

ОБ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЯХ В ПЛОСКОСТЯХ CuO₂

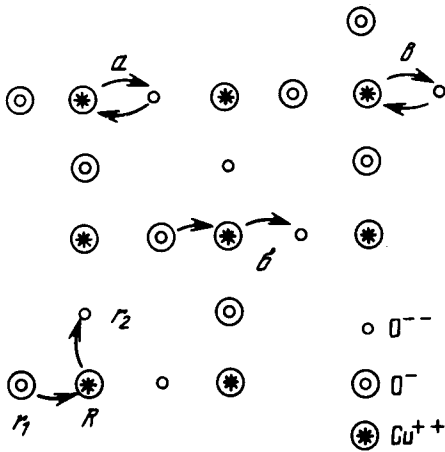
А.Ф.Барабанов, Л.А.Максимов, Г.В.Уймин

В рамках обобщенной модели Хаббарда получен одночастичный дырочный спектр, исследованы его особенности для различных вариантов основного состояния магнитной подсистемы ионов меди. Обсуждаются возможности образования связанных дырочных состояний.

Экспериментальные исследования высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) регулярно дают нам новые факты, требующие теоретического осмысления. Весьма активная пропаганда Андерсоном ¹ RVB-теории несколько заслонила альтернативные подходы к объяснению ВТСП, включающие общепринятые механизмы типа БКШ, а также поляронные. Нам представляется перспективным подход, предложенный в работах ²⁻⁵ и использующий обобщение модели Хаббарда для решетки типа CuO₂ (рисунок). Ее гамильтониан

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{\mathbf{r}} \epsilon_p n_p(\mathbf{r}) + \sum_{\mathbf{R}} \epsilon_d n_d(\mathbf{R}) + U_p \sum_{\mathbf{r}} n_p^\uparrow(\mathbf{r}) n_p^\downarrow(\mathbf{r}) + U_d \sum_{\mathbf{R}} n_d^\uparrow(\mathbf{R}) n_d^\downarrow(\mathbf{R}) \\ & - t \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{R} \rangle, \sigma} (p_{\mathbf{r}\sigma}^+ d_{\mathbf{R}\sigma} + d_{\mathbf{R}\sigma}^+ p_{\mathbf{r}\sigma}) + V \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{R} \rangle} n_p(\mathbf{r}) n_d(\mathbf{R}) \end{aligned} \quad (1)$$

включает одночастичные уровни (ϵ_p, ϵ_d), внутриатомные корреляции (U_p, U_d) (индексы p и d относятся к O и Cu соответственно). Перескоки осуществляются по гибридным орбиталям Cu – O. V – кулоновское отталкивание дырок на тех же орбиталях.



Схематическое изображение плоскости CuO₂. Объяснения даны в тексте

Разумно считать, что в отсутствие допирования основным состоянием ионов меди и кислорода являются Cu⁺⁺ и O⁻⁻, то есть ровно одна дырка приходится на один ион меди. Это значит, что $\epsilon = \epsilon_p - \epsilon_d > 0$. Недавние эксперименты ⁶ дают основание полагать, что возникшие в результате допирования свободные дырки в плоскости CuO₂ сосредоточены в основном на кислороде. Тогда для параметров модели должно выполняться еще одно неравенство:

$$\epsilon + 2V < U_d.$$

Перескоковый параметр t будем считать меньше оставшихся (ϵ, U_d, U_p), что позволит во втором порядке теории возмущений по кинетической энергии t построить эффективный гамильтониан, описывающий дырочные перескоки только по кислородной подрешетке. Чтобы выявить особенности дырочной зонной структуры, исключим из рассмотрения состояния

Cu^{+++} , то есть положим $U_d = \infty$. Наложение этого условия не принципиально, но разумно, так как по оценкам работ ^{2,3} U_d действительно является наибольшим энергетическим параметром задачи.

Антиферромагнитный (АФМ) обмен ионов меди в соседних узлах \mathbf{R} и \mathbf{R}' возникает в четвертом порядке теории возмущений и равен

$$4 \frac{t^4}{(\epsilon + V)^2 (\epsilon + U_p)} \left(2S_{\mathbf{R}} S_{\mathbf{R}'} + \frac{1}{2} \right).$$

Очевидно, что спиновые корреляции в медной подрешетке должны носить АФМ характер и влиять на дырочный зонный спектр. При конечной концентрации кислородных дырок становится существенным и обратное влияние зонного спектра на спиновое состояние медной подрешетки.

Вернемся к вопросу о эффективном дырочном гамильтониане. На рисунке показаны виртуальные процессы, вызывающие эффективный перескок с узла \mathbf{r}_1 на один из ближайших к нему узлов \mathbf{r}_2 . Гамильтониан такого перескока имеет вид:

$$\mathcal{H}_{\text{эфф}} = (\tau_1 - \tau_2 \delta_{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2}) p_{\mathbf{R}+\mathbf{a}_1, \alpha}^+ p_{\mathbf{R}+\mathbf{a}_2, \beta} (2\vec{\sigma}_{\alpha\beta} \mathbf{S}(\mathbf{R}) + \frac{1}{2} \delta_{\alpha\beta}), \quad (2)$$

где $\tau_1 = t^2 \epsilon^{-1}$, $\tau_2 = t^2 (\epsilon^{-1} - (\epsilon + U_p)^{-1})$, векторы $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ соединяют ближайшие узлы Cu и O , $\vec{\sigma}$ – матрицы Паули, $\mathbf{S}(\mathbf{R})$ – вектор спина узла \mathbf{R} медной подрешетки. Для наших целей удобнее выразить $\mathcal{H}_{\text{эфф}}$ в хаббардовских переменных ⁷.

$$\mathcal{H}_{\text{эфф}} = (\tau_1 - \tau_2 \delta_{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2}) X_{\mathbf{R}+\mathbf{a}_2}^{\sigma_2 0} X_{\mathbf{R}+\mathbf{a}_1}^{0 \sigma_1} Z_{\mathbf{R}}^{\sigma_1 \sigma_2}. \quad (2')$$

В этом выражении оператор X^{σ_0} ($X^{0 \sigma}$) порождает (уничтожает) частицу на кислородном узле, $Z^{\sigma_1 \sigma_2}$ – оператор спиновой замены $\sigma_2 \rightarrow \sigma_1$ на медной подрешетке.

Блоховские функции, определяющие одночастичный спектр гамильтониана (2'), могут быть построены из полного, но не обязательно ортогонального набора узельных функций:

$$|\mathbf{R} \sigma\rangle = \sum_{\mathbf{b}} (f_{\mathbf{R}, \mathbf{b}} X_{\mathbf{R}+\mathbf{b}}^{\sigma 0} + g_{\mathbf{R}, \mathbf{b}} X_{\mathbf{R}+\mathbf{b}}^{\bar{\sigma} 0} Z_{\mathbf{R}}^{\sigma \bar{\sigma}}) |G\rangle, \quad (3)$$

где $|G\rangle$ означает волновую функцию основного состояния спиновой системы, а \mathbf{b} – векторы, соединяющие ионы Cu и O . Коэффициенты в формуле (3) могут рассматриваться как вариационные. Для простой магнитной решетки они должны зависеть только от \mathbf{b} . Для АФМ состояния меди набор коэффициентов удваивается ($f_{\mathbf{b}}^+$, $g_{\mathbf{b}}^+$ и $f_{\mathbf{b}}^-$, $g_{\mathbf{b}}^-$).

На функции Блоха

$$|\mathbf{k}, \sigma\rangle = A_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{R}} \exp i \mathbf{k} \mathbf{R} |\mathbf{R} \sigma\rangle \quad (4)$$

мы налагаем условие ортонормированности, что эквивалентно

$$1 = A_{\mathbf{k}}^2 \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} \exp i \mathbf{k} (\mathbf{R} - \mathbf{R}') \langle \sigma \mathbf{R}' | \mathbf{R} \sigma \rangle. \quad (5)$$

Здесь мы представим результаты расчета для простейшего вида функции (3), в которой вариационные коэффициенты f и g отличны от нуля только для минимальных \mathbf{b} . Кроме диагональных матричных элементов $\langle \mathbf{R} | \mathcal{H} | \mathbf{R} \rangle$ отличны от нуля и $\langle \mathbf{R} + 2\mathbf{b} | \mathcal{H} | \mathbf{R} \rangle$ и $\langle \mathbf{R} + 2\mathbf{b}_1 + 2\mathbf{b}_2 | \mathcal{H} | \mathbf{R} \rangle$. При этом вид зонного спектра

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \langle \mathbf{k} | \mathcal{H} | \mathbf{k} \rangle$$

оказывается зависящим от средних проекций спинов $\langle Z_{\mathbf{R}}^{-} \rangle$, $\langle Z_{\mathbf{R}}^{+} \rangle$ и корреляторов вида

$$\langle Z_{\mathbf{R}}^{-+} Z_{\mathbf{R}+2\mathbf{b}}^{-} \rangle, \langle Z_{\mathbf{R}}^{-+} Z_{\mathbf{R}+2\mathbf{b}_1}^{\sigma\sigma} Z_{\mathbf{R}+2\mathbf{b}_1+2\mathbf{b}_2}^{-} \rangle.$$

Кратко сформулируем результаты зонного расчета для частного случая $U_p = \infty$. Для состояний АФМ типа дну зоны ϵ_0 соответствует граница зоны Бриллюэна, в окрестности которой

$$\epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon_0 \sim (\cos 2k_x a + \cos 2k_y a)^2.$$

Рассматриваемая ситуация отлична от обычного nesting, а тем, что квадратичная зависимость спектра ведет к квазиодномерному характеру плотности состояний, что делает систему крайне неустойчивой по отношению к ее перестройке. Но в отличие от одномерного случая кулоновское взаимодействие не подавляет сверхпроводящий канал.

В единицах τ_1 дно зоны ϵ_0 ФМ состояния равно $-3\sqrt{2}$, для АФМ состояния изинговского типа $\epsilon_0 = (-1 - \sqrt{37})/2$, для гайзенберговского АФ магнетика $\epsilon_0 \approx -3,11$. Дно зоны в парамагнитном случае лежит выше указанных величин. Хотя наиболее выгодным оказывается ФМ фон, нужно помнить о АФМ взаимодействии ионов меди. При такой конкуренции возникает феррон⁸ с характерным радиусом $\sim (U_p \epsilon/t^2)^{1/4}$, что для реальных энергетических параметров сводится к одной-двум постоянным решетки. Но такие флуктуации уже включены в нашу вариационную функцию. В такой ситуации нужно рассматривать различные типы АФМ упорядочения, а возможно и состояния RVB-типа и их влияние на дырочный спектр.

В конце мы укажем механизм, проявляющийся во втором порядке теории возмущений и ведущий к локальному притяжению дырок на малых расстояниях. На рисунке (области а и б) показаны виртуальные процессы, которые дают вклад в энергию $-t^2/(\epsilon - V)$ вместо $-t^2/\epsilon$. Для нахождения энергии связанного состояния также использовался вариационный подход, но другая его модификация — кластерный метод. Оказалось, что для $V/\epsilon \gtrsim 0,36$ выгодно синглетное спаривание дырок. Нужно отметить, что слишком большие V ($V/\epsilon \gtrsim 0,5$) вызывают спонтанное образование тяжелых трехчастичных связанных состояний. Виртуальный процесс, показанный в области в на рисунке, ведет к энергетическому сдвигу $-t^2/(\epsilon - 2V)$, откуда следует приведенное выше неравенство. Указанная граница ($V/\epsilon \approx 0,36$) сдвигается вниз при $U_p \neq \infty$, так как снимается бесконечное одноузельное отталкивание в синглетном состоянии.

Нужно отметить, что при V/ϵ меньшем критического допирование может приводить сначала к заполнению фермиевских состояний вплоть до энергетического уровня бозонов, какими являются связанные дырки. Такая возможность позволила бы объяснить низкотемпературное поведение теплоемкости $\sim T$, а также некоторые другие физические свойства ВТСП, включающие линейную зависимость $\rho(T)$ при $T > T_c$.

Один из авторов (Г.У.) благодарен В.Л.Покровскому и Г.М.Элиашбергу за полезные обсуждения.

Литература

1. Anderson P.W. Science, 1987, 235, 1196.
2. Varma C.M., Schmitt-Rink, Abrahams E. Sol. St. Comm., 1987, 62, 681.
3. Emery V.J. Phys. Rev. Lett., 1987, 58, 2794.
4. Hirsch J.E. Phys. Rev. Lett., 1987, 59, 288.
5. Zhang F.C., Rice T.M. Preprint, 1987.
6. Tranquada J.M., Heald S.M., Moodenbaugh A.R., Suenaga M. Phys. Rev., 1987, B35, 7187; Fujimori A., Takayama-Muromachi E., Uchida Y., Okai B. Phys. Rev., 1987, B35, 8814.

7. *Hubbard J.* Proc. Roy. Soc., 1963; 276, 238.

8. *Нагаев Э.Л.* ЖЭТФ, 1968. 54, 1228.

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

Поступила в редакцию
14 апреля 1988 г.
