Письма в ЖЭТФ, том 124, вып. 8, с. 637 – 644 © 2026 г. 25 октября

Обменное взаимодействие в соединениях Мотта–Хаббарда с сильным электрон-фононным взаимодействием

Е. И. Шнейдер[+1)], *А. В. Дударев*[+], *С. В. Николаев*[+*], *С. Г. Овчинников*[+*]

[+]*Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения РАН, 660036 Красноярск, Россия*

[*]*Сибирский федеральный университет, 660041 Красноярск, Россия*

Поступила в редакцию 12 августа 2026 г.
После переработки 14 сентября 2026 г.
Принята к публикации 15 сентября 2026 г.

Предложен подход к описанию эффективного обменного взаимодействия в системах с сильными электронными корреляциями и сильным электрон-фононным взаимодействием. Для реалистичного гамильтониана, включающего электрон-фононное взаимодействие в рамках теории сильной связи, выполнена редукция к низкоэнергетическому спиновому гамильтониану поляронов типа t-J-модели. Показано, что кооперативные эффекты кулоновского отталкивания и взаимодействия носителей заряда с колебаниями решетки приводят к немонотонной эволюции обменного параметра как функции параметров электрон-фононной связи: в пространстве параметров обнаружены области усиления и подавления обмена, характеризующиеся как плавными, так и резкими изменениями. Это свидетельствует о нетривиальной роли электрон-фононного взаимодействия в формировании фазовых диаграмм коррелированных материалов и необходимости учета кооперативных эффектов для понимания и управления их магнитными свойствами.

DOI: 10.7868/S3034576626100195

1. Введение. Ключевым элементом для понимания и прогнозирования магнитных свойств материалов является оценка межатомных обменных взаимодействий. Эти фундаментальные квантово-механические величины обусловлены совместным действием кулоновского отталкивания фермионов и принципа Паули. Как следствие, их знаки и сила зависят от деталей электронной структуры соединения и геометрии расположения атомов. В системах с сильными электронными корреляциями, для которых характерно переплетение зарядовых, спиновых, орбитальных и решеточных степеней свободы, задача осложняется кооперативными эффектами кулоновского и электрон-фононного взаимодействий (ЭФВ). В настоящей работе представлен метод оценки обменного взаимодействия с учетом таких эффектов на примере соединений 3d-металлов. Показано, что в пространстве параметров, характеризующих различные каналы электрон-фононной связи, эффективное обменное взаимодействие демонстрирует немонотонное поведение: на фазовой диаграмме присутствуют области подавления и усиления обмена, области плавных и резких изменений, включая полное подавление. Такая нетривиальная эволюция указывает на необходимость дальнейших исследований роли кооперативных эффектов электрон-фононного и кулоновского взаимодействий в механизмах нетрадиционной сверхпроводимости, а также подходов к управлению спиновым упорядочением и коллективными спиновыми возбуждениями в системах с сильными электронными корреляциями.

Большинство методов определения параметров обменного взаимодействия опираются на построение релевантного спинового гамильтониана, который служит связующим звеном между микроскопическими моделями и измеряемыми величинами. Экспериментальные подходы строятся на анализе свойств, чувствительных к обмену (магнитная восприимчивость, намагниченность, температура Нееля, теплоемкость, спектр магнонов) и описываемых в рамках модельных спиновых гамильтонианов. Среди теоретических подходов следует выделить методы полной энергии и линейного отклика [1]. В первом – оценивается разница полных энергий системы для различных магнитных конфигураций, полученная в рамках самосогласованных расчетов из первых принципов; параметры обмена извлекаются путем отображения этой разницы энергий на спиновый гамильтониан (например, методы Least-Squares Total Energy и Four-State Total Energy). Во втором случае исследуется линейный отклик системы на бесконечно малое отклонение спина от равновесной конфигурации. В

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

работах [2–5] показано, что подход, использующий метод функций Грина и базирующийся на теореме о магнитных силах, эффективен для сложных систем с большим количеством атомов в ячейке и может быть обобщен на случай учета сильных электронных корреляций и ЭФВ в рамках теорий функционала плотности и динамического среднего поля. Наконец, в системах с сильными электронными корреляциями эффективные обменные параметры могут быть получены путем последовательной редукции микроскопической модели (например, pd-модели Эмери или модели Хаббарда) к низкоэнергетическому спиновому гамильтониану с помощью теории возмущений и проекционных методов. В представленной работе такая редукция выполнена для реалистичного многозонного гамильтониана коррелированного соединения с сильным взаимодействием носителей заряда с колебаниями решетки.

2. Модель и многочастичный подход. Базовой моделью сильно коррелированных электронных систем служит однозонная модель Хаббарда. Стандартным методом построения более реалистичных гамильтонианов является проекция зонной структуры, полученной из первых принципов, на локализованные функции Ванье в выбранном орбитальном базисе. В настоящей работе электронная структура материала рассматривается на основе трехзонной pd-модели Эмери, актуальной для оксидов переходных металлов с незаполненной 3d-оболочкой. Эффекты электрон-фононного взаимодействия вводятся в духе теории сильной связи, что оправдано в режиме формирования малых поляронов.

$$
\begin{aligned}
H_{\mathrm{tot}} = \sum_{g,l,\sigma} \Bigg[& \sum_{\alpha} \left(\varepsilon_\alpha n^{\alpha}_{g_\alpha,\sigma} + \frac{1}{2} U_\alpha n^{\alpha}_{g_\alpha,\sigma} n^{\alpha}_{g_\alpha,\bar{\sigma}} \right) + \\
& + \sum_{g',l'} P_{p_l,p_{l'}} t_{pp} \left(p^{\dagger}_{g_l,\sigma} p_{g'_{l'},\sigma} + \mathrm{H.c.} \right) + \\
& + P_{p_l,d} t_{pd} \left(d^{\dagger}_{g,\sigma} p_{g_l,\sigma} + \mathrm{H.c.} \right) + \sum_{\sigma'} V_{pd} n^{p}_{g_l,\sigma} n^{d}_{g,\sigma'} \Bigg] + \\
& + \sum_{g,l,\sigma} M_d P^{d}_{p_l} u_{g_l} n^{d}_{g,\sigma} + \\
& + \sum_{g,l,\sigma} M_{pd} \left(P^{pd}_{p_l} P_{p_l,d} u_{g_l} d^{\dagger}_{g,\sigma} p_{g_l,\sigma} + \mathrm{H.c.} \right) + \\
& + \sum_{g,l} \frac{m}{2} \left(\dot{u}^2_{g_l} + \omega^2 u^2_{g_l} \right). \qquad (1)
\end{aligned}
$$

Здесь индекс α перечисляет атомные орбитали, составляющие базис модели: $\alpha = d_{x^2-y^2}, p_x, p_y$; индекс g нумерует узлы квадратной решетки с периодом a, индекс l – атомы кислорода в элементарной ячейке; $g_\alpha = g$ для $\alpha = d_{x^2-y^2}$ и $g_\alpha = g_l$ для $\alpha = p_{x(y)}$. Позиции атомов меди и кислорода задаются векторами $\mathbf{R}_g$ и $\mathbf{R}_g + \mathbf{r}_l$ соответственно. В симметризованной элементарной ячейке $\mathbf{r}_l = \pm a\mathbf{n}_{x(y)}/2$. Операторы $d^{\dagger}_{g,\sigma}$ и $p^{\dagger}_{g_l,\sigma}$ описывают рождение дырки со спином σ на d- и p-орбиталях, $n^{\alpha}_{g,\sigma}$ – операторы числа частиц. Величины ε_α определяют локальные атомные энергии, отсчитанные от уровня химического потенциала μ; U_α и V_{pd} – матричные элементы кулоновского отталкивания; t_{pd} и t_{pp} – интегралы перекрытия указанных орбиталей. Фазовые множители $P^{d}_{p_l}$ и $P^{pd}_{p_l}$ равны $+1$ или -1 в зависимости от того, одинаковый или противоположный знак имеют орбитали с действительными волновыми функциями в области перекрытия. Выбор фаз кислородных орбиталей в CuO_4 плакете соответствует неприводимому представлению B_{1g} точечной группы D_{4h} и определяет симметризованную комбинацию орбиталей, которая гибридизуется с медной $d_{x^2-y^2}$-орбиталью в низкоэнергетическом секторе.

В процессах обмена энергией между носителями заряда и колебаниями решетки в гамильтониане (1) учтены основные каналы, связанные с модуляцией параметров перескока t_{pd} и локальной энергии дырок на атомах меди ε_d при смещениях u_{g_l} атомов кислорода относительно их равновесных позиций. Смещениями более тяжелых атомов меди мы пренебрегаем. Дальнейшее упрощение связано с тем, что рассматриваются только полносимметричные колебания атомов кислорода с частотой ω, не зависящей от волнового вектора. Соответствующие матричные элементы взаимодействия на узле – M_{pd} и M_d. Поляризационные коэффициенты $P^{d}_{p_l}$ и $P^{pd}_{p_l}$ учитывают относительную фазу движения атомов кислорода в дыхательной планарной моде и принимают значения ± 1. Для удобства мы используем ниже безразмерный параметр электрон-фононного взаимодействия: $\lambda_{H(P)} = M^2_{d(pd)} \big/ W\hbar\omega$, где W – ширина зоны проводимости для случая $M_{d(pd)} = 0$. Предложенная модель достаточна для демонстрации кооперативных эффектов кулоновских и электрон-фононных взаимодействий в многозонной системе. Учет дополнительных электрон-фононных, спин-орбитальных или других вкладов не представляет технических сложностей.

Естественным математическим языком для описания свойств системы, задаваемой гамильтонианом (1), является представление операторов Хаббарда [6]. Этот формализм позволяет адекватно учитывать многоканальную природу сложных квазичастичных возбуждений, которые нарушают

картину ферми-жидкости и не сводятся к сумме эффектов отдельно взятых сильных взаимодействий. Переход к X-операторам осуществляется в рамках обобщенного метода сильной связи, где гамильтониан (1) может быть переписан в узельном представлении как сумма внутрикластерных (CuO_4) и межкластерных вкладов: $H_{\rm tot} = H_c + H_{cc}$. С этой целью выполняется симметризация исходного базиса с помощью унитарных преобразований в импульсном пространстве, которые вводят новые блоховские операторы "канонических фермионов" [6–9] и "канонических бозонов" [10, 11]. Их определение для приведенного гамильтониана подробно описано ранее. Обратное преобразование Фурье локализует операторы на узлах кристаллической решетки. Учет внутриячеечных позиций атомов при переходе от атомного базиса к узловому приводит к перенормировкам исходных матричных элементов структурными факторами, которые быстро затухают с увеличением расстояния между узлами.

Следующий шаг включает точную диагонализацию эффективного гамильтониана кластера элементарной ячейки. Процедура выполняется для каждого сектора гильбертова пространства с числом дырок $n_h = 0, 1, 2$ на узел и определяет набор собственных состояний $\{|0i\rangle, |\sigma j\rangle, |2l\rangle\}$, пронумерованных индексами i, j, l. Отметим, что структура поляронных состояний [11] для заданного сектора представляет собой суперпозицию соответствующих электронных конфигураций, каждая из которых одета фононным облаком с разным распределением амплитуд по числу фононов. Диагонализация сопровождается контролируемым усечением высокоэнергетических состояний с минимальным спектральным весом. Такое усечение гильбертова пространства гарантирует, что энергии основного и первых возбужденных состояний сходятся с погрешностью менее 1 % для всех конфигураций, сохраняя при этом существенные спектральные характеристики.

Используя полный набор многочастичных собственных состояний $|q\rangle$, можно представить любой оператор A_g в виде линейной комбинации операторов Хаббарда: $A_g = \sum\limits_{q,q'} |q\rangle \langle q| A_g |q'\rangle \langle q'| = \sum\limits_{q,q'} \gamma_{A,q,q'} X_g^{q,q'}$. Здесь индексы q, q' нумеруют собственные состояния и учитывают все необходимые квантовые числа, матричный элемент $\gamma_{A,qq'} = \langle q | A_{\mathbf{g}} | q' \rangle$ описывает вероятность перехода из начального состояния $|q'\rangle$ в конечное $|q\rangle$ под действием оператора A_g.

Формально описанная процедура перехода к новому представлению является точной при условии сохранения полного базиса поляронных состояний и полного учета перенормированных структурными факторами параметров гамильтониана. Быстрое затухание последних с расстоянием позволяет ограничиться локальной частью перенормированных взаимодействий U_p, V_{pd} и M_d, M_{pd}. Межкластерные вклады остаются существенными в отдельных физических контекстах, например, при определении дисперсии фононных возбуждений [12] или анализе роли кулоновского взаимодействия в нефононных механизмах сверхпроводимости [13, 14]. Тем не менее в $3d$-оксидах с сильно локализованными состояниями и значительной электрон-решеточной связью это приближение оправдано и, в отличие от адиабатических или антиадиабатических приближений, позволяет исследовать поляронные эффекты в обменном взаимодействии, учитывая кулоновские и электрон-колебательные взаимодействия на равной основе. Исходный гамильтониан (1) в таком случае принимает вид обобщенной модели Хаббарда:

$$H = \sum_{g,q} E_q X_g^{q,q} + \sum_{g \neq g'} \sum_{Q_\sigma, Q'_\sigma, \sigma} T_{gg'}^{Q_\sigma Q'_\sigma} X_g^{\dagger Q_\sigma} X_{g'}^{Q'_\sigma} \quad (2)$$

с коэффициентами

$$\begin{gathered} T_{gg'}^{Q_\sigma Q'_\sigma} = t_{gg'}^{pp} \Gamma_{Q_\sigma Q'_\sigma}^{pp} + t_{gg'}^{pd} \Gamma_{Q_\sigma Q'_\sigma}^{pd}, \\ \Gamma_{Q_\sigma Q'_\sigma}^{pp} = \gamma_{\tilde{p}_\sigma, Q_\sigma}^{\dagger} \gamma_{\tilde{p}_\sigma, Q'_\sigma}, \\ \Gamma_{Q_\sigma Q'_\sigma}^{pd} = \gamma_{d_\sigma, Q_\sigma}^{\dagger} \gamma_{\tilde{p}_\sigma, Q'_\sigma} + \gamma_{\tilde{p}_\sigma, Q_\sigma}^{\dagger} \gamma_{d_\sigma, Q'_\sigma}, \end{gathered} \quad (3)$$

где E_q – энергия многочастичного собственного состояния кластера $|q\rangle$. Операторы, полученные в результате канонических преобразований гамильтониана (1), отмечены тильдой. Перенормированные структурными факторами параметры имеют вид: $t_{gg'}^{pd} = -2t_{pd}\mu_{gg'}$, $t_{gg'}^{pp} = -2t_{pp}\nu_{gg'}$, коэффициенты $\mu_{gg'}$ и $\nu_{gg'}$ являются Фурье-трансформантами функций $\mu_{\mathbf{k}} = \sqrt{s_{x,\mathbf{k}}^2 + s_{y,\mathbf{k}}^2}$ и $\nu_{\mathbf{k}} = 4s_{x,\mathbf{k}}^2 s_{y,\mathbf{k}}^2 \Big/ \mu_{\mathbf{k}}^2$, соответственно, $s_{x(y),\mathbf{k}} = \sin\left(k_{x(y)} a_{x(y)}/2\right)$. Составной индекс Q_σ перебирает все пары собственных состояний кластера, для которых оператор $X_g^{Q_\sigma}$ описывает уничтожение дырки со спином σ на узле g: $Q_\sigma = \{(0i, \sigma j), (\bar{\sigma} j, 2l)\}$ и $\bar{\sigma} = -\sigma$.

3. Низкоэнергетический спиновый гамильтониан. С помощью операторной теории возмущений, реализованной в форме канонического преобразования Шриффера–Вольфа [15] или на основе техники проекционных операторов [16], исходный гамильтониан $H_{\rm tot}$ может быть редуцирован к модели эффективного обменного взаимодействия, действующей в низкоэнергетическом секторе. Переход к многочастичному представлению операторов Хаб-

барда (2) позволяет естественным образом обобщить процедуру [16] на произвольные энергетические спектры системы с сильными электронными корреляциями. Аналогичный подход, например, был реализован ранее при исследовании вклада оптически возбужденных многоэлектронных состояний в сверхобменное взаимодействие в изоляторах Мотта–Хаббарда [17].

Следуя работе [16], введем проекционные операторы. Для пары обменно-связанных узлов g, g' проектор на подпространство состояний, не содержащее двухполяронных конфигураций, имеет вид:

$$p_L = \prod_{f=g,g'} \left(\sum_i X_f^{0i,0i} + \sum_{\sigma j} X_f^{\sigma j,\sigma j} \right).$$

Проектор на подпространство l состояний двухполяронных конфигураций запишем как $p_H = \sum\limits_l p_{H_l}$, где

$$p_{H_l} = \left(X_g^{2l,2l} + X_{g'}^{2l,2l} - X_g^{2l,2l} \sum_{l'} X_{g'}^{2l',2l'} \right).$$

Легко проверить, что введенные проекционные операторы удовлетворяют необходимым условиям ортогональности и полноты. Определим гамильтониан обменно-связанной пары $h_{gg'}$ такой, что $H = \sum_{\langle gg' \rangle} h_{gg'}$ и $h_{gg'} = h_{gg'}^{in} + h_{gg'}^{out}$, где $h_{gg'}^{in} = p_L h_{gg'} p_L + p_H h_{gg'} p_H$ и $h_{gg'}^{out} = p_L h_{gg'} p_H + p_H h_{gg'} p_L$. Проекционные операторы выделяют в гамильтониане $h_{gg'}$ диагональные в блочном смысле части, соответствующие группам нижних и верхних хаббардовских подзон поляронов. В общем случае эти блоки не являются диагональными матрицами, если соответствующая группа содержит более одного канала перехода. Представим гамильтониан пары как $h_{gg'}(\epsilon) = h_{gg'}^{in} + \epsilon h_{gg'}^{out}$ и найдем оператор $\hat{S}$ такой, что канонически преобразованный гамильтониан $\tilde{h}_{gg'}(\epsilon) = e^{\epsilon \hat{S}} h_{gg'}(\epsilon) e^{-\epsilon \hat{S}}$ не содержит члена, линейного по ϵ. Условие исключения соответствующего вклада имеет вид: $h_{gg'}^{out} + \left[\hat{S}, h_{gg'}^{in} \right] = 0$, откуда получим

$$\hat{S} = \sum_{ijj'l} \sum_{\sigma} \left\{ \frac{T_{gg'}^{\bar{\sigma} j',2l;0i,\sigma j}}{\Delta_{ijj'l}} X_g^{2l,\bar{\sigma} j'} X_{g'}^{0i,\sigma j} - \frac{T_{gg'}^{0i,\sigma j;\bar{\sigma} j',2l}}{\Delta_{ijj'l}} X_g^{\sigma j,0i} X_{g'}^{\bar{\sigma} j',2l} \right\}, \quad (4)$$

где $\Delta_{ijj'l} = (E_{0i} + E_{2l}) - (E_{\bar{\sigma} j'} + E_{\sigma j})$ – энергия переноса заряда. Ограничиваясь в разложении $\tilde{h}_{gg'}(\epsilon)$ вторым порядком по параметру ϵ, получим выражение для эффективного гамильтониана: $\tilde{h}_{gg'} = \tilde{h}_{gg'}(\epsilon = 1) = h_{gg'}^{in} + \frac{1}{2} \left[\hat{S}, h_{gg'}^{out} \right]$. С учетом уравнения (4) и эквивалентности гамильтонианов всех обменно-связанных пар вычислим полный эффективный гамильтониан $\tilde{H} = \sum_{\langle gg' \rangle} \tilde{h}_{gg'}$. Для группы нижних хаббардовских зон низкоэнергетическая поляронная t-J-модель имеет вид:

$$\tilde{H}_L = \sum_{g,ij} \left(E_{0i} X_g^{0i,0i} + \sum_{\sigma} E_{\sigma,j} X_g^{\sigma j,\sigma j} \right) + \sum_{\langle gg' \rangle \sigma} \sum_{ii'jj'} T_{gg'}^{0i,\sigma j;0i',\sigma j'} X_g^{\sigma j,0i} X_{g'}^{0i',\sigma j'} + H_S, \quad (5)$$

для группы верхних хаббардовских зон получим

$$\tilde{H}_H = \sum_{g,l} E_{2l} X_g^{2l,2l} + \sum_{\langle gg' \rangle \sigma} \sum_{ll'jj'} T_{gg'}^{\bar{\sigma} j,2l;\bar{\sigma} j',2l'} X_g^{2l,\bar{\sigma} j} X_{g'}^{\bar{\sigma} j',2l'} + H_S. \quad (6)$$

Здесь H_S – гамильтониан эффективного обменного взаимодействия поляронных квазичастиц, записанный через обобщенные спиновые операторы. В общем случае $\mathbf{S}_g = \sum_{jj'} \mathbf{S}_g^{jj'}$ с компонентами $S_g^+ = \sum_{jj'} \gamma_{S^+,jj'} X_g^{\uparrow j,\downarrow j'}$, $S_g^- = \sum_{jj'} \gamma_{S^-,jj'} X_g^{\downarrow j,\uparrow j'}$ и $S_{g,jj'}^z = \sum_{jj'} \left(\gamma_{S^z,\uparrow j,\uparrow j'} X_g^{\uparrow j,\uparrow j'} + \gamma_{S^z,\downarrow j,\downarrow j'} X_g^{\downarrow j,\downarrow j'} \right)$. Для процессов, не меняющих поляронное состояние на узле, $j = j'$ и коэффициенты разложения могут быть вычислены явно $\gamma_{S^{+(-)},jj} = 1$, $\gamma_{S^z,\uparrow j,\uparrow j'} = \frac{1}{2}$, $\gamma_{S^z,\downarrow j,\downarrow j} = -\frac{1}{2}$. Аналогичные рассуждения имеют место для обобщенных операторов числа частиц. Тогда $\mathbf{S}_g^{jj'} = \mathbf{S}_g^j$, $n_g^{jj'} = n_g^j$ и гамильтониан H_S сводится к виду:

$$H_S = \sum_{\langle gg' \rangle} \sum_{jj'} J_{gg'}^{jj'} \left(\mathbf{S}_g^j \mathbf{S}_{g'}^{j'} - \frac{1}{4} n_g^j n_{g'}^{j'} \right), \quad (7)$$

с параметром обменного взаимодействия

$$J_{gg'}^{jj'} = \sum_{il} 2 \frac{T_{gg'}^{0i,\sigma j;\bar{\sigma} j',2l} T_{g'g}^{\bar{\sigma} j',2l;0i,\sigma j}}{\Delta_{ijj'l}}. \quad (8)$$

Входящие в уравнение (8) эффективные квазичастичные перескоки определены выражениями (3), энергия переноса заряда $\Delta_{ijj'l}$ приведена в пояснениях к уравнению (4), индексы g и g' соответствуют ближайшим узлам. Дальнейший анализ опускает как узельные, так и межузельные экситон-подобные процессы, при которых $j \neq j'$. При выводе уравнений (5) и (6) также отброшены трехцентровые коррелированные слагаемые, имеющие один порядок величины с параметром обмена.

4. Расчеты и анализ. Структурно эффективное обменное взаимодействие (8) подобно параметру обмена, получаемому при редукции классической модели Хаббарда к t-J-модели в пределе $t \ll U$. Однако уже при нулевом вкладе решетки очевидны существенные отличия: эффективный перескок $T^{Q_\sigma Q'_\sigma}_{gg'}$ учитывает как межзонный вклад, пропорциональный параметру t_{pd}, так и внутризонный t_{pp}. Первый описывает суперобменное взаимодействие между соседними спинами ионов 3d-металла через промежуточный ион лиганда, второй – обменное взаимодействие через подвижные носители, что делает его особенно важным в допированных системах. Суммарный вклад каналов не является аддитивным, более того, пренебрежение механизмом, связанным с перескоком t_{pp}, сопровождается [18] значительным занижением величины обменного взаимодействия. Учет поляронных эффектов решетки приводит к перенормировкам параметров электронной структуры, а также к созданию новых каналов обмена через возбужденные поляронные состояния. Вклад последних особенно важен в специфических режимах взаимодействия, где наблюдается сгущение поляронных уровней: вблизи квантовых фазовых переходов, в кроссоверной области сильной связи, а также у порога некогерентного континуума [11, 19–21]. Эффективное обменное взаимодействие в многозонной коррелированной системе поляронов как функция электрон-фононной связи λ_H и λ_P показано на фазовой диаграмме (1). Численный анализ выполнен со следующим набором параметров электронной структуры: $\varepsilon_d = 0$, $\varepsilon_p = 1.5$, $t_{pp} = 0.86$, $t_{pd} = 1.36$, $U_d = 9$, $U_p = 4$, $V_{pd} = 1.5$, $W = 2.15$ и $\hbar\omega = 0.09$, все значения приведены в эВ. Представленные расчеты описывают обменное взаимодействие, формируемое через основное состояние одночастичного сектора $j = j' = 0$ с учетом полного набора поляронных уровней в нуль- и двухчастичных секторах. Для случая $\lambda_H = \lambda_P = 0$ имеем $J^{00}_{gg'} = 0.39$ эВ. Ключевой особенностью полученной величины является ее немонотонная эволюция: на фазовой диаграмме (1) присутствуют как области подавления, так и усиления обмена. В режиме слабой и промежуточной силы электрон-фононной связи на рис. 1 прослеживается полоса деструктивной интерференции вкладов λ_H и λ_P, что сопровождается уменьшением фононной “шубы” поляронов и величины $\sqrt{\langle u^2 \rangle_0}$, характеризующей амплитуду смещений ионов лиганда [12]. Вдоль этой области параметр обменного взаимодействия практически не меняется вплоть до линии резких изменений ($\lambda_H = 1.2; \lambda_P = 0.1$).

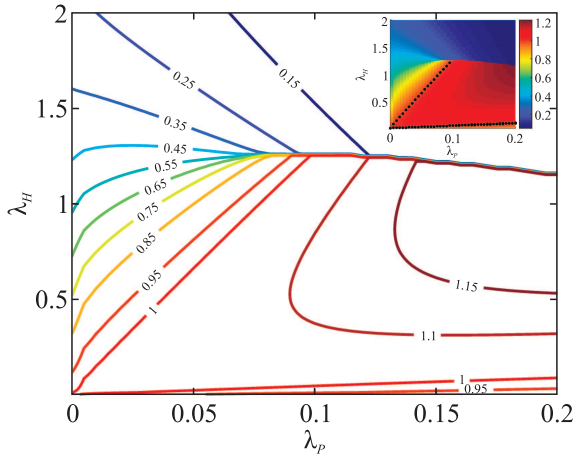

Рис. 1. (Цветной онлайн) Эффективное обменное взаимодействие $J^{00}_{gg'}$ коррелированных поляронов с сильной электрон-фононной связью в единицах $J^{00}_{gg'}$ ($\lambda_H = \lambda_P = 0$). Взаимодействие носителей заряда с решеткой характеризуется двумя типами электрон-решеточной связи: Хольштейна λ_H и Пайерлса (Су–Шриффера–Хигера) λ_P. На вставке величина обмена показана цветом, цветовая шкала соответствует основному рисунку, неперенормированный контур выделен черным пунктиром

Усиление обмена возникает на фоне преобладающего действия вклада λ_P, связанного с модуляцией межорбитального перескока t_{pd}. В этом случае поляронные трансформации электронной структуры сопровождаются увеличением зарядовой плотности $\langle n_p \rangle_0$ на орбиталях лиганда: в области ее наибольшего прироста мы фиксируем максимальные значения обмена. Анализ перенормировок энергий переноса заряда, кулоновских взаимодействий и интегралов переноса показывает, что изменение зарядовой плотности на p- и d-орбиталях возникает как кооперативный эффект многочастичных взаимодействий, совместное действие которых раскрывается в силу учета различных каналов электрон-фононной связи и многозонности электронной структуры.

Возможность усиления обмена за счет кооперативного действия кулоновского и электрон-фононного взаимодействий указывает на потенциальную роль данного механизма в формировании нетрадиционной сверхпроводимости в коррелированных соединениях. Ранее сильный синергетический эффект кулоновского взаимодействия и модуляции интеграла перескока был обнаружен [22] в купратах при анализе антиферромагнитной сверхобменной связи с помощью квантово-химических расчетов из первых принципов. Актуальность сценария усиления суперобмена в слоистых оксидах меди за счет взаимодействия носителей заряда с оптическими

фононами подтверждает также анализ изотопических сдвигов температур Нееля и сверхпроводящего перехода [23].

Подавление обменного взаимодействия при увеличении силы электрон-фононной связи сопровождается ростом зарядовой плотности на d-орбиталях. Вблизи осей λ_H и λ_P изменения происходят плавно, однако при совместном действии различных электрон-фононных вкладов в режиме сильной связи наблюдается резкое уменьшение (скачок) величины $J^{00}_{gg'}$. Отметим, что в области резких изменений обмена среднеквадратичные смещения атомов лиганда от положения равновесия $\sqrt{\langle u^2\rangle_0}$ составляют порядка 5–10 %, согласно критерию Линдемана система не достигла точки плавления, но испытывает сильные искажения. При этом сохраняется сходимость расчетов по числу фононных состояний. Для допированной системы в соответствующей области фазовой диаграммы электронная структура демонстрирует подавление спектрального веса на уровне Ферми [12]. Перечисленные факты свидетельствуют о процессе автолокализации носителей. Проблема переходов, контролируемых параметрами электрон-фононного взаимодействия, является центральной в теории поляронных и экситонных систем. В однозонной модели Хольштейна возможны [24] только плавные переходы, связанные с автолокализацией полярона. Резкие поляронные переходы обнаружены в моделях, учитывающих конкурирующие энергетические масштабы [12, 25–28]. В данном случае автолокализация наблюдается в многозонной модели на фоне конкуренции двух каналов электрон-фононной связи: λ_H и λ_P. Интересно, что в режиме сильной связи преобладающим механизмом перенормировки обмена выступает сильное подавление эффективных интегралов квазичастичных перескоков, что согласуется с классическими представлениями теории малых поляронов [29]. Для недопированной системы с половинным заполнением результатом является эволюция диэлектрического состояния Мотта–Хаббарда в состояние автолокализованного поляронного диэлектрика Мотта–Хаббарда с сильно подавленным обменным взаимодействием. На фазовой диаграмме данное состояние соответствует верхней области, выделенной синим цветом [12]. Отметим, что нелегированные соединения на основе оксидов меди с антиферромагнитным основным состоянием соответствуют нижней части фазовой диаграммы, где поляронные эффекты могут как усиливать, так и уменьшать обменное взаимодействие. Косвенно это подтверждают работы [12, 28, 30], более строгие выводы требуют развития предложенного подхода.

Проведенный анализ позволяет унифицировать разрозненные [31–33] литературные данные о влиянии колебаний решетки на обменное взаимодействие в системах с сильными электронными корреляциями. Расчеты на основе реалистичного микроскопического гамильтониана, учитывающего различные вклады ЭФВ, демонстрируют немонотонное поведение параметра суперобмена с областями его усиления и подавления. Выбор модели и параметров не ограничивают развитую методологию и полученный результат классом купратов. Как было отмечено ранее, исследование сверхобменного взаимодействия в соединениях переходных металлов требует учета различных обменных путей через p-орбитали лиганда [34] и, соответственно, различных механизмов изменения заполнения p-оболочек. При этом влияние поляронных эффектов на обмен не сводится к одному механизму, а определяется конкуренцией и кооперацией электрон-фононных и кулоновских каналов связи, что открывает возможности для управления магнитными свойствами коррелированных материалов с эффектами сильного ЭФВ.

Авторы признательны В. А. Гавричкову за полезные обсуждения.

Финансирование работы. Разделы 3, 4 выполнены при поддержке Российского научного фонда (проект РНФ # 24-12-00044), разделы 1, 2 – в рамках научной тематики Государственного задания Института физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук.

Конфликт интересов. Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

1. N. Rezaei, A. R. Oganov, A. Ghojavand, M. V. Milošević, and M. Alaei, "Benchmarking first-principles approaches for extracting magnetic exchange interactions", npj Comput. Mater. **12**, 306 (2026).
2. A. I. Liechtenstein, M. I. Katsnelson, V. P. Antropov, and V. A. Gubanov, "Local spin density functional approach to the theory of exchange interactions in ferromagnetic metals and alloys", J. Magn. Magn. Mater. **67**, 65 (1987).
3. M. I. Katsnelson and A. I. Lichtenstein, "First-principles calculations of magnetic interactions in correlated systems", Phys. Rev. B **61**, 8906 (2000).
4. A. Szilva, Y. Kvashnin, E. A. Stepanov, L. Nordström, O. Eriksson, A. I. Lichtenstein, and M. I. Katsnelson, "Quantitative theory of magnetic interactions in solids", Rev. Mod. Phys. **95**, 035004 (2023).
5. D. I. Badrtdinov, M. I. Katsnelson, and A. N. Rudenko, "Phonon-induced renormalization of exchange

interactions in metallic two-dimensional magnets", Phys. Rev. B **110**, L060409 (2024).

6. S. G. Ovchinnikov, V. A. Gavrichkov, M. M. Korshunov, and E. I. Shneyder, *Theoretical Methods for strongly Correlated systems*, ed. y A. Avella and F. Mancini (Springer Series in Solid-State Sciences, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2012), v. 59, p. 161.
7. B. S. Shastry, "Model and Nuclear Magnetic Relaxation in High-T_c Materials", Phys. Rev. Lett. **63**, 1288 (1989).
8. J. H. Jefferson, "Derivation of the t-J-model for high temperature superconductivity", Physica B: Condensed Matter **165–166**, 1013 (1990).
9. J. H. Jefferson, H. Eskes, and L. F. Feiner, "Derivation of a single-band model for CuO_2 planes by a cell-perturbation method", Phys. Rev. B **45**, 7959 (1992).
10. P. Piekarz, J. Konior, and J. H. Jefferson, "Electron-phonon interaction in the cuprates: Breathing versus buckling mode", Phys. Rev. B **59**, 14697, (1999).
11. I. A. Makarov, E. I. Shneyder, P. A. Kozlov, and S. G. Ovchinnikov, "Polaronic approach to strongly correlated electron systems with strong electron-phonon interaction", Phys. Rev. B **92**, 155143 (2015).
12. E. I. Shneyder, S. V. Nikolaev, M. V. Zotova, R. A. Kaldin, and S. G. Ovchinnikov, "Polaron transformations in the realistic model of the strongly correlated electron system", Phys. Rev. B **101**, 235114 (2020).
13. A. S. Alexandrov, and V. V. Kabanov, "Unconventional High-Temperature Superconductivity from Repulsive Interactions: Theoretical Constraints", Phys. Rev. Lett. **106**, 136403 (2011).
14. М. Ю. Каган, В. В. Вальков, В. А. Мицкан, М. М. Коровушкин, "Влияние дальних взаимодействий на механизм куперовской неустойчивости Кона–Латтинжера в модели Шубина–Вонсовского", Письма в ЖЭТФ **97**, 253 (2013) [M. Y. Kagan, V. V. Val'kov, V. A. Mitskan, and M. M. Korovushkin, "Effect of long-range interactions on the Kohn-Luttinger mechanism of the Cooper instability in the Shubin-Vonsowsky model", JETP Lett. **97**, 226 (2013)].
15. E. Kolley and W. Kolley, "Schrieffer–Wolff transformation of the Emery model for Cu-O superconductors", Phys. Status Solidi B **157**, 399 (1990).
16. K. A. Chao, J. Spalek, and A. M. Oles, "Kinetic exchange interaction in a narrow S-band", J. Phys. C: Solid State Phys. **10**, L271 (1977).
17. V. A. Gavrichkov, S. I. Polukeev, and S. G. Ovchinnikov, "Contribution from optically excited many-electron states to the superexchange interaction in Mott-Hubbard insulators", Phys. Rev. B **95**, 144424 (2017).
18. H. Eskes and J. H. Jefferson, "Superexchange in the cuprates", Phys. Rev. B **48**, 9788 (1993).
19. A. S. Mishchenko, N. Nagaosa, N. V. Prokof'ev, A. Sakamoto, and B. V. Svistunov, "Self-trapping of polarons in the Rashba-Pekar model", Phys. Rev. B **66**, 020301(R) (2002).
20. Y. Zhang, Y. Zuo, F. Pan, and J. P. Draayer, "Excited-state quantum phase transitions in the interacting boson model: Spectral characteristics of 0^+ states and effective order parameter", Phys. Rev. C **93**, 044302 (2016).
21. C.-K. Li and G. Chen, "Universal excitonic superexchange in spin-orbit coupled Mott insulators", Europhysics Letters **139**, 56001 (2022).
22. N. A. Bogdanov, G. Li Manni, S. Sharma, O. Gunnarsson, and A. Alavi, "Enhancement of superexchange due to synergetic breathing and hopping in corner-sharing cuprates", Nat. Phys. **18**, 190 (2022).
23. М. В. Ерёмин, И. М. Ерёмин, И. А. Ларионов, А. В. Терзи, "Влияние поляронных эффектов на суперобменное взаимодействие: Изотопические сдвиги T_N, T_c и T^* в слоистых оксидах меди", Письма в ЖЭТФ **75**, 467 (2002) [M. V. Eremin, I. M. Eremin, I. A. Larionov, and A. V. Terzi, "Polaron effects on superexchange interaction: Isotope shifts of T_N, T_c, and T^* in layered copper oxides", JETP Lett. **75**, 395 (2002)].
24. B. Gerlach and H. Löwen, "Analytical properties of polaron systems or: Do polaronic phase transitions exist or not?", Rev. Mod. Phys. **63**, 63 (1991).
25. V. M. Stojanović, and M. Vanević, "Quantum-entanglement aspects of polaron systems", Phys. Rev. B **78**, 214301 (2008).
26. D. J. J. Marchand, G. De Filippis, V. Cataudella, M. Berciu, N. Nagaosa, N. V. Prokof'ev, A. S. Mishchenko, and P. C. E. Stamp, "Sharp Transition for Single Polarons in the One-Dimensional Su-Schrieffer-Heeger Model", Phys. Rev. Lett. **105**, 266605 (2010).
27. A. O. Sboychakov, A. L. Rakhmanov, and K. I. Kugel, "Effect of electron–lattice interaction on the phase separation in strongly correlated electron systems with two types of charge carriers", J. Phys.: Condens. Matter **22**, 415601 (2010).
28. E. I. Shneyder, M. V. Zotova, S. V. Nikolaev, and S. G. Ovchinnikov, "Phonon-assisted insulator-metal transitions in correlated systems driven by doping", Phys. Rev. B **104**, 155153 (2021).
29. И. Г. Ланг, Ю. А. Фирсов, "Кинетическая теория полупроводников с малой подвижностью", ЖЭТФ **43** 1843 (1962) [I. G. Lang and Yu. A. Firsov, "Kinetic theory of semiconductors with low mobility", Sov. Phys. JETP **16**, 1301 (1963)].
30. E. I. Shneyder, M. V. Zotova, A. V. Dudarev, S. V. Nikolaev, and S. G. Ovchinnikov, "Evolution of the pseudogap band structure in a system of electron-correlated lattice polarons", Phys. Rev. B **112**, 115108 (2025).

31. К. И. Кугель, Д. И. Хомский, "Поляронные эффекты и обменное взаимодействие в магнитных диэлектриках с ян-теллеровскими ионами", ЖЭТФ **79**, 987 (1980) [K. I. Kugel' and D. I. Khomskii, "Polaron effects and exchange interaction in magnetic dielectrics with Jahn–Teller ions", Sov. Phys. JETP **52**, 501 (1980)].
32. W. Stephan, M. Capone, M. Grilli, and C. Castellani, "Influence of electron-phonon interaction on superexchange", Phys. Lett. A **227**, 120 (1997).
33. Sh. Li and S. Johnston, "Suppressed superexchange interactions in the cuprates by bond-stretching oxygen phonons", Phys. Rev. B **108**, L201113 (2023).
34. С. В. Стрельцов, Д. И. Хомский, "Орбитальная физика в соединениях переходных металлов: новые тенденции", УФН **187**, 1205 (2017) [S. V. Streltsov and D. I. Khomskii, "Orbital physics in transition metal compounds: new trends", Phys.-Uspekhi **60**, 1121 (2017)].