Письма в ЖЭТФ, том 114, вып. 5, с. 339 – 345 

# Реализация концепции спинового полярона в купратных сверхпроводниках на основе диаграммной техники

*В. А. Мицкан, М. М. Коровушкин, Д. М. Дзебисашвили*[1)]

*Институт физики им. Л. В. Киренского, Федеральный исследовательский центр "Красноярский научный центр Сибирского отделения РАН", 660036 Красноярск, Россия*

Поступила в редакцию 4 августа 2021 г.
После переработки 9 августа 2021 г.
Принята к публикации 9 августа 2021 г.

В рамках спин-фермионной модели купратных сверхпроводников на основе метода, комбинирующего феймановскую диаграммную технику и диаграммную технику для спиновых операторов, исследованы спектральные свойства ансамбля фермиевских спин-поляронных квазичастиц. Показано, что сильная спин-зарядовая связь приводит к формированию нижней спин-поляронной зоны, отделенной значительной энергетической щелью от зоны затравочных дырок. Установлено, что спин-поляронная зона характеризуется локальным минимумом в окрестности точки $(\pi/2, \pi/2)$ зоны Бриллюэна. Определен класс диаграмм для массового оператора, имеющих принципиальное значение для описания главных особенностей спин-поляронного спектра.

DOI: 10.31857/S1234567821170092

**1. Введение.** Исходным положением концепции спинового полярона [1–4] является наличие сильной спин-зарядовой связи [5–9], которая реализуется в купратных сверхпроводниках благодаря сильным электронным корреляциям (СЭК) [10–13] и значительной величине гибридизации между $d$-состояниями ионов меди и $p$-состояниями ионов кислорода. В рамках отмеченной концепции спин-зарядовая связь учитывается точно, и это обстоятельство приводит к возникновению фермиевской квазичастицы — спинового полярона, движение которого жестко скореллировано с динамикой локализованных на ближайших ионах меди спинов.

Концепция спинового полярона развивалась на основе модели решетки Кондо [1–3, 14–16], а также спин-фермионной модели (СФМ) [17–22], являющейся эффекивным низкоэнергетическим вариантом трехзонной модели Эмери [23, 24]. В частности, в рамках СФМ при использовании реальных энергетических параметров удалось описать тонкие особенности электронной структуры и спектральных характеристик спин-поляронных квазичастиц [18, 19]. Основным инструментом в отмеченных исследованиях являлась проекционная техника Цванцига–Мори [25–27], которая в сочетании с формализмом двухвременных запаздывающих функций Грина дает возможность рассчитывать термодинамические средние, необходимые для описания как нормальных, так и сверхпроводящих свойств ансамбля спин-поляронных квазичастиц [20, 22, 28]. Особенность использования этой техники в рамках спин-поляронного подхода заключается в получении замкнутой системы уравнений для функций Грина, которые строятся на расширенном наборе базисных операторов, корректно учитывающих сильную спин-фермионную связь квазичастиц на $CuO_2$-плоскости. Главным недостатком такого подхода является его среднеполевой характер, не позволяющий должным образом учитывать динамические процессы спин-флуктуационного рассеяния, играющие важную роль, например, в описании псевдощелевой фазы купратных сверхпроводников.

Недавно в работе [29] была предпринята попытка развить спин-поляронный подход в рамках диаграммной техники, названной авторами "пучковой". Особенностью этого подхода является точный учет алгебры спиновых операторов на одном узле, что позволяет корректно описывать одноузельные процессы спин-зарядового рассеяния. Однако при таком подходе пренебрегается зависимостью спиновых операторов от мнимого времени, что не позволяет выйти за рамки статического приближения.

Предлагаемая в данной работе реализация концепции спинового полярона основана на комбинации хорошо разработанных диаграммных методов как для фермиевских [30], так и для спиновых [31, 32] операторов, и, таким образом, не содержит недостатков использованных ранее подходов.

[1)]e-mail: ddm@iph.krasn.ru

**2. Спин-фермионная модель.** Гамильтониан СФМ [17, 33–37], учитывающий основные особенности электронной структуры $CuO_2$-плоскости высокотемпературных сверхпроводников, имеет вид

$$\hat{H} = \sum_{k\alpha}\Big(\xi_{k_x} a_{k\alpha}^{\dagger} a_{k\alpha} + \xi_{k_y} b_{k\alpha}^{\dagger} b_{k\alpha} + t_k (a_{k\alpha}^{\dagger} b_{k\alpha} + b_{k\alpha}^{\dagger} a_{k\alpha})\Big) + \frac{J}{N}\sum_{fkq\alpha\beta} e^{if(q-k)} u_{k\alpha}^{\dagger} \tilde{\mathbf{S}}_f^{\alpha\beta} u_{q\beta} + \frac{I}{2}\sum_{f\delta} \mathbf{S}_f \mathbf{S}_{f+2\delta}. \quad (1)$$

При записи гамильтониана введены обозначения

$$\xi_{k_{x(y)}} = \varepsilon_p - \mu + \tilde{\tau}\left(1 - \cos k_{x(y)}\right),$$
$$t_k = (2\tilde{\tau} - 4t)\, s_{k_x} s_{k_y}, \quad s_{k_{x(y)}} = \sin(k_{x(y)}/2),$$
$$u_{k\beta} = s_{k_x} a_{k\beta} + s_{k_y} b_{k\beta}, \quad \tilde{\mathbf{S}}_f = \mathbf{S}_f \boldsymbol{\sigma},$$
$$\tilde{\tau} = \frac{t_{pd}^2}{\Delta_{pd}}\left(1 - \frac{\Delta_{pd}}{U_d - \Delta_{pd}}\right),$$
$$J = \frac{4t_{pd}^2}{\Delta_{pd}}\left(1 + \frac{\Delta_{pd}}{U_d - \Delta_{pd}}\right). \quad (2)$$

Слагаемые первой суммы в гамильтониане (1) описывают подсистему дырок на ионах кислорода в квазиимпульсном представлении. Операторы $a_{k\alpha}^{\dagger}(a_{k\alpha})$ и $b_{k\alpha}^{\dagger}(b_{k\alpha})$ есть операторы рождения (уничтожения) дырки в состоянии с квазиимпульсом $k$ и проекцией спина $\alpha = \pm 1/2$ в подсистеме ионов кислорода с $p_x$- и $p_y$-орбиталями соответственно. Функции $\xi_{k_{x(y)}}$ и $t_k$, согласно их определению (2), выражаются через энергию связи дырки на ионе кислорода $\varepsilon_p$, химпотенциал $\mu$, интеграл прямых перескоков между ближайшими ионами кислорода $t$, а также параметр $\tilde{\tau}$, учитывающий интенсивность перескоков дырок на кислороде за счет процессов второго порядка по параметру гибридизации $t_{pd}$. В выражении для $\tilde{\tau}$ разность $\Delta_{pd} = \varepsilon_p - \varepsilon_d$ определяет щель с переносом заряда, где $\varepsilon_d$ – одноузельная энергия дырки на ионе меди. Вторая сумма гамильтониана соответствует обменному взаимодействию с интенсивностью $J$ между подсистемой дырок на кислороде и спинами, локализованными на ионах меди. Скалярное произведение векторного оператора спина $\mathbf{S}_f$ на узле $f$ и вектора $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$, составленного из матриц Паули, обозначено посредством $\tilde{\mathbf{S}}_f$. Посредством $N$ обозначено число элементарных ячеек, равное числу ионов меди. Последняя сумма в (1) соответствует сверхобменному взаимодействию с параметром $I$ между ближайшими спинами на ионах меди, возникающему в четвертом порядке теории возмущений. Здесь вектор $\delta$ связывает ион меди с четырьмя ближайшими ионами кислорода.

Для дальнейшего удобно переписать гамильтониан СФМ (1) в представлении новых фермиевских операторов $\varphi_{k\alpha}$ и $\psi_{k\alpha}$, которые можно определить посредством следующего унитарного преобразования [38, 39]

$$\varphi_{k\alpha} = \left(s_{k_x} a_{k\alpha} + s_{k_y} b_{k\alpha}\right)/\nu_k,$$
$$\psi_{k\alpha} = \left(s_{k_x} b_{k\alpha} - s_{k_y} a_{k\alpha}\right)/\nu_k, \quad (3)$$

где $\nu_k = \sqrt{s_{k_x}^2 + s_{k_y}^2}$. Выполнив преобразование (3), представим гамильтониан СФМ в виде, удобном для применения диаграммной техники:

$$\hat{H}_{s-f} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{int}}. \quad (4)$$

Здесь оператор $\hat{H}_0$ описывает невзаимодействующие кислородные дырки и локализованные на ионах меди спины

$$\hat{H}_0 = \sum_{k\alpha}\left(\xi_{\psi k}\psi_{k\alpha}^{\dagger}\psi_{k\alpha} + \xi_{\varphi k}\varphi_{k\alpha}^{\dagger}\varphi_{k\alpha}\right) - \sum_f h S_f^z, \quad (5)$$

где

$$\xi_{\varphi k} = \varepsilon_p + 2\tilde{\tau}\nu_k^2 - 8t\frac{s_{k_x}^2 s_{k_y}^2}{\nu_k^2} - \mu,$$
$$\xi_{\psi k} = \varepsilon_p + 8t\frac{s_{k_x}^2 s_{k_y}^2}{\nu_k^2} - \mu. \quad (6)$$

Последнее слагаемое в выражении (5), описывающее зеемановскую энергию спинов с бесконечно малым полем ($h \to 0$), направленным вдоль оси $z$, добавляется для корректного построения диаграммной техники для спиновых операторов. Оператор взаимодействия имеет вид

$$\hat{H}_{\text{int}} = \sum_{k\alpha} V_k (\varphi_{k\alpha}^{\dagger}\psi_{k\alpha} + \psi_{k\alpha}^{\dagger}\varphi_{k\alpha}) + \frac{1}{N}\sum_{kqf\alpha\beta} J_{kq} e^{if(q-k)}\varphi_{k\alpha}^{\dagger}\tilde{\mathbf{S}}_f^{\alpha\beta}\varphi_{q\beta} + \frac{I}{2}\sum_{f\delta}\mathbf{S}_f\mathbf{S}_{f+2\delta}, \quad (7)$$

где

$$V_k = -4t\frac{s_{k_x}s_{k_y}}{\nu_k^2}(s_{k_x}^2 - s_{k_y}^2), \quad J_{kq} = J\nu_k\nu_q.$$

Удобство записи гамильтониана СФМ в виде (4) обусловлено тем, что только один сорт затравочных квазичастиц (именно тех, что описываются операторами $\varphi_{k\alpha}$) связан с локализованной спиновой подсистемой.

В дальнейшем важное значение будет иметь также расщепленный характер функции взаимодействия $J_{kq}$.

**3. Функции Грина дырок и массовый оператор.** Для изучения спектральных свойств системы, описываемой гамильтонианом (4), воспользуемся формализмом мацубаровских функций Грина, которые определим следующими выражениями,

$$G_{\alpha}^{(\varphi)}\left(k,\tau-\tau'\right)=-\left\langle T_{\tau}\tilde{\varphi}_{k\alpha}(\tau)\tilde{\varphi}_{k\alpha}^{\dagger}(\tau')\right\rangle,$$
$$G_{\alpha}^{(\psi)}\left(k,\tau-\tau'\right)=-\left\langle T_{\tau}\tilde{\psi}_{k\alpha}(\tau)\tilde{\psi}_{k\alpha}^{\dagger}(\tau')\right\rangle, \qquad (8)$$

где $T_\tau$ – оператор упорядочения по мацубаровским временным переменным $\tau$ и $\tau'$, изменяющимся в пределах от 0 до $\beta=1/T$, где $T$ – температура. Операторы $\varphi$ и $\psi$ записаны в представлении Гейзенберга

$$\tilde{\varphi}_{k\alpha}(\tau)=\exp(\tau\hat{H}_{s-f})\varphi_{k\alpha}\exp(-\tau\hat{H}_{s-f}). \qquad (9)$$

Угловые скобки в (8) означают термодинамическое усреднение с матрицей плотности, определяемой гамильтонианом $\hat{H}_{s-f}$. Важным обстоятельством является то, что локализованная спиновая подсистема находится в состоянии квантовой спиновой жидкости. Это означает отсутствие дальнего магнитного порядка ($\langle S_f^z\rangle=0$) и SU(2)-инвариантность спиновых корреляционных функций $C_{fm}=3\langle S_f^xS_m^x\rangle=3\langle S_f^yS_m^y\rangle=3\langle S_f^zS_m^z\rangle$.

Фурье-образы функций Грина (8) имеют вид

$$G_{\alpha}^{(\eta)}\left(k,\tau\right)=T\sum_{\omega_m}e^{-i\omega_m\tau}G_{\alpha}^{(\eta)}\left(k,i\omega_n\right), \qquad (10)$$

где $\omega_n=(2n+1)\pi T$, $n=0,\pm1,\pm2,...$ – мацубаровские частоты, $\eta=\varphi,\psi$.

Функция $G_{\alpha}^{(\varphi)}(k,i\omega_n)$ удовлетворяет уравнению Дайсона

$$G_{\alpha}^{(\varphi)}(k,i\omega_n)=\frac{1}{\left(G_k^{(0)}(i\omega_n)\right)^{-1}-\Sigma(k,i\omega_n)}, \qquad (11)$$

где $\Sigma(k,i\omega_n)$ – неприводимая часть массового оператора, а функция

$$G_k^{(0)}(i\omega_m)=\frac{i\omega_m-\xi_{\psi k}}{(i\omega_m-\xi_{\varphi k})\left(i\omega_m-\xi_{\psi k}\right)-V_k^2} \qquad (12)$$

описывает невзаимодействующие со спиновой подсистемой квазичастицы сорта $\varphi$, но учитывает их гибридизацию с квазичастицами сорта $\psi$.

В дальнейшем нас будет интересовать режим низкой плотности носителей тока, характерный для купратных сверхпроводников. В этой связи обратим внимание на два важных обстоятельства, отличающих гамильтониан СФМ (4) от формально схожего с ним гамильтониана “расширенной” модели решетки Кондо [4]. Первое отличие связано с реализацией неравенства $J\gg W$, где $W$ – ширина зоны затравочных дырок на кислороде. Именно большая величина $J$ отвечает за формирование в купратах спин-поляронных квазичастиц. Отметим, что в модели решетки Кондо обычно рассматривается противоположный предел $J\ll W$. Второе отличие обусловлено низкой концентрацией дырок в купратах $x<0.2$. При описании эффекта Кондо, напротив, важное значение имеет большое количество носителей тока, поскольку это обуславливает эффективную экранировку.

Приближение низкой плотности при диаграммном описании дает возможность отбросить все графики, содержащие фермионные петли. Можно показать, что выражение для массового оператора, описывающего связь дырок с локализованной спиновой подсистемой, может быть записано следующим образом:

$$\Sigma(k,i\omega_m)=J_{kk}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{N}\sum_{f_1\ldots f_n}T^n\int_0^{\beta}d\tau_1\ldots d\tau_n\times$$
$$\times\sum_{\omega_1\ldots\omega_{n-1}}e^{i\tau_1(\omega_m-\omega_1)}\ldots e^{i\tau_n(\omega_{n-1}-\omega_m)}\times$$
$$\times X_{f_1-f_2}(i\omega_1)\ldots X_{f_{n-1}-f_n}(i\omega_{n-1})\times$$
$$\times\langle T_{\tau}\left(\tilde{\mathbf{S}}_{f_1}(\tau_1)\ldots\tilde{\mathbf{S}}_{f_n}(\tau_n)\right)_{\downarrow\downarrow}\mathfrak{S}_I(\beta)\rangle_{0c}^{\mathrm{irr}}, \qquad (13)$$

где

$$X_f(i\omega_l)=\frac{1}{N}\sum_q J_{qq}\,e^{iqf}G_k^{(0)}(i\omega_l). \qquad (14)$$

Матрица рассеяния $\mathfrak{S}_I(\beta)$ учитывает взаимодействия только между локализованными спинами

$$\mathfrak{S}_I(\beta)=T_{\tau}\exp\left\{-\int_0^{\beta}d\tau\frac{I}{2}\sum_{f\delta}\mathbf{S}_f(\tau)\mathbf{S}_{f+2\delta}(\tau)\right\}, \qquad (15)$$

а матричный $\tilde{\mathbf{S}}_f$ и векторный $\mathbf{S}_f$ спиновые операторы берутся в представлении взаимодействия

$$\tilde{\mathbf{S}}_f(\tau)=e^{\tau\hat{H}_0}\tilde{\mathbf{S}}_fe^{-\tau\hat{H}_0},\quad \mathbf{S}_f(\tau)=e^{\tau\hat{H}_0}\mathbf{S}_fe^{-\tau\hat{H}_0}. \qquad (16)$$

Нижний индекс “0” у правой угловой скобки указывает на то, что термодинамическое среднее в выражении (13) берется с матрицей плотности, описывающей систему без взаимодействия. Стоящий рядом индекс “$c$” означает, что при рассмотрении среднего от произведения спиновых операторов по теореме Вика [31] учитываются только связанные диаграммы.

Надпись "irr" сверху у правой угловой скобки означает, что учитываются только неприводимые диаграммы, т.е. диаграммы, которые не могут быть разрезаны на две несвязанные части по одной фермиевской линии. В силу условия SU(2)-инвариантности состояния спиновой подсистемы, в произведении $n$ матричных операторов $\tilde{\mathbf{S}}_f(\tau)$ можно взять любой диагональный элемент. Для определенности мы выбираем элемент $\downarrow\downarrow$.

**4. Спиновые функции Грина.** Вычисление $T_\tau$-упорядоченного термодинамического среднего от каждого произведения спиновых операторов в выражении (13) осуществляется согласно общим правилам спиновой диаграммной техники [31]. Методика вычисления спиновых функций Грина в однопетлевом приближении для систем, находящихся в состоянии квантовой спиновой жидкости и описываемых на основе СФМ, была развита в работе [40]. В частности, для спиновой функции Грина

$$\begin{aligned} D_{++}(f\tau; f'\tau') &= -\langle T_\tau S_f^+(\tau) S_{f'}^-(\tau')\rangle = \\ &= \frac{T}{N}\sum_{q,l} e^{iq(f-f')-i\omega_l(\tau-\tau')} D_{++}(q, i\omega_l) \\ &\quad (\omega_l = 2l\pi T, \quad l = 0, \pm1, \pm2, \dots) \end{aligned} \tag{17}$$

было получено выражение

$$D_{++}(q, i\omega_l) = G_{++}(q, i\omega_l) P(q, i\omega_l), \tag{18}$$

в котором

$$\begin{aligned} G_{++}(q, i\omega_l) &= \frac{i\omega_l}{(i\omega_l)^2 - \tilde{\Omega}_q^2(i\omega_l)}, \\ P(q, i\omega_l) &= \frac{2}{3i\omega_l}\frac{1}{N}\sum_p C_p (I_{q-p} - I_p), \\ \tilde{\Omega}_q^2(i\omega_l) &= \frac{1}{3N}\sum_q C_q \left(I_q - I_k - \Pi_k(i\omega_l)\right)(I_q - I_{k-q}). \end{aligned} \tag{19}$$

В выражениях (19) посредством $I_q$ и $C_q$ обозначены фурье-образы обменного интеграла $I_{fm}$ и корреляционной функции $C_{fm}$, соответственно,

$$I_q = I\sum_\delta e^{-iq\delta} = 4I\gamma_{1q}, \quad C_q = \sum_\delta e^{-iq\delta} C_\delta, \tag{20}$$

где $\gamma_{1q} = (\cos k_x + \cos k_y)/2$. Поляризационный оператор $\Pi_k(i\omega_l)$ в (19) учитывает влияние носителей тока на спиновую подсистему.

Выражение для спиновой функции Грина может быть записано в более простом виде, если принять во внимание то обстоятельство, что обменное взаимодействие учитывается только между ближайшими соседними спинами, а также ограничиться статическим приближением для поляризационного оператора $\Pi_k(i\omega_l) = \Pi_k$:

$$D_{++}(q, i\omega_l) = \frac{(8/3) C_1 I(\gamma_{1q} - 1)}{(i\omega_l)^2 - \Omega_q^2}. \tag{21}$$

Здесь $\Omega_q$ — закон дисперсии спин-волновых возбуждений

$$\Omega_q^2 = \frac{16}{3} I^2 |C_1| (1 - \gamma_{1q}) \left[1 + \gamma_{1q} + \Delta_q\right], \tag{22}$$

и функция

$$\Delta_q = \frac{3/4 + 2C_2 + C_3}{4|C_1|} - 1 + \frac{\Pi_q}{4I} \tag{23}$$

описывает щель в спектре спиновых возбуждений в окрестности точки $(\pi, \pi)$ зоны Бриллюэна. Посредством $C_j$ обозначены спиновые корреляторы из $j$-ой координационной сферы, которые должны находиться самосогласованно через спиновые функции Грина

$$C_j = \frac{3}{2}\frac{T}{N}\sum_{q,l} e^{iq\delta_j} D_{++}(q, i\omega_l), \tag{24}$$

где $\delta_j$ – вектор, соединяющий узлы из $j$-й координационной сферы.

Для вычисления концентрационной зависимости спиновых корреляторов заменим в спектре $\Omega_q$ поляризационный оператор $\Pi_q$ его средним значением по зоне Бриллюэна $\Pi$. Далее примем во внимание, что определенная выражением (23) щель $\Delta_Q(\Pi)$ при $q = Q \equiv (\pi, \pi)$ линейно связана с обратной магнитной корреляционной длиной $\xi^{-1}$. Согласно экспериментальным данным по нейтронному рассеянию и ядерному магнитному резонансу (см., например, [41, 42]), величина $\xi^{-1}$ зависит от допирования $x$ и для лантановых сверхпроводников возрастает в несколько раз при увеличении $x$ в интервале $0.03 \div 0.3$. В соответствии с этими данными, для каждого уровня допирования $x$ значение усредненного поляризационного оператора $\Pi$ подбирается нами таким образом, чтобы спиновая щель увеличивалась в 2.5 раза при увеличении $x$ от 0.03 до 0.3.

**5. Однопетлевое приближение для массового оператора.** Вклады первого порядка по параметру обменного взаимодействия $J$ в массовый оператор (13) равны нулю, поскольку спиновая система находится в фазе квантовой спиновой жидкости. Первые отличные от нуля вклады возникают во втором порядке и графически изображаются однопетлевыми диаграммами, представленными на рис. 1. На этих диаграммах, согласно общим правилам [13, 31],

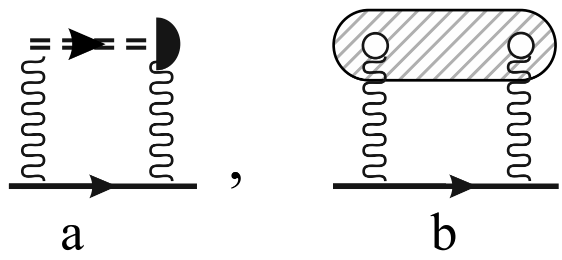


Рис. 1. Однопетлевые диаграммы для массового оператора

сплошной линии со стрелкой сопоставляется функция Грина невзаимодействующих дырок $G_k^{(0)}(i\omega_m)$. Каждой волнистой линии отвечает параметр взаимодействия $J$, причем происхождение волнистой линии со светлым кружком связано с продольным спин-фермионным взаимодействием, а происхождение волнистой линии без кружка – с поперечным взаимодействием. Двойная штриховая линия с черным полукругом обозначает спиновую функцию Грина $D_{++}(q, i\omega_l) = G_{++}(q, i\omega_l)P(q, i\omega_l)$, причем штриховая линия соответствует пропагатору $G_{++}(q, i\omega_l)$, а полукруг — концевому множителю $P(q, i\omega_l)$. Заштрихованному овалу на второй диаграмме ставится в соответствие фурье-образ функции Грина

$$D_{zz}(f\tau; f'\tau') = -\langle T_\tau S_f^z(\tau) S_{f'}^z(\tau')\rangle. \qquad (25)$$

Каждой тройной вершине сопоставляются два множителя $\nu_q$: один из множителей отвечает входящей фермиевской функции Грина $G_q^{(0)}(i\omega_m)$, другой — выходящей. Во всех вершинах выполняется закон сохранения импульса и частоты.

Поскольку вследствие SU(2)-инвариантности основного состояния спиновой подсистемы должно выполняться равенство

$$D_{zz}(q, i\omega_l) = \frac{1}{2} D_{++}(q, i\omega_l), \qquad (26)$$

аналитические выражения для однопетлевых диаграмм, обозначенных на рис. 1 посредством “a” и “b”, можно записать в виде

$$\Sigma^{(a)}(k, i\omega_m) = -J_{kk}\bar{Y}_k(i\omega_m), \qquad (27)$$

$$\Sigma^{(b)}(k, i\omega_m) = -\frac{1}{2} J_{kk}\bar{Y}_k(i\omega_m), \qquad (28)$$

где

$$\bar{Y}_k(i\omega_m) = \frac{T}{N}\sum_{p,n} J_{k-p,k-p} G_{k-p}^{(0)}(i\omega_{m-n}) D_{++}(p, i\omega_n).$$

Энергетический спектр спин-поляронных квазичастиц определяется полюсами запаздывающей функции Грина, получаемой в результате аналитического продолжения мацубаровской функции Грина (11), которое в данном случае осуществляется на основе аппроксимантов Паде [43]. Рассчитанный в однопетлевом приближении для массового оператора (13) спектр изображен на рис. 2 черными кривыми. Для сравнения на этом же рисунке синими и зелеными кривыми показан затравочный спектр “голых” дырок подсистемы ионов кислорода.

Обратим внимание на две важные особенности спин-поляронного спектра на рис. 2, которые отмечались ранее авторами [18, 19], изучавшими энергетическую структуру спин-поляронных квазичастиц в рамках СФМ на основе проекционной техники Цванцига–Мори [25, 26]. Первая особенность связана со значительным понижением (почти на 2 эВ) энергии спин-поляронных состояний за счет сильной связи кислородных дырок со спиновой подсистемой. Для малых значений допирования, характерных для купратных сверхпроводников, заселенными оказываются как раз состояния, отвечающие дну нижней зоны на рис. 2. Вторая особенность представленного спектра заключается в формировании локального минимума в окрестности точки $(\pi/2, \pi/2)$ зоны Бриллюэна. Именно эта особенность приводит к характерной форме поверхности Ферми в слабодопированных купратах в виде дырочного кармана.

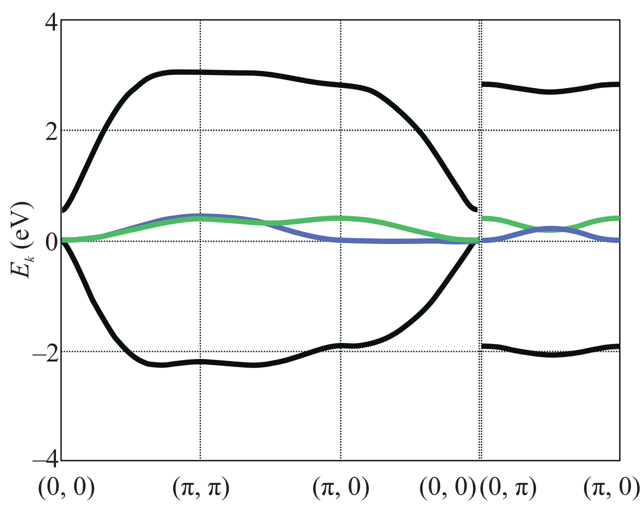


Рис. 2. Энергетический спектр спиновых поляронов (черные кривые), рассчитанный в однопетлевом приближении. Синие и зеленые кривые изображают затравочный спектр дырок подсистемы кислорода

**6. Приближение лестничных диаграмм для массового оператора.** Недостатком спин-поляронного спектра на рис. 2 является отсутствие третьей важнейшей особенности, отмечавшейся

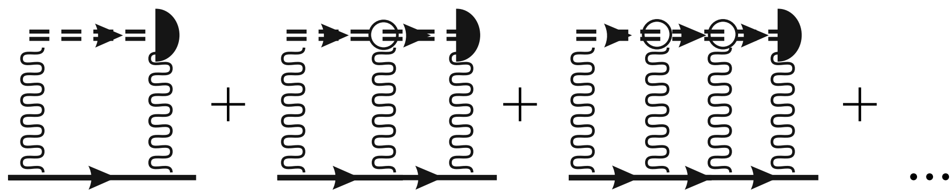

Рис. 3. Ряд из лестничных диаграмм, учитывающих процессы многократного рассеяния дырок на локализованных спинах

авторами [18, 19] и заключающейся в отщеплении нижней спин-поляронной зоны от зоны затравочных дырочных состояний на величину щели порядка 1–2 эВ.

В недавней работе [29] в рамках пучковой диаграммной техники было показано, что щель между нижней спин-поляронной зоной и верхней затравочной зоной возникает при учете процессов многократного рассеяния дырок на одном и том же локализованном спине подсистемы меди. В рамках используемого нами подхода, основанного на диаграммной технике для спиновых операторов, такого рода процессы содержатся, среди прочих, в бесконечной последовательности лестничных диаграмм, изображенной на рис. 3. Можно заметить, что эта последовательность начинается с диаграммы "а" на рис. 1, к которой прибавляются диаграммы, возникающие из "а" путем добавления линий продольных взаимодействий. Благодаря отмечавшемуся в п. 2 расщепленному характеру функции спин-фермионного взаимодействия $J_{kq}$, аналитические вклады для членов ряда на рис. 3 нетрудно просуммировать и получить выражение для соответствующей собственно энергетической части

$$\Sigma^{(A)}(k, i\omega_m) = \frac{-J_{kk}\bar{Y}_k(i\omega_m)}{1 - Y_k(i\omega_m)}, \tag{29}$$

где

$$Y_k(i\omega_m) = \frac{T}{N}\sum_{p,n} J_{k-p,k-p} G^{(0)}_{k-p}(i\omega_{m-n}) G_{++}(p, i\omega_n).$$

Энергетический спектр спиновых поляронов, рассчитанный в лестничном приближении, в котором массовый оператор аппроксимируется суммой собственно энергетических частей $\Sigma^{(A)}$ (29) и $\Sigma^{(b)}$ (28), представлен на рис. 4. Из сравнения спектра на рис. 2, полученного в однопетлевом приближении, со спектром на рис. 4 следует качественное отличие, которое заключается в отщеплении зоны спин-поляронных квазичастиц от зоны "голых" дырок на величину 1 эВ. Кроме этого, на рис. 4 в окрестности нуля возникает третья зона со слабой дисперсией, которая отсутствует на рис. 2.

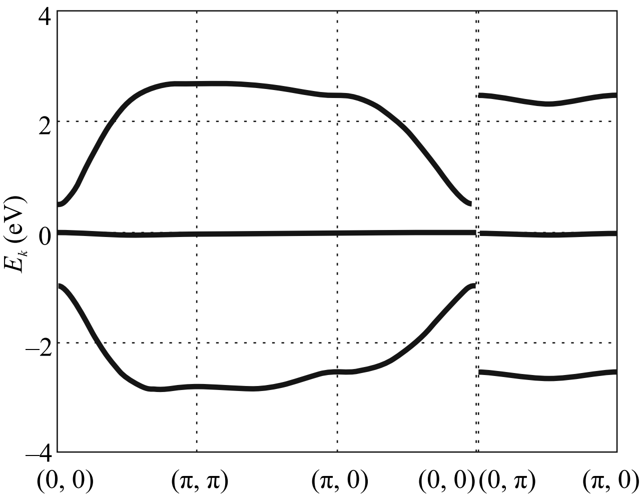


Рис. 4. Энергетический спектр спиновых поляронов, рассчитанный в лестничном приближении

**7. Заключение.** В работе концепция спинового полярона в купратных сверхпроводниках впервые реализована на основе диаграммной техники для фермиевских и спиновых операторов. На основе рассмотрения дырочной и спиновой подсистем на $CuO_2$-плоскости в рамках спин-фермионной модели выделен минимальный набор однопетлевых и лестничных диаграмм для собственно энергетической части фермионной функции Грина, необходимый для воспроизведения наиболее важных особенностей спектра спин-поляронных квазичастиц. Показано, что для значительного понижения энергии спин-поляронных квазичастиц и формирования локального минимума энергетического спектра в окрестности точки $(\pi/2, \pi/2)$ зоны Бриллюэна достаточно учитывать лишь однопетлевые диаграммы. Однако для получения энергетической щели между нижней ветвью спин-поляронных состояний и верхними ветвями кислородных дырок необходим учет лестничных диаграмм для массового оператора фермионной функции Грина. В результате такого учета достигается хорошее качественное согласие спин-поляронного спектра, полученного на основе диаграммного подхода, с результатами предыдущих работ, в которых энергетическая структура спин-поляронных квазичастиц изучались в рамках проекционной техники Цванцига–Мори. Ожидается, что развитый в работе подход послужит эффективным инструментом при описании псевдощелевой фазы купратных сверхпроводников, носителями тока в которых выступают спин-поляронные квазичастицы.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты # 18-02-00837 и # 20-32-70059).

---

1. A. F. Barabanov, R. O. Kuzian, and L. A. Maksimov, Phys. Rev. B **55**, 4015 (1997).
2. А. Ф. Барабанов, О. В. Уразаев, А. А. Ковалев, Л. А. Максимов, Письма в ЖЭТФ **68**, 386 (1998).
3. А. Ф. Барабанов, А. В. Михеенков, А. М. Белемук, Письма в ЖЭТФ **75**, 118 (2002).
4. В. В. Вальков, Д. М. Дзебисашвили, М. М. Коровушкин, А. Ф. Барабанов, УФН **191**, 673 (2021).
5. M. Vojta, Adv. Phys. **58**, 699 (2009).
6. B. Keimer, S. A. Kivelson, M. R. Norman, S. Uchida, and J. Zaanen, Nature **518**, 179 (2015).
7. N. Plakida, *High-Temperature Cuprate Superconductors: Experiment, Theory, and Applications*, Springer, Dordrecht (2010).
8. Н. М. Плакида, Л. Антон, С. Адам, Г. Адам, ЖЭТФ **124**, 367 (2003).
9. А. А. Владимиров, Д. Иле, Н. М. Плакида, ТМФ **152**, 538 (2007).
10. Ю. А. Изюмов, УФН **165**, 403 (1995).
11. Ю. А. Изюмов, УФН **167**, 465 (1997).
12. М. В. Еремин, С. Г. Соловьянов, С. В. Варламов, ЖЭТФ **112**, 1763 (1997).
13. В. В. Вальков, С. Г. Овчинников, *Квазичастицы в сильно коррелированных системах*, изд-во СО РАН, Новосибирск (2001).
14. L. A. Maksimov, R. Hayn, and A. F. Barabanov, Phys. Lett. A **238**, 288 (1998).
15. Ю. А. Изюмов, Ю. Н. Скрябин, *Базовые модели в теории ферромагнетизма*, изд-во УрО РАН, Екатеринбург (2002).
16. В. В. Вальков, М. М. Коровушкин, А. Ф. Барабанов, Письма в ЖЭТФ **88**, 426 (2008).
17. А. Ф. Барабанов, Л. А. Максимов, Г. В. Уймин, Письма в ЖЭТФ **47**, 532 (1988).
18. А. Ф. Барабанов, А. А. Ковалев, О. В. Уразаев, А. М. Белемук, Р. Хайн, ЖЭТФ **119**, 777 (2001).
19. Д. М. Дзебисашвили, В. В. Вальков, А. Ф. Барабанов, Письма в ЖЭТФ **98**, 596 (2013).
20. V. V. Val'kov, D. M. Dzebisashvili, and A. F. Barabanov, Phys. Lett. A **379**, 421 (2015).
21. В. В. Вальков, Д. М. Дзебисашвили, М. М. Коровушкин, А. Ф. Барабанов, Письма в ЖЭТФ **103**, 433 (2016).
22. V. V. Val'kov, D. M. Dzebisashvili, M. M. Korovushkin, and A. F. Barabanov, J. Low Temp. Phys. **191**, 408 (2018).
23. V. J. Emery, Phys. Rev. Lett. **58**, 2794 (1987).
24. C. M. Varma, S. Schmitt-Rink, and E. Abrahams, Solid State Commun. **62**, 681 (1987).
25. R. Zwanzig, Phys. Rev. **124**, 983 (1961).
26. H. Mori, Prog. Theor. Phys. **33**, 423 (1965).
27. Ю. А. Церковников, ТМФ **49**, 219 (1981).
28. D. M. Dzebisashvili and K. K. Komarov, Eur. Phys. J. B **91**, 278 (2018).
29. V. V. Val'kov, V. A. Mitskan, M. M. Korovushkin, D. M. Dzebisashvili, and A. F. Barabanov, J. Low Temp. Phys. **197**, 34 (2019).
30. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, Физматгиз, М. (1962).
31. Ю. А. Изюмов, Ф. А. Коссан-Оглы, Ю. Н. Скрябин, *Полевые методы в теории ферромагнетизма*, Наука, М. (1974).
32. Р. О. Зайцев, В. А. Иванов, ФТТ **29**, 2554 (1987).
33. P. Prelovšek, Phys. Lett. A **126**, 287 (1988).
34. J. Zaanen and A. M. Oleś, Phys. Rev. B **37**, 9423 (1988).
35. E. B. Stechel and D. R. Jennison, Phys. Rev. B **38**, 4632 (1988).
36. V. J. Emery and G. Reiter, Phys. Rev. B **38**, 4547 (1988).
37. H. Matsukawa and H. Fukuyama, J. Phys. Soc. Jpn. **58**, 2845 (1989).
38. B. S. Shastry, Phys. Rev. Lett. **63**, 1288 (1989).
39. Д. Ф. Дигор, В. А. Москаленко, ТМФ **130**, 320 (2002).
40. В. В. Вальков, Д. М. Дзебисашвили, А. Ф. Барабанов, ТМФ **191**, 319 (2017).
41. B. Keimer, N. Belk, R. J. Birgeneau, A. Cassanho, C. Y. Chen, M. Greven, M. A. Kastner, A. Aharony, Y. Endoh, R. W. Erwin, and G. Shirane, Phys. Rev. B **46**, 14034 (1992).
42. V. Barzykin and D. Pines, Phys. Rev. B **52**, 13585 (1995).
43. H. J. Vidberg and J. W. Serene, J. Low Tem. Phys. **29**, 179 (1977).