Письма в ЖЭТФ, том 47, вып. 9, стр. 464 – 467 *10 мая 1988 г.*

НЕМАГНИТНЫЙ СПИНОВЫЙ ПОЛЯРОН В ОБОБЩЕННОЙ МОДЕЛИ ХАББАРДА ДЛЯ CuO_2 ПЛОСКОСТЕЙ

Л.И.Глазман, А.С.Иоселевич

Исследованы состояния дополнительной частицы в обобщенной модели Хаббарда, эквивалентной кондо-решетке со спин-зависящими амплитудами межузельных переходов. Дырка формирует связанные комплексы со спинами решетки, основное состояние существенно отличается от магнитного полярона, формируемого электроном.

Открытие высокотемпературной сверхпроводимости возродило интерес к моделям с сильным кулоновским взаимодействием, которое, возможно, определяет и магнитные, и сверхпроводящие свойства купритов [1]. В нелегированном куприте ионы меди находятся в состоянии Cu^{2+} (одна дырка в d-оболочке), а p-оболочка O полностью заполнена. Предположение о том, что наинизшей энергии дополнительной дырки отвечает состояние Cu^{3+}, приводит к обычной модели Хаббарда на квадратной решетке Cu. В этой модели при сильном кулоновском отталкивании U_d дырка образует насыщенный ферромагнитный полярон [2]. Такой полярон, сильно увеличивающий эффективный спин носителя, не наблюдается в купритах. Попытки объяснения этого предполагали, что реальные значения U_d недостаточно велики [1, 3].

В другой модели, описывающей CuO_2 плоскости – модели Эмери [4], дополнительной дырке отвечает наинизшее состояние O^-. Мы покажем, что в этой модели ферромагнитный полярон не является основным состоянием дополнительной дырки даже при $U_d \to \infty$.

В модели Эмери гамильтониан дырок имеет вид

$$\mathcal{H}_0 = -\epsilon \sum d^+_{j\sigma} d_{j\sigma} + U_d \sum d^+_{j\uparrow} d_{j\uparrow} d^+_{j\downarrow} d_{j\downarrow} + U_p \sum a^+_{i\uparrow} a_{i\uparrow} a^+_{i\downarrow} a_{i\downarrow} + t_{pd} \sum_{\langle ij\rangle} (d^+_{j\sigma} a_{i\sigma} + a^+_{i\sigma} d_{j\sigma}), \tag{1}$$

где $d^+_{j\sigma}$, $a^+_{i\sigma}$ – операторы рождения дырки в оболочках Cu и O, $\epsilon = \epsilon_p - \epsilon_d > 0$; ϵ_p, U_p; ϵ_d, U_d – одночастичные и хаббардовские энергии на узлах O и Cu. Энергия отсчитывается от уровня ϵ_p. Основное предположение модели заключается в неравенстве $\epsilon < U_d$.

Мы пренебрежем отталкиванием U_p, а величину t_{pd} энергии $p-d$-гибридизации будем считать малой: $U_p, t_{pd} \ll \epsilon \ll U_d$. Для дополнительной дырки путем унитарного преобразования [5] из (1) получим новый гамильтониан [1)] $\mathcal{H} = \mathcal{H}_h + \mathcal{H}_{ex}$:

$$\mathcal{H}_h = t \sum_{\langle j i_1 i_2\rangle} a^+_{i_1\sigma_1} (2S_j\sigma + {}^1/_2) a_{i_2\sigma_2}, \qquad \mathcal{H}_{ex} = J \sum_{\langle j_1 j_2\rangle} S_{j_1} S_{j_2}, \tag{2}$$

эквивалентный $\mathcal{H}_0$ с точностью до $(t_{pd}/\epsilon)^4$. Гамильтониан $\mathcal{H}_{ex}$ с $J \sim t^4_{pd}/\epsilon^3 > 0$ отвечает суперобмену спинов S_j ближайших ионов Cu. Ниже, как и в [2], мы исследуем дырочный гамильтониан $\mathcal{H}_h$, т. к. $t \sim t^2_{pd}/\epsilon \gg J$. Узлы i_1, i_2, между которыми возможны переходы, показаны на рис. 1. Принципиальное отличие дырочного гамильтониана (2) от эффективного гамильтониана для дополнительной частицы в обычной модели Хаббарда [6], состоит в том, что возможные движения дырки ограничиваются оператором $2S\sigma + {}^1/_2$, а не гуц-

---

[1)] **При $\epsilon \gg U_d$ гамильтониан (1) сводится к стандартной модели Хаббарда. Если $U_p \gg \epsilon$, то подавляются $\mathcal{H}_{ex}$ и слагаемое с $i_1 = i_2$ в $\mathcal{H}_h$.**

виллеровским проектором. Рассматриваемая система отличается и от обычной кондо-решетки (где также есть магнитные поляроны [7]), т. к. в (2) от спинов зависят и одноузельные энергии, и амплитуды перескоков.

Состояние гамильтониана $\mathcal{H}_h$ можно характеризовать полным спином $S = S_{max} - m$, $m \geqslant 0$, его проекцией S_z и волновым вектором $\mathbf{k}$. Минимальную энергию, отвечающую данному m, обозначим E_m. Мы покажем, что в бесконечной решетке для любого конечного m справедливо строгое неравенство $E_{m+1} < E_m$.

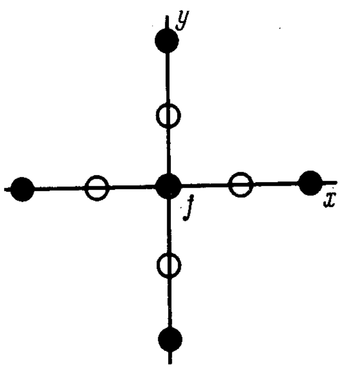

Рис. 1

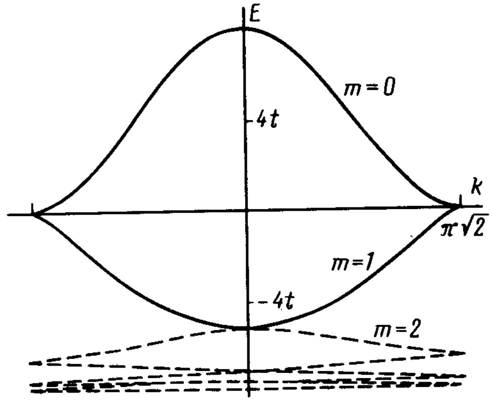

Рис. 2

Рис. 1. Фрагмент решетки CuO_2: ● – Cu, ○ – O. При заданном j узлами i_1, i_2 в $\langle j i_1 i_2 \rangle$ может быть любая пара из показанных узлов O, включая совпадающие ($i_1 = i_2$). Постоянная решетки $a_0 = 1$

Рис. 2. Закон дисперсии $E_m(\mathbf{k})$ для $\mathbf{k}$ в направлении [11]. Пунктиром показан предполагаемый вид $E_m(\mathbf{k})$ для $m \geqslant 2$. Аналогично выглядит $E_m(\mathbf{k})$ и в одномерном случае

Ферромагнитному состоянию отвечает $m = 0$ и собственная функция вида $\psi_0(i)$; i - положение дырки (со спином вверх). Соответствующий закон дисперсии имеет две ветви: $E_0^{(1)}(\mathbf{k}) \equiv$ $\equiv 0$, $E_0^{(2)}(\mathbf{k}) = 4t(1 + {}^1/_2 \cos k_x + {}^1/_2 \cos k_y)$, рис. 2. Собственные функции с $m > 0$ имеют две компоненты: $\varphi_m(i, j_1 \dots j_{m-1})$ и $\psi_m(i, j_1 \dots j_m)$, где i в функции φ_m – координата дырки со спином вниз, а в ψ_m – со спином вверх; j_l – координаты "магнонов" – перевернутых спинов Cu. Для определения $E_m(k)$ воспользуемся "одноплакетным" приближением (ОПП), которому отвечает вариационная функция $\psi_m(i, j_1 \dots, j_m)$ обращающаяся в ноль, если i не является соседом хотя бы одного из j_l. Для $m = 1$ в ОПП легко вычислить низшую ветвь $E_1(\mathbf{k}) = t\{0{,}5 - [16{,}25 + 8(\cos k_x + \cos k_y)]^{1/2}\}$; значение $E_1 = -5{,}18t$ достигается в центре зоны[2]. В точке $k_x = k_y = \pi$ ветви $E_0(\mathbf{k})$ и $E_1(\mathbf{k})$ смыкаются. Найденный "1-комплекс" отвечает связанному состоянию дырки и одного магнона. Есть ли связанные m-комплексы с $m \geqslant 2$?

Убедимся в существовании 2-комплекса. В рамках ОПП уравнения для $\psi_2(ij_1j_2)$ при $r = |(j_1 - j_2)_x| + |(j_1 - j_2)_y| \geqslant 3$ описывают неподвижный магнон и невзаимодействующий с ним 1-комплекс. Граничные условия для этих уравнений следуют из решения уравнения Шредингера при $r < 3$. Сузим класс функций ОПП, полагая $\psi_2(ij_1j_2) = e^{i\mathbf{k}\tilde{\mathbf{k}}}\chi(r)$ для $r \geqslant 3$, где $\tilde{\mathbf{j}}$ – тот из узлов j_1, j_2, рядом с которым нет дырки. Граничные условия задают связь $\chi(2)/\chi(3) =$ $= 1 + v(E\, k)$. Связанный 2-комплекс возникает, если $v(E_1, k) > 0$. Вычисления при малых k показывают, что $v(E_1 k) \approx -0{,}022 + 0{,}058\,k^2$ и $v > 0$ уже при $k \geqslant k^* = 0{,}2\pi$. Малое

[2]) Учет $\psi_1(ij) \neq 0$ на следующей координационной сфере понижает найденное значение E_1 на $0{,}15t$.

значение $v(E_1,0)$, по-видимому, указывает на то, что в точном решении $E_1(\mathbf{k})$ и $E_2(\mathbf{k})$ касаются в точке $\mathbf{k}=0$ (рис. 2). Сделанные приближения не позволяют найти наибольшую энергию связи 2-комплекса $\delta_2 = E_1 - E_2$ и соответствующее значение $\mathbf{k}=\mathbf{k}_0$. Однако нам важен сам факт существования связанного состояния. Выход за рамки ОПП понижает E_1 и E_2, но 2-комплекс остается связанным. Действительно, пусть при улучшении вариационной функции радиус 2-комплекса $r_2 \to \infty$ и $\delta_2 \to 0$. Тогда выделим некоторую область r с радиусом $r^* \ll r_2$ и вернемся в ней к ОПП. Это, во-первых, не изменит части сдвига энергии E_2, которая формируется областью $r \sim r_2$ и совпадает со сдвигом E_1 и, во-вторых, вернет нас к старому граничному условию. Последнее условие отвечает конечной величине r_2, что противоречит предположению $r_2 \to \infty$, т. е. найденные в ОПП 2-комплексы есть и в точном решении, $\delta_2 > 0$.

Докажем существование комплексов с $m > 2$. В ОПП 2-комплекс слабо связан и эквивалентен частице (1-комплекс) в поле точечного притягивающего центра (магнон). Радиус 3-комплекса r_3 определяется связью частицы с двумя центрами, расстояние между которыми r. Взаимодействие частицы с двумя точечными потенциалами приводит к граничному условию $\ln r_3 + \ln r_3/r = [v(k)]^{-1}$. Для оценки r и r_3 учтем, что центры делокализованы за счет взаимодействия с частицей и $k - k_0 \sim r^{-1}$. Разлагая $v(k)$ при $k \to k_0$, получим $v(k) = v(k_0)(1 - c(k-k_0)^2)$, $v(k_0) \sim (\ln r_2)^{-1}$, $c \sim 1$, откуда $r \sim (\ln r_2)^{1/2}$, $r_3 \sim (r r_2)^{1/2}$, $E_2 - E_3 \sim (t\delta_2/\ln r_2)^{1/2}$. Аналогичные рассуждения позволяют увидеть, что существуют комплексы с произвольными m, причем факт их существования сохраняется при выходе за рамки ОПП. При $m \gg 1$ энергию комплекса можно оценить с помощью метода когерентного потенциала: $E_2 - E_m \sim t/\ln r_2$, средние расстояния между магнонами $r \sim 1$, т. е. их плотность ρ конечна, и $S = (1-2\rho)S_{max}$. Проведенные рассуждения не позволяют для основного состояния сделать выбор между синглетом ($\rho = 1/2$) и ненасыщенным ферромагнетиком ($0 < \rho < {}^1/_2$).

Выясненные нами свойства m-комплексов в планарной модели CuO_2 остаются в силе и для одномерной цепи чередующихся узлов Cu – O. В частности, законы дисперсии 0-, 1- и 2-комплексов качественно сходны для $D=1$ и $D=2$. При $D=1$ легко получить, что $E_0(k) = 2t(1+\cos k)$, $E_1(k)$ – наименьший уровень уравнения $E^3 - 8tE^2\cos^2(k/2) + 64t^3\cos^4(k/2) = 0$, $E_1 = -2t(\sqrt{5}-1) = -2{,}47t$. ОПП для 2-комплекса в нечетном состоянии при $k=\pi$ дает $E_2 \approx -2{,}65t$. Справедливо общее утверждение: E_m достигается при $k=0$ для нечетных m, и при $k=\pi$ для четных. Неелевское состояние является невыгодным. Однако состояние дырки, связанной с доменной границей в неелевской цепочке, имеет энергию $E \approx -2{,}85t < E_2$.

Итак, спиновое состояние, формируемое дыркой в двумерной модели Эмери, сильно отличается и от насыщенного ферромагнитного полярона, и от неелевского состояния (вариационная оценка энергии последнего $E_N = -4{,}36t > E_1$). Можно строго утверждать, что полный спин S основного состояния макроскопически меньше S_{max}. Отличие от насыщенного полярона возникает и в обычной модели Хаббарда, но только на неальтернирующей решетке [2], причем наилучшему из регулярных расположений спинов в поляроне отвечает ненасыщенный ферромагнетик [9]. Его удельная намагниченность зависит от типа решетки. Напротив, в нашем случае отличие S от S_{max} есть для любой (в том числе и альтернирующей) решетки и обусловлено видом гамильтониана $\mathcal{H}_h$. Можно предположить, что поэтому основное состояние дополнительной дырки также не зависит от типа решетки и является синглетным[3)]. Если бы это предположение подтвердилось, то модель Эмери могла бы дать микроскопическую картину формирования бесспиновой дырки – холона [10]. В то же время дополнительный электрон в этой модели формирует обычный магнитный полярон.

[3)] Отметим, что при $D=1$ истинное основное состояние – заведомо синглетное [8].

Из сообщения Г.В.Уймина нам стало известно, что независимо рассмотренная модель изучалась А.Ф.Барабановым, Л.А.Максимовым и Г.В.Уйминым. Мы благодарны им за обсуждение и А.Г.Аронову за полезное замечание.

Литература

1. *Anderson P.W.,* Science, 1987, **235**, 1196.
2. *Nagaoka Y.* Phys. Rev., 1966, **147**, 392.
3. *Takahashi J.* Z. Phys. B, 1987, **67**, 503.
4. *Emery V.J.* Phys. Rev. Lett., 1987, **58**, 2794.
5. *Займан Дж.* Современная квантовая теория. М.: Мир, 1971.
6. *Harris A.B., Lange R.V.* Phys. Rev., 1967, **157**, 295.
7. *Нагаев Э.Л.* Физика магнитных полупроводников, М.: Наука, 1979.
8. *Lieb E., Mattis D.* Phys. Rev., 1962, **125**, 164.
9. *Иорданский С.В., Смирнов А.В.* ЖЭТФ, 1980, **79**, 1942.
10. *Anderson P.W., Baskaran G., Zou Z., Hsu T.* Phys. Rev. Lett., 1987, **58**, 2790.

Институт теоретической физики им. Л.Д.Ландау
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
30 марта 1988 г.

Институт проблем технологии микроэлектроники
и особочистых материалов
Академии наук СССР