_x,\sigma}) + \\ + 2\tau_+ (A_{3f\sigma} + A_{3,f+g_x,\sigma}), \quad (14)$$

$$i \frac{dA_{2f\sigma}}{dt} = [A_{2f\sigma}, \hat{H}] = \varepsilon_p A_{2f\sigma} + \left( \frac{\tau_-}{2} - t \right) \times \\ \times (A_{1f\sigma} + A_{1,f-g_x,\sigma} + A_{1,f+g_y,\sigma} + A_{1,f+g_y-g_x,\sigma}) + \\ + \frac{\tau_-}{2} (2A_{2f\sigma} + A_{2,f-g_y,\sigma} + A_{2,f+g_y,\sigma}) + \\ + 2\tau_+ (A_{3f\sigma} + A_{3,f+g_y,\sigma}), \quad (15)$$

$$i \frac{dA_{3f\sigma}}{dt} = [A_{3f\sigma}, \hat{H}] = \frac{3}{2}\tau_+ \sum_{\delta} c_{f+\delta,\sigma} + \\ + \left( \varepsilon_p - 2t + \frac{5}{2}\tau_- - 4\tau_+ \right) A_{3f\sigma} + \\ + \left( \frac{\tau_-}{2} - t \right) \frac{1}{2} \sum_{\Delta} \left( \tilde{S}_f c_{f+\Delta} \right)_{\sigma} + \frac{\tau_-}{4} \sum_{\delta} \left( \tilde{S}_f c_{f+3\delta} \right)_{\sigma} + \\ + \frac{\tau_+}{2} \left[ \sum_{\delta\delta'} (\mathbf{S}_f \cdot \mathbf{S}_{f+2\delta'}) c_{f+2\delta'+\delta,\sigma} + \right. \\ \left. + i \sum_{\delta\delta'\alpha} \sigma_{\sigma\alpha} \cdot [\mathbf{S}_f \times \mathbf{S}_{f+2\delta'}] c_{f+2\delta'+\delta,\alpha} + \right. \\ \left. + i \sum_{\substack{\delta\delta_1\delta' \\ \alpha\beta\gamma}} [\sigma_{\sigma\gamma} \times \sigma_{\alpha\beta}] \cdot \mathbf{S}_f c_{f+\delta,\alpha}^{\dagger} c_{f+\delta_1,\beta} c_{f+\delta',\gamma} \right] + \\ + \frac{i}{2} \sum_{\delta n\alpha} I_{fn} \sigma_{\sigma\alpha} \cdot [\mathbf{S}_n \times \mathbf{S}_f] c_{f+\delta,\alpha}, \quad (16)$$



**Рис. 1.** Схема процесса перехода дырки с иона кислорода, находящегося в узле  $f+r$ , в когерентное состояние, определяемое оператором  $A_{3f}^{\dagger}$ . Амплитуда этого процесса определяет значение коррелятора  $M_1$ . В левой части рисунка темный кружок обозначает ион кислорода, на котором находится дырка, а светлые кружки — кислородные ионы без дырки. В правой части рисунка штриховая линия, соединяющая четыре кислородных узла, используется для обозначения того, что дырка с равной вероятностью может находиться на любом из четырех ионов кислорода. Суперпозиция этих состояний обладает свойством когерентности как по фазовым множителям, так и по спиновым конфигурациям медь-кислородных орбиталей. Ион меди, принимающий участие в коррелированной спиновой динамике, обозначен крестиком в кружке

где  $\Delta$  — вектор, пробегаяющий восемь значений:  $\{\pm g_x \pm a_y, \pm g_y \pm a_x\}$ . Этот вектор соединяет ион меди и следующие за ближайшими ионы кислорода. Вектор  $\delta$  ( $\delta'$ ), как и раньше, принимает четыре значения:  $\{\pm a_x, \pm a_y\}$ . Заметим, что правая часть третьего уравнения движения (16), в отличие от первых двух уравнений (14) и (15), не может быть выражена только через базисные операторы (13). В правой части (16) возникли новые более сложные по структуре операторы.

При проецировании правых частей уравнений (14)–(16) на базис (13) воспользуемся тем обстоятельством, что спиновая подсистема находится в состоянии квантовой спиновой жидкости. Это позволяет при вычислении элементов матриц  $D(k)$  и  $K(k)$  использовать упрощения, связанные с обращением в нуль средних (5). Опуская промежуточные выкладки, приведем окончательные выражения ( $D_{ij}(k) = D_{ji}^*(k)$ ,  $K_{ij}(k) = K_{ji}^*(k)$ ):

$$D_{11}(k) = \varepsilon_p + \tau_- (1 + \cos k_x),$$

$$D_{22}(k) = \varepsilon_p + \tau_- (1 + \cos k_y),$$

$$D_{31}(k) = 2\tau_+ (1 + e^{-ik_x}) K_{33},$$

$$D_{32}(k) = 2\tau_+ (1 + e^{-ik_y}) K_{33},$$

$$D_{12}(k) = \left( \frac{\tau_-}{2} - t \right) (1 + e^{ik_x}) (1 + e^{-ik_y}),$$

$$\begin{aligned}
 D_{33}(k) = & \left( \varepsilon_p - 2t + \frac{5}{2}\tau_- - 4\tau_+ \right) K_{33} + \\
 & + \left( \frac{\tau_-}{2} - t \right) [2C_1\gamma_1(k) + 2C_2\gamma_2(k) - M_2] + \\
 & + \frac{\tau_-}{2} [C_1\gamma_1(k) + C_3\gamma_3(k) - M_3] + \\
 & + \tau_+ \left[ 4M_1 + C_1(1 - 4\gamma_1(k)) + \right. \\
 & \left. + \frac{3}{2}(x + 8\mathcal{K}_1 + 4\mathcal{K}_2) - L_1 + 2Q_1\gamma_1(k) \right] + \\
 & + I_g [C_1(\gamma_1(k) - 4) - L_1\gamma_1(k) + Q_1] + \\
 & + I_d [-4C_2 - L_2\gamma_2(k) + Q_2]; \quad (17)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 K_{11} = K_{22} = 1, \quad K_{12} = K_{13} = K_{23} = 0, \\
 K_{33} = \frac{3}{4} + C_1\gamma_1(k) - M_1. \quad (18)
 \end{aligned}$$

Видно, что матричные элементы выражаются не только через спиновые (4) и кинематические корреляторы  $\mathcal{K}_{l-l'}$ , но и через спин-зарядовые корреляционные функции:

$$\begin{aligned}
 M_1 &= \frac{1}{2} \sum_{\delta} \langle A_{3f}^{\dagger} c_{f+\delta} \rangle, \\
 M_2 &= \frac{1}{2} \sum_{\Delta} \langle A_{3f}^{\dagger} c_{f+\Delta} \rangle, \quad (19) \\
 M_3 &= \frac{1}{2} \sum_{\delta} \langle A_{3f}^{\dagger} c_{f+3\delta} \rangle,
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 L_1 &= 2 \sum_g \langle A_{3,f+g,\sigma}^{\dagger} A_{3f\sigma} \rangle, \\
 L_2 &= 2 \sum_d \langle A_{3,f+d,\sigma}^{\dagger} A_{3f\sigma} \rangle, \quad (20)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 Q_1 &= \sum_{\delta g} \left\langle \left( c_{f+\delta}^{\dagger} \tilde{S}_{f+g} \right)_{\sigma} A_{3f\sigma} \right\rangle, \\
 Q_2 &= \sum_{\delta d} \left\langle \left( c_{f+\delta}^{\dagger} \tilde{S}_{f+d} \right)_{\sigma} A_{3f\sigma} \right\rangle, \quad (21)
 \end{aligned}$$

в которых вектор  $g$  пробегает четыре значения  $\pm g_{x(y)}$  из первой координационной сферы подрешетки ионов меди, а вектор  $d$  — четыре значения  $\pm g_x \pm g_y$  из второй координационной сферы этой же подрешетки. В дальнейшем из всей совокупности кинематических корреляторов

$$\mathcal{K}_{l-l'} = \langle c_{l\sigma}^{\dagger} c_{l'\sigma} \rangle \quad (22)$$

нам понадобятся только два:  $\mathcal{K}_{l-l'} = \mathcal{K}_1$ , если  $l$  и  $l'$  являются индексами ближайших ионов кислорода,

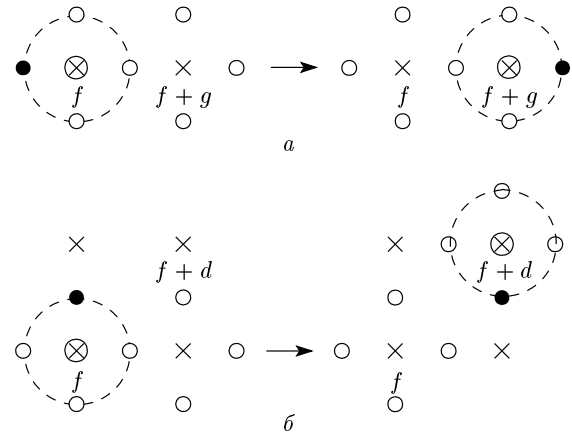


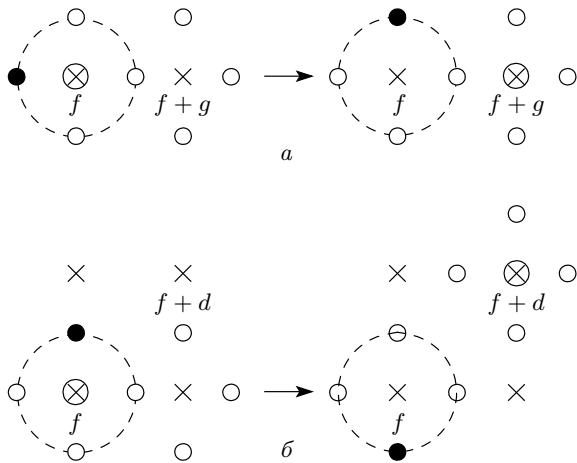
Рис. 2. Схемы процессов, определяющих корреляционные функции  $L_1$  и  $L_2$ . До перехода когерентная суперпозиция однодырочных состояний относилась к узлу  $f$ , а после перехода — к узлу  $f + g$  (панель  $a$ ), либо к узлу  $f + d$  (панель  $b$ ). Остальные обозначения такие же, как и на рис. 1

и  $\mathcal{K}_{l-l'} = \mathcal{K}_2$ , если  $l$  и  $l'$  — индексы следующих за ближайшими узлами кислородной решетки.

Поскольку спин-зарядовые корреляторы (19)–(21) будут иметь важное значение при вычислении концентрационной эволюции спектра спин-поляронных квазичастиц, на рис. 1–3 проиллюстрирован физический смысл этих корреляторов.

Спин-зарядовые корреляторы  $M_j$  ( $j = 1, 2, 3$ ) в формуле (19) описывают усредненную амплитуду вероятности процесса перехода дырки из  $p$ -состояния на ионе кислорода с номером  $f + r$  в когерентное состояние, описываемое суперпозицией  $p$ -состояний дырки на четырех ионах кислорода, являющихся ближайшими к узлу  $f$  и которые скоррелированы с ионом меди по спиновым переменным. Коррелятор  $M_1$  (см. рис. 1) соответствует случаю  $r = \delta$ . Коррелятор  $M_2$  ( $M_3$ ) имеет тот же самый физический смысл, что и коррелятор  $M_1$ , с той лишь разницей, что переход дырки в отмеченное когерентное состояние происходит из узла, находящегося во второй  $r = \Delta$  (третьей  $r = 2\delta$ ) координационной сфере.

Корреляционная функция  $L_1$  ( $L_2$ ), в отличие от  $M_1$  ( $M_2$ ), описывает амплитуду вероятности перехода дырки не из фиксированного иона кислорода, а из описанной выше когерентной суперпозиции, относящейся к узлу  $f$ , в когерентную суперпозицию состояний, отнесенную к ближайшему (следующему за ближайшим) узлу  $f + g$  ( $f + d$ ) иона меди. Схематическая интерпретация такого перехода показана на рис. 2  $a, b$ ).



**Рис. 3.** Схемы процессов, определяющих корреляционные функции  $Q_1$  и  $Q_2$ . В исходном состоянии спин-зарядовая когерентность формировалась относительно узла  $f$ . В конечном состоянии зарядовая когерентность относительно узла  $f$  осталась, тогда как спиновая когерентность формируется относительно узла  $f + g$  (для процесса, определяющего коррелятор  $Q_1$ ), либо относительно узла  $f + d$  (для процесса, определяющего коррелятор  $Q_2$ ). Остальные обозначения такие же, как и на предыдущих рисунках

Корреляторы  $Q_1$  и  $Q_2$  (21) отражают усредненные амплитуды процессов, при которых перенос заряда не происходит, но происходит смена спинового партнера, участвующего в формировании спин-когерентного состояния: для коррелятора  $Q_1$  спиновым партнером является ион меди на узле  $f + g$ , тогда как для коррелятора  $Q_2$  таковым партнером становится ион меди на узле  $f + d$ . Соответствующие процессы проиллюстрированы на рис. 3.

Все входящие в теорию спин-фермионные корреляторы вычисляются при помощи спектральной теоремы, применяемой к соответствующим функциям Грина. Для них система замкнутых уравнений записывается на основе приведенных выше уравнений движения. При этом для вычисления кинематических корреляторов (22) следует воспользоваться функциями Грина  $G_{11}(k, \omega)$  и  $G_{12}(k, \omega)$ . Для нахождения спин-зарядовых корреляторов  $M_j$  ( $j = 1, 2, 3$ ) используется функция Грина  $G_{13}(k, \omega)$ , а для корреляторов  $L_j$  ( $j = 1, 2$ ) — функция  $G_{33}(k, \omega)$ .

Для вычисления корреляторов  $Q_j$  ( $j = 1, 2$ ) недостаточно введенного набора базисных операторов (13). Однако, если ввести дополнительные операторы

$$A_{4f\sigma} = \frac{1}{2} \sum_{\delta} \left( \tilde{S}_{f+g\sigma} c_{f+\delta} \right)_{\sigma}, \tag{23}$$

$$A_{5f\sigma} = \frac{1}{2} \sum_{\delta} \left( \tilde{S}_{f+d\sigma} c_{f+\delta} \right)_{\sigma}$$

и вычислить функции Грина  $G_{34}(k, \omega) = \langle \langle A_{3k\sigma} | A_{4k\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle_{\omega}$ ,  $G_{35}(k, \omega) = \langle \langle A_{3k\sigma} | A_{5k\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle_{\omega}$ , то корреляторы  $Q_j$  ( $j = 1, 2$ ) легко находятся.

При записи уравнений движения для функций Грина  $G_{34}(k, \omega)$  и  $G_{35}(k, \omega)$  коммутатор  $[A_3, \hat{H}]$  по-прежнему будем проецировать на первоначальный базис (13). В этом случае нет необходимости в вычислении новых матричных элементов энергетической матрицы  $D(k)$ , а все, что требуется дополнительно для нахождения корреляторов  $Q_j$  ( $j = 1, 2$ ), это матричные элементы

$$\langle \{ A_{3k}, A_{4k}^{\dagger} \} \rangle = C_1 + \frac{1}{4} \gamma_1(k) \left[ \frac{3}{4} + 2C_2 + C_3 - M_1 - M_2 - M_3 \right], \tag{24}$$

$$\langle \{ A_{3k}, A_{5k}^{\dagger} \} \rangle = C_2 + \frac{1}{2} \gamma_1(k) [C_1 + C_4] - \frac{1}{4} \gamma_2(k) [M_2 + M_4]. \tag{25}$$

### 5. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЕТОВ КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ФУНКЦИЙ И ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА

Для самосогласованного расчета энергетической структуры спин-поляронных квазичастиц кроме спин-зарядовых и кинематических корреляторов необходима концентрационная зависимость парных спиновых корреляционных функций (4) для трех координационных сфер:  $C_1$  при  $r = g$ ;  $C_2$  при  $r = d$ ; и  $C_3$  для  $r = 2g$ . Эти корреляционные функции  $C_1$ ,  $C_2$  и  $C_3$ , а также щель  $\Delta_Q(p)$  в спектре магнитных возбуждений в окрестности точки  $Q = (\pi, \pi)$  зоны Бриллюэна могут быть вычислены в рамках сферически-симметричного самосогласованного подхода для фрустрированного антиферромагнетика (см. работу [44] и имеющиеся в ней ссылки). При этом  $\Delta_Q$  линейно связана с обратной магнитной корреляционной длиной  $\xi^{-1}$ . С другой стороны, согласно данным по нейтронному рассеянию и ядерному магнитному резонансу (см., например, [45, 46]),  $\xi^{-1}$  определяется допированием  $x$  и для LSCO возрастает в несколько раз с увеличением  $x$  в интервале 0.03–0.3. В соответствии с этим введенные

**Таблица.** Значения допирования  $x$  и соответствующие им значения параметра фрустрации  $p$  и спиновых корреляционных функций

$x$	$p$	$C_1$	$C_2$	$C_3$
0.03	0.15	-0.287	0.124	0.0950
0.07	0.21	-0.255	0.075	0.0640
0.15	0.25	-0.231	0.036	0.0510
0.22	0.275	-0.214	0.009	0.0450
0.30	0.30	-0.194	-0.0222	0.0457

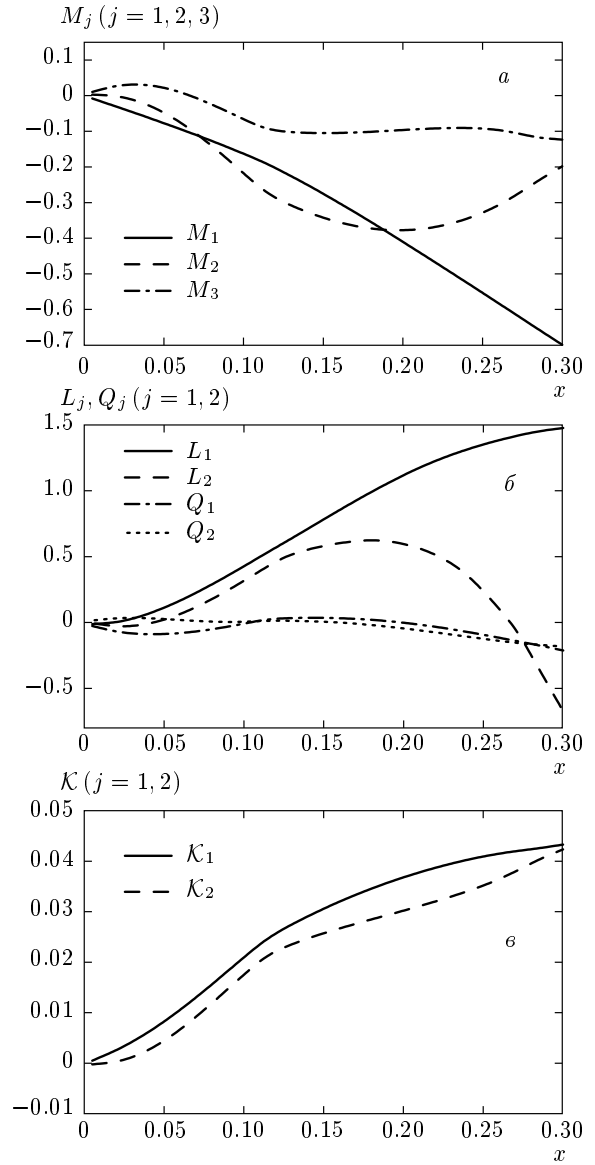
выше значения фрустраций (см. таблицу) отвечают случаю, когда спиновая щель увеличивается в 2.5 раза при увеличении от  $p = 0.15$  до  $p = 0.3$ .

В таблице представлены рассчитанные по такой методике спиновые корреляторы для пяти параметров фрустрации  $p$ . В дальнейшем будем считать, что эти значения соответствуют пяти значениям концентрации дырок  $x$ .

Самосогласованный расчет всех параметров задачи проводился следующим образом. Для заданного уровня допирования  $x$  по таблице определялись значения спиновых корреляторов  $C_j$  ( $j = 1, 2, 3$ ). После этого методом итераций вычислялись девять корреляционных функций:  $M_j$  ( $j = 1, 2, 3$ ),  $\mathcal{K}_j$ ,  $L_j$ ,  $Q_j$  ( $j = 1, 2$ ). При этом на каждом шаге итераций находился химический потенциал  $\mu$  из решения уравнения, определяющего полную концентрацию кислородных дырок.

Результаты самосогласованных численных расчетов корреляционных функций представлены на рис. 4. Видно, что в отсутствие допирования ( $x = 0$ ) все функции, приведенные на рис. 4, обращаются, как и должно быть, в нуль. При допировании значения этих функций нарастают по абсолютной величине. Это нарастание особенно сильно для корреляционных функций  $M_1$ ,  $M_2$  и  $L_1$ ,  $L_2$ . Такое поведение приводит к существенной модификации спектра возбуждения спин-поляронных состояний. Заметим, что в приближении одной кислородной дырки все эти корреляторы не учитываются.

Зависимость дисперсионной кривой спин-поляронных возбуждений от спин-зарядовых корреляционных функций определяется исключительно матричными элементами  $D_{33}(k)$  и  $K_{33}$ . Это легко увидеть, если записать в явном виде дисперсионное уравнение (12):



**Рис. 4.** Концентрационные зависимости корреляционных функций: а —  $M_j$  ( $j = 1, 2, 3$ ); б —  $L_j$  и  $Q_j$  ( $j = 1, 2$ ); в —  $\mathcal{K}_j$  ( $j = 1, 2$ )

$$\begin{aligned}
 &(\omega - \varepsilon_p)^3 - (\omega - \varepsilon_p)^2 \{2\tau_-(1 + \gamma_1(k)) + \Lambda(k)\} + \\
 &+ (\omega - \varepsilon_p) \{ [2\tau_- \Lambda(k) - 16\tau_+^2 K_{33}] (1 + \gamma_1(k)) + \\
 &+ 4t(\tau_- - t)\chi(k) \} + \\
 &+ 4t\chi(k) [8\tau_+^2 K_{33} - \Lambda(k)(\tau_- - t)] = 0, \quad (26)
 \end{aligned}$$

где для краткости записи были введены следующие функции:

$$\Lambda(k) = \frac{D_{33}(k)}{K_{33}} - \varepsilon_p, \quad \chi(k) = 1 + 2\gamma_1(k) + \gamma_2(k).$$

Здесь и далее используются стандартные обозначения для инвариантов квадратной решетки:



$$\begin{aligned} \gamma_1(k) &= \frac{1}{2}(\cos(k_x) + \cos(k_y)), \\ \gamma_2(k) &= \cos(k_x) \cos(k_y), \\ \gamma_3(k) &= \frac{1}{2}(\cos(2k_x) + \cos(2k_y)). \end{aligned}$$

В интересующей нас области дырочного допирования спектр спин-поляронных возбуждений  $E_{1k}$  будет определяться для каждого значения квазиимпульса решением кубического дисперсионного уравнения (26) с самым низким значением энергии.

При равенстве нулю интеграла прямых кислород-кислородных перескоков  $t$  выражение (26) существенно упрощается и принимает вид

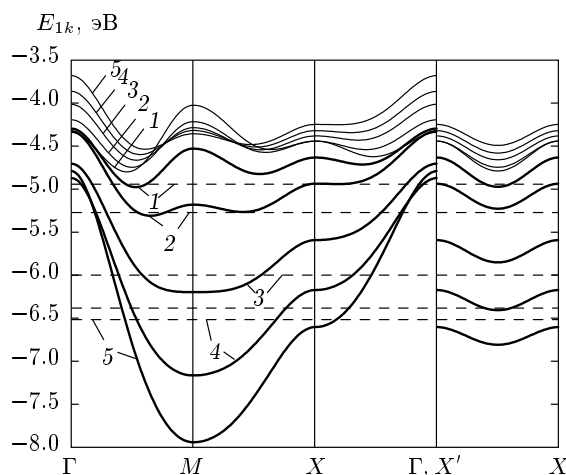
$$\begin{aligned} & \left[ (\omega - \varepsilon_p)^2 - (\omega - \varepsilon_p) \{ 2\tau_- (1 + \gamma_1(k)) + \Lambda(k) \} + \right. \\ & \left. + (2\tau_- \Lambda(k) - 16\tau_+^2 K_{33}) (1 + \gamma_1(k)) \right] (\omega - \varepsilon_p) = 0. \end{aligned} \quad (27)$$

Видно, что в этом случае происходит отщепление одного корня кубического уравнения, порождающего бездисперсный уровень  $\varepsilon_p$ . Он соответствует несвязанной кислородной орбитали. Отсюда следует, что примешивание этой орбитали к спин-поляронным состояниям обусловлено исключительно процессами  $p$ - $p$ -туннелирования.

На рис. 5 представлена модификация дисперсионной зависимости спин-поляронных возбуждений при изменении значений концентрации дырок  $x$ . Видно, что при малой степени допирования,  $x = 0.03, 0.07$  (жирные кривые 1 и 2 на рис. 5), поверхность Ферми образует дырочный карман в окрестности точки  $(\pi/2, \pi/2)$  зоны Бриллюэна. Как отмечалось в работе [47], физическая причина, обуславливающая минимум дисперсии в окрестности указанной точки, связана с антиферромагнитными флуктуациями, проявляющимися через спиновые корреляционные функции  $C_j$ .

При увеличении концентрации дырок  $x$  спин-зарядовые корреляторы быстро нарастают до таких значений, при которых роль магнитных корреляторов становится несущественной. При этом ширина зоны спиновых поляронов увеличивается, а минимум дисперсии смещается в точку  $M$   $(\pi, \pi)$  зоны Бриллюэна. Этот результат явно демонстрируется жирными кривыми 3–5 на рис. 5.

Отметим, что если спин-зарядовые корреляторы не учитывать, то минимум закона дисперсии при допировании лишь незначительно сместится в направлении точки  $M$  зоны Бриллюэна, но останется на значительном расстоянии от нее. Такое поведение представлено тонкими кривыми на рис. 5, которые описывают эволюцию зонной структуры

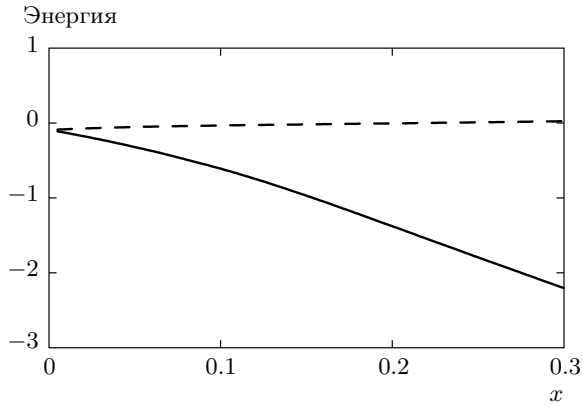


**Рис. 5.** Дисперсионные кривые нижней зоны спиновых поляронов. Жирные кривые рассчитаны при учете всех корреляционных функций для пяти значений степени легирования: кривая 1 —  $x = 0.03$ , 2 —  $x = 0.07$ , 3 —  $x = 0.15$ , 4 —  $x = 0.22$ , 5 —  $x = 0.3$ . Штриховыми линиями обозначены положения химического потенциала для соответствующей концентрации  $x$ . Тонкими линиями показаны дисперсионные кривые, рассчитанные для тех же пяти значений  $x$ , но при учете только спиновых корреляторов  $C_j$  — все спин-зарядовые корреляционные функции  $M_j, L_j, Q_j, K_j$  полагались равными нулю

спиновых поляронов с легированием в отсутствие спин-зарядовых корреляций: т. е. в случае, когда все корреляционные функции  $M_j, L_j, Q_j, K_j$  равны нулю.

Второй важный эффект, к которому приводит учет спин-зарядовых корреляторов, состоит в существенном понижении энергии поляронных состояний, что также хорошо отслеживается из сравнения жирных и тонких кривых на рис. 5. Если дисперсионные кривые, рассчитанные при учете спин-зарядовых корреляций (жирные линии на рис. 5), с увеличением степени допирования существенно смещаются вниз по энергии, то дисперсионные зависимости, рассчитанные без учета спин-зарядовых корреляторов (тонкие линии на рис. 5), движутся вверх.

Отмеченное поведение одночастичного спектра фермиевских возбуждений, безусловно, должно отражаться и на соответствующем поведении полной энергии системы  $E = \langle \hat{H} \rangle$ , выражение для которой можно записать в виде



**Рис. 6.** Концентрационные зависимости полной энергии: сплошная линия — при учете спин-зарядовых корреляторов  $M_j, L_j, Q_j, K_j$ , штриховая линия — без учета этих корреляторов

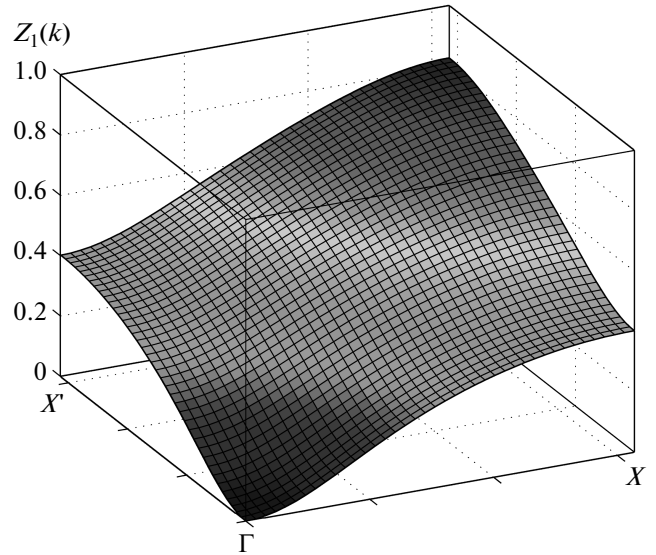
$$E = \varepsilon_d + 4\tau + x\varepsilon_p - 16tK_1 + 4\tau_-(x/4 + 2K_1 + K_2) + 4\tau_+M_1 + 2(I_1C_1 + I_2C_2). \quad (28)$$

Зависимость полной энергии системы  $E$  от степени допирования  $x$  представлена на рис. 6 жирной кривой. Для сравнения штриховой линией на этом же рисунке показана зависимость полной энергии, рассчитанная без учета спин-зарядовых корреляторов. Видно, что если корреляторы  $M_j, L_j, Q_j$  не учитывать, то энергия  $E$  возрастает при увеличении концентрации дырок  $x$ . При учете спин-зарядовых корреляций полная энергия системы понижается с увеличением  $x$ . Как следует из выражения (28) и графиков на рис. 4, уменьшение энергии  $E$  происходит, главным образом, из-за коррелятора  $M_1$ .

Важная особенность спин-поляронного подхода при описании спектральных свойств высокотемпературных сверхпроводников связана с существенным понижением спектральной плотности квазичастиц в нижней спин-поляронной зоне. Отметим, что именно эта особенность спектральной интенсивности обуславливает большую ПФ для оптимально допированных и передопированных купратных ВТ-СП, несмотря на то, что концентрация дырок в  $\text{CuO}_2$ -плоскости при этом относительно мала.

На рис. 7 представлена спектральная интенсивность  $Z_1(k)$  голых дырок, соответствующая нижней зоне спиновых поляронов. Ее поведение может быть определено из выражения для функции Грина  $G_h(k, \omega)$ :

$$G_h(k, \omega) = \sum_{j=1}^2 \langle \langle A_{jk} | A_{jk}^\dagger \rangle \rangle_\omega = \frac{Z_1(k)}{\omega - E_{1k}}. \quad (29)$$



**Рис. 7.** Спектральная плотность голых дырок, для нижней зоны спиновых поляронов, как функция квазиимпульса в первой четверти зоны Бриллюэна. Расчет выполнен при  $x = 0.03$

Обращение в нуль функции  $Z_1(k)$  в точке  $\Gamma$  зоны Бриллюэна соответствует, в частности, результату работы [48] полученному при исследовании спин-фермионной модели в однодырочном приближении. Максимальное значение спектральной интенсивности немногим более 0.8 достигается в точке  $M$  зоны Бриллюэна. Для обычных фермионов спектральная интенсивность  $Z_1(k)$  была бы равна четырем при любом значении квазиимпульса  $k$ .

Следует подчеркнуть, что существенное уменьшение спектральной интенсивности корреляционной функции спин-поляронных квазичастиц происходит по совершенно иной причине, нежели в модели Хаббарда. Как известно, перенормировка спектральной интенсивности для хаббардовских фермионов определяется фактором  $1 - n/2$  и практически не заметна при низкой плотности квазичастиц  $n$ . Это связано с тем, что в модели Хаббарда сильное взаимодействие реализуется между самими фермионами. Если их мало, то малы и ренормировки спектральной интенсивности корреляционной функции соответствующих квазичастиц.

Иная ситуация складывается для рассматриваемой в настоящей работе эффективной модели Эмери. Как уже отмечалось, дырки сильно взаимодействуют не друг с другом, а со спиновой подсистемой. Поскольку в интересующем нас режиме спиновый момент находится на каждом ионе ме-

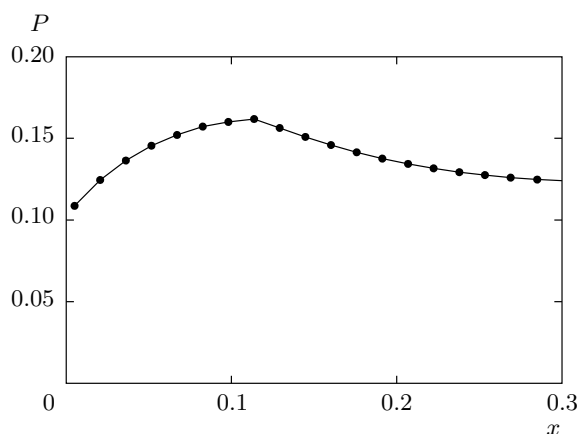


Рис. 8. Концентрационная зависимость параметра заполнения  $P(x)$

ди, при любой степени допирования формируются спин-поляронные состояния. Так как антисвязанные триплетные состояния спина иона меди и кислородной дырки являются высокоэнергетическими, они практически не заселены. Поэтому спектральный вес спин-поляронных квазичастиц определяется только синглетными связанными состояниями, число которых в три раза меньше, чем число триплетных состояний. Этим обусловлено падение спектральной интенсивности спин-поляронных квазичастиц.

Такое уменьшение спектральной интенсивности приводит к тому, что максимальная заселенность каждого из состояний в квазиимпульсном пространстве существенно уменьшена по сравнению со случаем свободных фермионов. Количественной характеристикой степени заполнения  $k$ -состояний может являться параметр  $P$ , определяемый как отношение числа дырок, находящихся внутри контура Ферми, к числу  $k$ -состояний зоны Бриллюэна, ограниченных контуром Ферми. При  $P = 1$  каждое из  $k$ -состояний зоны Бриллюэна было бы заполнено. В действительности же  $P < 1$  и чем меньше  $P$ , тем более «рыхлым» является заполнение  $k$ -состояний спин-поляронными квазичастицами. На рис. 8 показана зависимость параметра  $P$  от степени допирования  $x$ . Видно, что величина параметра заполнения  $P$  значительно меньше единицы и слабо изменяется в рассмотренном интервале допирования:  $0 < x < 0.3$ . Неаналитичность поведения  $P$  в окрестности  $x = x_c \sim 0.12$  связана с изменением топологической структуры контуров Ферми, имеющим место при  $x_c$ .

Важной характеристикой, определяющей низко-

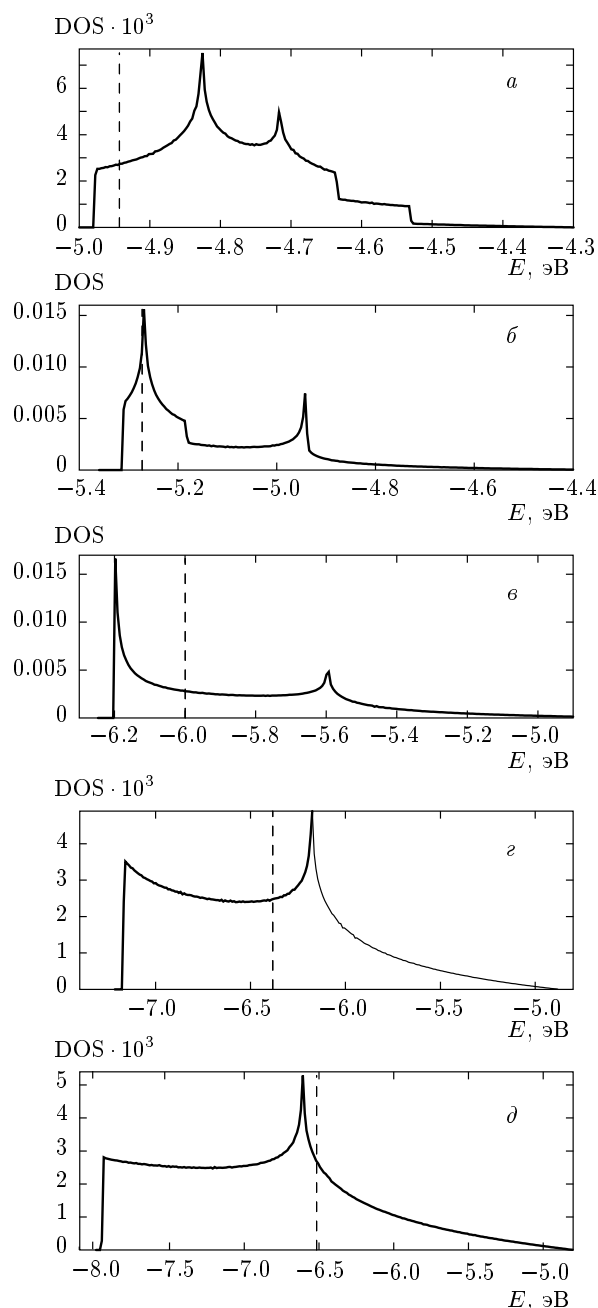


Рис. 9. Эволюция плотности состояний при увеличении концентрации дырок: а —  $x = 0.03$ , б —  $x = 0.07$ , в —  $x = 0.15$ , г —  $x = 0.22$ , д —  $x = 0.3$ . Вертикальной штриховой линией обозначено положение химического потенциала

температурную термодинамику ансамбля квазичастиц, является плотность состояний. На рис. 9 продемонстрировано изменение плотности состояний при допировании. Видно, что при низких значениях кон-

центрации дырок  $x$  имеется две особенности Ван Хо-ва, расположенных по энергии выше значения химического потенциала  $\mu$ . При увеличении  $x$  в пределах интересующего нас интервала  $[0.03, 0.3]$  химический потенциал последовательно проходит через обе указанные особенности. При этом нижняя сингулярность при больших значениях легирования исчезает и остается только одна особенность Ван Хо-ва. Представленная динамика относительного изменения химического потенциала и пиков плотности состояний имеет важное значение при описании сверхпроводящей фазы купратных ВТСП, поскольку известно, что в этих соединениях максимальная величина критической температуры достигается при таком уровне допирования, когда химический потенциал находится в окрестности особенностей Ван Хо-ва.

## 6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенное исследование структуры фермиевских квазичастиц и энергетического спектра эффективной двумерной модели Эмери позволяет сделать следующие выводы.

1. Сильные спин-фермионные корреляции между локализованными спинами ионов меди и дырками, находящимися на ближайших ионах кислорода, лежат в основе спин-поляронной природы фермиевских квазичастиц  $\text{CuO}_2$ -плоскости ВТСП. Дисперсионное уравнение, определяющее спектр фермиевских возбуждений таких квазичастиц, содержит в качестве коэффициентов функции, выражающиеся через многоцентровые спиновые и спин-фермионные корреляторы. Введенный набор фермионных и спин-фермионных операторов достаточен для самосогласованного описания спин-поляронной концепции и вычисления входящих в теорию многоцентровых спин-фермионных корреляторов.

2. В результате численного решения уравнений самосогласования установлено, что многоцентровые спин-зарядовые корреляторы обладают сильной концентрационной зависимостью. Это обуславливает изменение спектра спин-поляронных возбуждений при увеличении числа кислородных дырок. Продемонстрирована модификация энергетической структуры спин-поляронных квазичастиц при возрастании концентрации дырок  $x$  от низкого уровня допирования  $x = 0.03$ , когда поверхность Ферми образует небольшой дырочный карман в окрестности точки  $(\pi/2, \pi/2)$  зоны Бриллюэна, до высокого уровня —  $x = 0.3$ , при котором большая ферми-поверхность оказывается центрирована в точке

$(\pi, \pi)$  (см. рис. 5). Показана значительная модификация плотности фермиевских состояний при увеличении уровня допирования. Если при низких концентрациях дырок в системе в плотности состояний имеются две особенности Ван Хо-ва, то при более высоком уровне допирования остается только одна. Это говорит о неприменимости модели жесткой зоны для описания спектра фермиевских возбуждений купратных сверхпроводников.

3. Спин-зарядовые корреляции между локализованной спиновой и подвижной фермионной подсистемами эффективной двумерной модели Эмери обуславливают значительное понижение энергии спин-поляронных состояний при увеличении концентрации кислородных дырок  $x$ . В этой связи отметим, что в однодырочном приближении дисперсионные кривые при возрастании  $x$  смещаются в сторону больших энергий.

4. Значительное уменьшение спектрального веса корреляционной функции для фермиевских квазичастиц имеет простую спин-поляронную природу. При формировании спин-поляронных состояний из-за сильной обменной связи между спинами дырок ионов меди и кислорода происходит расщепление исходного энергетического терма на два. При этом три триплетных состояния обладают большей энергией, тогда как одно синглетное состояние с меньшей энергией служит основой для формирования коллективных спин-поляронных квазичастиц. Поскольку относительный вес синглетных состояний в три раза меньше веса триплетных состояний, то при учете отмеченного характера расщепления энергетического терма, когда сильна тенденция к заселению только синглетных состояний, возникает существенное падение спектральной интенсивности для нижних, т. е. спин-поляронных состояний.

5. Приведенные выводы подтверждают гипотезу о спин-поляронной природе фермиевских квазичастиц в нормальной фазе оксидов меди. Вместе с тем это делает особенно актуальной задачу об исследовании куперовской неустойчивости в ансамбле таких спин-поляронных квазичастиц. Нетрудно видеть, что развитый в работе подход действительно содержит возможность описания сверхпроводящей фазы купратных ВТСП при учете реальной структуры  $\text{CuO}_2$ -плоскости и сильных спин-фермионных корреляций. Существенно, что куперовская неустойчивость будет происходить в системе квазичастиц, энергетическая структура которых правильно описывает данные ARPES-экспериментов. Однако это выходит за рамки темы данной работы и является предметом отдельного рассмотрения.

Работа выполнена в рамках Программы Президиума РАН «Квантовая физика мезоскопических и неупорядоченных систем», а также при финансовой поддержке РФФИ (гранты №№ 13-02-00909, 13-02-00523, р-сибирь № 13-02-98013) и фонда «Династия».

## ЛИТЕРАТУРА

1. Ю. А. Изюмов, УФН **167**, 465 (1997).
2. А. Ф. Барабанов, В. М. Березовский, Э. Жасинас, Л. А. Максимов, ЖЭТФ **110**, 1480 (1996).
3. A. F. Barabanov, R. O. Kuzian, and L. A. Maksimov, Phys. Rev. B **55**, 4015 (1997).
4. Н. М. Плакида, Л. Антон, С. Адам, Г. Адам, ЖЭТФ **124**, 367 (2003).
5. А. А. Владимиров, Д. Иле, Н. М. Плакида, ТМФ **152**, 538 (2007).
6. N. Plakida, *High-Temperature Cuprate Superconductors Experiment, Theory, and Applications*, Springer (2010).
7. М. В. Садовский, УФН **171**, 539 (2001).
8. В. В. Вальков, Д. М. Дзебисашвили, ЖЭТФ **127**, 686 (2005).
9. В. В. Вальков, А. А. Головня, ЖЭТФ **134**, 1167 (2008).
10. V. J. Emery, Phys. Rev. Lett. **58**, 2794 (1987).
11. C. M. Varma, S. Schmitt-Rink, and E. Abrahams, Sol. St. Comm. **62**, 681 (1987).
12. J. E. Hirsch, Phys. Rev. Lett. **59**, 228 (1987).
13. J. Zaanen and A. M. Oles, Phys. Rev. B **37**, 9423 (1988).
14. B. Lau, M. Berciu, and G. A. Sawatzky, Phys. Rev. Lett. **106**, 036401 (2011).
15. R. Zwanzig, Phys. Rev. **124**, 983 (1961).
16. Н. Mori, Prog. Theor. Phys. **33**, 423 (1965).
17. A. Damascelli, Z. Hussain, and Z.-X. Shen, Rev. Mod. Phys. **75**, 473 (2003).
18. V. Borisenko, M. S. Golden, S. Legner et al., Phys. Rev. Lett. **84**, 4453 (2000).
19. T. Yoshida, X. J. Zhou, T. Sasagawa et al., Phys. Rev. Lett. **91**, 027001 (2003).
20. X. J. Zhou, T. Yoshida, D.-H. Lee et al., Phys. Rev. Lett. **92**, 187001 (2004).
21. T. Yoshida, X. J. Zhou, D. H. Lu et al., J. Phys.: Condens. Matter **19**, 125209 (2007).
22. B. O. Wells, Z. X. Shen, A. Matsuura et al., Phys. Rev. Lett. **74**, 964 (1995).
23. D. S. Marshall, D. S. Dessau, A. G. Loeser et al., Phys. Rev. Lett. **76**, 4841 (1996).
24. K. M. Shen et al., Phys. Rev. Lett. **93**, 267002 (2004); Phys. Rev. B **75** 075115 (2007).
25. F. Ronning et al., Phys. Rev. B **67**, 035113 (2003).
26. J. G. Tobin, C. G. Olson, C. Gu et al., Phys. Rev. B **45**, 5563 (1992).
27. K. Gofron, J. C. Campuzano, H. Ding et al., J. Phys. Chem. Sol. **54**, 1193 (1993).
28. A. A. Abrikosov, J. C. Campuzano, and J. C. Gofron, Physica C **214**, 73 (1993).
29. D. S. Dessau, Z. X. Shen, D. M. King et al., Phys. Rev. Lett. **71**, 278 (1993).
30. D. M. King, Z. H. Shen, D. S. Dessau et al., Phys. Rev. Lett. **73**, 3298 (1994).
31. P. Aebi, J. Osterwalder, P. Schwaller et al., Phys. Rev. Lett. **72**, 2757 (1994).
32. A. G. Loeser, Z. X. Shen, D. S. Dessau et al., Science **273**, 325 (1996).
33. H. Ding, T. Yokoya, J. C. Campuzano et al., Nature **382**, 51 (1996).
34. H. Ding, M. R. Norman, T. Yokoya, T. Takeuchi et al., Phys. Rev. Lett. **78**, 2628 (1997).
35. G. Shirane, Y. Endoh, R. J. Birgeneau, M. A. Kastner, Y. Hidaka, M. Oda, M. Suzuki, and T. Murakami, Phys. Rev. Lett. **59**, 1613 (1987).
36. M. Inui, S. Doniach, and M. Gabay, Phys. Rev. B **38**, 6631 (1988).
37. J. F. Annet, R. M. Martin, A. K. McMahan, and S. Satpathy, Phys. Rev. B **40**, 2620 (1989).
38. J. Kondo and K. Yamaji, Prog. Theor. Phys. **47**, 807 (1972).
39. H. Shimahara and S. Takada, J. Phys. Soc. Jpn. **60**, 2394 (1991).
40. А. Ф. Барабанов, В. М. Березовский, ЖЭТФ **79**, 627 (1994).

41. А. Ф. Барабанов, А. А. Ковалев, О. В. Уразаев, А. М. Велемук, ЖЭТФ **119**, 777 (2001).
42. M. Ogata and H. Fukuyama, Rep. Prog. Phys. **71**, 036501 (2008).
43. O. A. Starykh, O. F. A. Bonfim, and G. F. Reiter, Phys. Rev. B **52**, 12534 (1995).
44. А. Ф. Барабанов, А. В. Михеенков, А. В. Шварцберг, ТМФ **168**, 389 (2011).
45. B. Keimer, N. Belk, R. J. Birgeneau et al., **46**, 14034 (1992).
46. V. Barzykin and D. Pines, Phys. Rev. B, **52**, 13585 (1995).
47. M. M. Korshunov and S. G. Ovchinnikov, Eur. Phys. J. B **57**, 271 (2007).
48. R. O. Kuzian, R. Nayn, A. F. Barabanov, and L. A. Maksimov, Phys. Rev. B **58**, 6194 (1998).