

ПО ИТОГАМ ПРОЕКТОВ
РОССИЙСКОГО ФОНДА ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ
Проект РФФИ # 98-02-17187

Спиновый полярон в двумерном антиферромагнетике – от локального синглета к сложной квазичастице

А. Ф. Барабанов, А. В. Михеенков¹⁾, А. М. Белемук

Институт физики высоких давлений РАН, 142092 Троицк, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 7 декабря 2001 г.

Изложены основные теоретические идеи, касающиеся спин-поляронного сценария для зарядовых возбуждений в двумерном антиферромагнетике. Отличительная особенность развиваемого подхода состоит в рассмотрении локального полярона (а не голый дырки) в качестве нулевого приближения для квазичастицы. На следующем этапе это возбуждение одевается в антиферромагнитные спиновые волны – формируется полярон промежуточного (или бесконечного) радиуса. Метод позволяет непрерывно описать переход от нулевых температур к конечным и рассмотреть широкий диапазон допирования. Изложенный подход объясняет основные результаты ARPES-экспериментов в плоскости CuO_2 .

PACS: 71.10.Fd, 71.10.Pm, 74.72.–h

1. Введение

Как известно, существует много двумерных (2D) систем с сильной корреляцией, которые демонстрируют нефермижидкостное поведение носителей. Основная трудность теории здесь состоит в том, что операторы низколежащих элементарных возбуждений в таких системах не удовлетворяют ни бозевским, ни фермиевским коммутационным соотношениям. Один из наиболее ярких примеров такой ситуации представляет из себя допированный 2D антиферромагнетик (АФМ), который отражает основные черты плоскости CuO_2 в высокотемпературных сверхпроводниках (ВТСП). Эта система экспериментально наиболее изучена. В частности, целый ряд необычных свойств демонстрируется фотоэмиссионной спектроскопией с угловым разрешением (ARPES), которая в принципе позволяет измерить одночастичную спектральную функцию носителей.

Одним из подходов для описания элементарных возбуждений в 2D АФМ является концепция спинового магнитного полярона [1], рассмотрение которой и представляет цель настоящего обзора.

Начальная идея этой концепции состоит в том, что элементарное возбуждение в 2D АФМ может быть представлено как голая частица (электрон или дыр-

ка), окруженная некоторой деформацией спиновой диэлектрической подложки. Простейшая реализация такой квазичастицы – **локальный спиновый полярон** (ЛСП) – должна даваться решением кластерной задачи. Выбирая энергетически низкие состояния малого кластера, можно далее описать движение ЛСП на АФМ фоне.

Движение ЛСП сильно зависит от состояния магнитной подложки и спин-спиновых корреляционных функций. Ниже при рассмотрении магнитной подсистемы мы будем основываться на сферически симметричном описании $S = 1/2$ гейзенберговского антиферромагнетика на квадратной решетке [2, 3]. Отметим, что, как известно, при любой конечной температуре, а также при достаточной фрустрации в спиновой подсистеме именно сферически симметричное состояние является наиболее реалистическим.

Интуитивно ясно, что при $T = 0$ движение малого полярона должно зависеть от наличия (или отсутствия) дальнего порядка в спиновой подсистеме. Это означает, что второй важный шаг в развитии концепции спинового полярона – учет взаимодействия ЛСП со спиновыми волнами с квазиимпульсом $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$. То есть возникает необходимость введения операторов **сложного спинового полярона** (ССП). Сложный спиновый полярон – это локальный полярон, одетый в спиновые волны с квазиимпульсом \mathbf{q} , близким

¹⁾e-mail: mikheen@online.ru

к \mathbf{Q} . Структура низколежащего спектра ССП определяется расщеплением нижней зоны локального полярона. Как будет видно ниже, в результате эффективная поверхность Ферми демонстрирует сильнейшее отклонение от теоремы Латтинджера. Кроме того, воспроизводятся следующие интересные ARPES экспериментальные результаты: резкое падение интенсивности ARPES пиков при изменении квазиимпульса от $(\pi/2, \pi/2)$ к (π, π) или $(0, 0)$, возможность существования “теневого зоны” (shadow band effect) и так называемая псевдощель на поверхности Ферми.

Спин-поляронный подход работает в любой сильно-коррелированной модели. В этом обзоре основные его идеи будут продемонстрированы на примере кондо-решетки – простейшей из моделей, используемых для описания плоскости CuO_2 . Для детального описания экспериментальных результатов будет использована эффективная спин-фермионная модель, учитывающая реалистические черты плоскости CuO_2 .

2. Локальный спиновый полярон на кондо-решетке

В этом разделе рассматривается кондо-решетка с исчезающе малым обменным взаимодействием между локализованными спинами [4, 5]. Единственным малым параметром задачи считается кинетическая энергия, которая много меньше кондовского обмена $J \gg t$.

Близкая ситуация наблюдается в плоскостях CuO_2 в сверхпроводящих купратах. Здесь кондовский обмен соответствует энергии образования синглета Занга–Райса на одной плакетке CuO_4 [6], он порядка 2–3 эВ. Кинетическая энергия t движения синглетов составляет примерно 0.5 эВ и существенно превышает обмен между соседними спинами, величина которого примерно 0.15 эВ.

Ниже на примере простой модели будет (в подходе спинового полярона) продемонстрировано отклонение от фермиевской статистики. Аналогичный эффект известен также как spectral weight transfer [7] – когда экспериментально наблюдаются зоны со спектральным весом, зависящим от заполнения и меньшим, чем в случае фермиевской статистики. Это означает, что для заполнения всей зоны нужно меньше электронов, чем в фермиевском случае.

2.1. Спектральный вес голых носителей. Если полностью пренебречь движением электронов и обменным взаимодействием соседних локализованных спинов, гамильтониан модели приобретает предельно простой вид:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{r}} \hat{H}_{\mathbf{r}},$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\mathbf{r}} &= 2 J \mathbf{S}_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{s}_{\mathbf{r}} = \\ &= J \left(S_{\mathbf{r}}^z (n_{\mathbf{r}\uparrow} - n_{\mathbf{r}\downarrow}) + S_{\mathbf{r}}^+ a_{\mathbf{r}\downarrow}^+ a_{\mathbf{r}\uparrow} + S_{\mathbf{r}}^- a_{\mathbf{r}\uparrow}^+ a_{\mathbf{r}\downarrow} \right), \end{aligned} \quad (1)$$

где $\mathbf{S}_{\mathbf{r}}$ – оператор локализованного спина $S = 1/2$ в узле \mathbf{r} , $a_{\mathbf{r}\sigma}$ ($\sigma = \uparrow (+), \downarrow (-)$) оператор уничтожения электрона с проекцией спина $s_{\mathbf{r}}^z = \sigma/2$, $n_{\mathbf{r}\sigma} = a_{\mathbf{r}\sigma}^+ a_{\mathbf{r}\sigma}$.

Одноузельный гамильтониан обладает 8-ю собственными состояниями: 2 состояния без электронов, соответствующие двум направлениям локализованного спина, 2 состояния с двумя электронами (все эти четыре состояния имеют нулевую энергию $E_0 = E_2 = 0$) и 4 состояния с одним электроном на узел: нижнее синглетное и три триплетных с энергиями соответственно $E_{10} = \varepsilon_0 = -3J/2$, $E_{11} = \varepsilon_1 = J/2$. Для этой модели термодинамический потенциал определяется выражением

$$\begin{aligned} \Omega &= -TN_L \ln Z, \\ Z &= 2 + e^{-\beta(\varepsilon_0 - \mu)} + 3e^{-\beta(\varepsilon_1 - \mu)} + 2e^{2\beta\mu} \end{aligned} \quad (2)$$

(N_L – число узлов решетки, μ – химический потенциал, β – обратная температура). Отсюда легко получить среднее число частиц (оно определяется величиной μ) и среднюю энергию для данного узла:

$$\begin{aligned} N &= -\frac{1}{N_L} \frac{\partial \Omega}{\partial \mu} = \frac{1}{Z} (e^{-\beta(\varepsilon_0 - \mu)} + 3e^{-\beta(\varepsilon_1 - \mu)} + 4e^{2\beta\mu}), \\ \langle \hat{H}_{\mathbf{r}} \rangle &= \frac{1}{Z} (\varepsilon_0 e^{-\beta(\varepsilon_0 - \mu)} + 3\varepsilon_1 e^{-\beta(\varepsilon_1 - \mu)}). \end{aligned} \quad (3)$$

При высоких температурах ($T \gg J$) одноэлектронные состояния заполнены равномерно и тогда имеем $N = 2/(e^{-\beta\mu} + 1)$. При низких температурах ($T \ll J$) и $\mu < 0$ (определим ноль энергетической шкалы как $E_0 = E_2 = 0$) состояния с двумя электронами не заняты. Более того, поскольку $e^{-\beta\varepsilon_0} \gg e^{-\beta\varepsilon_1}$, пусты и одноэлектронные триплетные состояния, и в этом пределе имеем

$$N = \frac{1}{2e^{\beta(\varepsilon_0 - \mu)} + 1}, \quad \langle \hat{H}_{\mathbf{r}} \rangle = \varepsilon_0 N. \quad (4)$$

При $\mu > 0$ заполняются состояния с двумя электронами. Однако этот случай не требует специального рассмотрения – благодаря симметрии гамильтониана (1) по отношению к электрон-дырочному преобразованию $a_{\sigma} = \sigma \tilde{a}_{-\sigma}^+$.

Рассмотрим для сравнения случай свободных фермионов на уровне ε_0 с двукратным спиновым вырождением. Тогда вместо (4) имеем $N^{\text{free}} = 2/(e^{\beta(\varepsilon_0 - \mu)} + 1)$. Поэтому из (4) при $\mu < \varepsilon_0 - T$ и $\exp(\beta(\varepsilon_0 - \mu)) \gg 1$ находим

$$N \cong (1/2) e^{-\beta(\varepsilon_0 - \mu)} = N^{\text{free}}/4, \quad (5)$$

а при $\mu > \varepsilon_0 - T$ и $\exp(\beta(\varepsilon_0 - \mu)) \ll 1$

$$N \cong 1 = N^{\text{free}}/2. \quad (6)$$

Очевидно, что заполнение будет отличаться от фермиевского и в случае, когда синглетные состояния благодаря перескокам электронов размываются в синглетную зону.

Чтобы в дальнейшем обобщить полученные выше результаты на более реалистическую ситуацию – с учетом кинетической энергии, решим теперь задачу (1) с помощью двухвременных функций Грина. Используя операторы

$$\begin{aligned} a &= a_{\mathbf{r}\uparrow}, & b &= S_{\mathbf{r}}^z a_{\mathbf{r}\uparrow} + S_{\mathbf{r}}^- a_{\mathbf{r}\downarrow}, \\ c &= n_{\mathbf{r}\downarrow} a_{\mathbf{r}\uparrow}, & d &= S_{\mathbf{r}}^z n_{\mathbf{r}\downarrow} a_{\mathbf{r}\uparrow} + S_{\mathbf{r}}^- n_{\mathbf{r}\uparrow} a_{\mathbf{r}\downarrow}, \end{aligned} \quad (7)$$

нетрудно получить замкнутую систему уравнений движения:

$$\begin{aligned} \tilde{\omega} \langle\langle a | a^+ \rangle\rangle &= 1 + J \langle\langle b | a^+ \rangle\rangle, & \tilde{\omega} &= \omega + \mu, \\ (\tilde{\omega} + J) \langle\langle b | a^+ \rangle\rangle &= \frac{3}{4} J \langle\langle a | a^+ \rangle\rangle + 2J \langle\langle d | a^+ \rangle\rangle, \\ \tilde{\omega} \langle\langle c | a^+ \rangle\rangle &= c_0 + J \langle\langle d | a^+ \rangle\rangle, \\ (\tilde{\omega} - J) \langle\langle d | a^+ \rangle\rangle &= d_0 + \frac{3}{4} J \langle\langle c | a^+ \rangle\rangle. \end{aligned} \quad (8)$$

Здесь введены следующие средние:

$$\begin{aligned} c_0 &= \langle\{c, a^+\}\rangle = \langle n_{\mathbf{r}\downarrow} \rangle = N/2, \\ d_0 &= \langle\{d, a^+\}\rangle = -\frac{1}{2J} \langle H_{\mathbf{r}} \rangle = -\langle a^+ b \rangle. \end{aligned} \quad (9)$$

Последний коррелятор легко получить из функции Грина $\langle\langle b | a^+ \rangle\rangle$. Ограничимся в дальнейшем пределом низких температур $T \ll J$ и $\mu < 0$. В этом пределе можно угадать самосогласованное значение d_0 , взяв его из представленного выше термодинамического анализа, который дает (см. (4)) $d_0 = 3N/4$.

Решение системы уравнений (8) позволяет получить выражения для электронной функции Грина $\langle\langle a | a^+ \rangle\rangle$ и функции Грина $\langle\langle b | a^+ \rangle\rangle$. Используя (9), получаем:

$$\begin{aligned} \langle\langle a | a^+ \rangle\rangle &= \frac{1+N}{4} (\tilde{\omega} + \frac{3}{2}J)^{-1} + \\ &+ \frac{3(1-N)}{4} (\tilde{\omega} - \frac{1}{2}J)^{-1} + \frac{N}{2} (\tilde{\omega} - \frac{3}{2}J)^{-1}, \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \langle\langle b | a^+ \rangle\rangle &= -\frac{3(1+N)}{8} (\tilde{\omega} + \frac{3}{2}J)^{-1} + \\ &\frac{3(1-N)}{8} (\tilde{\omega} - \frac{1}{2}J)^{-1} + \frac{3N}{4} (\tilde{\omega} - \frac{3}{2}J)^{-1}. \end{aligned} \quad (11)$$

Эти три полюса соответствуют переходам $E_0 \rightarrow E_{10}$, $E_0 \rightarrow E_{11}$ и $E_{10} \rightarrow E_2$. При низких температурах

$T \ll J$ и $\mu < 0$ триплетные состояния незаняты, этим объясняется отсутствие соответствующего полюса в (10). Среднее число электронов на узле \mathbf{r} со спином $s_{\mathbf{r}}^z = +1/2$ можно получить из (10) с помощью флуктуационно-диссипационной теоремы:

$$\begin{aligned} \langle n_{\mathbf{r}\uparrow} \rangle &= \frac{1+N}{4} (e^{\beta(\varepsilon_0 - \mu)} + 1)^{-1} + \\ &+ \frac{3(1-N)}{4} (e^{\beta(\varepsilon_1 - \mu)} + 1)^{-1} + \frac{N}{2} (e^{\beta(-\varepsilon_0 - \mu)} + 1)^{-1}, \\ &\mu < 0. \end{aligned} \quad (12)$$

Для $T \ll J$ и $\mu < 0$ необходимо оставить в правой части только первый член

$$\frac{N}{2} = \frac{1+N}{4} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_0 - \mu)} + 1}. \quad (13)$$

Решение последнего уравнения дает (4).

Итак, мы показали, что при $T \ll J$ и $\mu < 0$ существенным является только нижний полюс функции Грина (10). Для дальнейшего удобно определить “синглетный” оператор и соответствующую функцию Грина, которая имеет только один полюс, отвечающий переходу в синглетное состояние. Выбрав комбинацию

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{a}{2} - b - \frac{c}{2} + d \right), \quad (14)$$

можно заметить, что уравнения движения (8) (с использованием (9)) приводят к простому соотношению

$$(\tilde{\omega} + \frac{3}{2}J) \langle\langle \alpha | \alpha^+ \rangle\rangle = \langle\{\alpha, \alpha^+\}\rangle = \frac{1+N}{2} \quad (15)$$

для синглетной функции Грина. С помощью (7) синглетный оператор (14) можно записать в другой форме:

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}} (Z_{\mathbf{r}}^{\downarrow\downarrow} X_{\mathbf{r}}^{0\uparrow} - Z_{\mathbf{r}}^{\uparrow\uparrow} X_{\mathbf{r}}^{0\downarrow}), \quad (16)$$

где $Z_{\mathbf{r}}^{\sigma\sigma} = 1/2 + \sigma S_{\mathbf{r}}^z$, $Z_{\mathbf{r}}^{\downarrow\uparrow} = S_{\mathbf{r}}^-$ и $X_{\mathbf{r}}^{0\sigma} = a_{\mathbf{r}\sigma}(1 - n_{\mathbf{r}-\sigma})$ – так называемые проекционные операторы Хаббарда. Оператор (16) также является проекционным оператором – между состояниями без электронов и *точным локальным синглетным поляронным состоянием*. С учетом (13) можно заметить, что среднее значение $\alpha^+ \alpha$ дает среднее число электронов N .

2.2 Нижняя поляронная зона. Добавим теперь к гамильтониану (1) оператор кинетической энергии

$$\hat{T} = -t \sum_{\mathbf{g}\sigma} a_{\mathbf{r}+\mathbf{g},\sigma}^+ a_{\mathbf{r}\sigma}, \quad (17)$$

где \mathbf{g} обозначает ближайших соседей, а z – их число. В пределе $t \ll J$, $T \ll J$, $\mu < 0$ можно ограничиться рассмотрением уширения только синглетной зоны и заменить (17) выражением

$$\hat{T} = -t \sum_{\mathbf{g}\sigma} X_{\mathbf{r}+\mathbf{g}}^{\sigma 0} X_{\mathbf{r}}^{0\sigma}. \quad (18)$$

Такая замена означает исключение переходов в двух-электронные состояния (и из них). Переходя в (15) в импульсное пространство и добавляя вклад от кинетической энергии, получаем уравнение

$$(\tilde{\omega} + \frac{3}{2}J) \langle \langle \alpha_{\mathbf{p}} | \alpha_{\mathbf{p}}^+ \rangle \rangle = \frac{1+N}{2} + \langle \langle [\alpha_{\mathbf{p}}, \hat{T}] | \alpha_{\mathbf{p}}^+ \rangle \rangle. \quad (19)$$

Рассмотрим последний член этого уравнения в рамках проекционной техники. Подробнее об этой технике будет сказано в следующих разделах. В данном же случае это просто означает, что мы проектируем результат коммутирования синглетного оператора на сам синглетный оператор, что дает

$$[\alpha_{\mathbf{p}}, \hat{T}] \cong E_{\mathbf{p}} \alpha_{\mathbf{p}}, \quad E_{\mathbf{p}} = \frac{\langle \langle [\alpha_{\mathbf{p}}, \hat{T}], \alpha_{\mathbf{p}}^+ \rangle \rangle}{\langle \langle \alpha_{\mathbf{p}}, \alpha_{\mathbf{p}}^+ \rangle \rangle}. \quad (20)$$

Последнее выражение вычисляется в нижнем порядке по t , то есть расцепляются корреляционные функции с разных узлов. Тогда с использованием результатов предыдущего раздела нетрудно вычислить все средние:

$$\begin{aligned} \langle Z_r^{\uparrow\uparrow} X_r^{00} \rangle &= \langle Z_r^{\downarrow\downarrow} X_r^{00} \rangle = (1-N)/2, \\ \langle Z_r^{\uparrow\uparrow} X_r^{\downarrow\downarrow} \rangle &= \langle Z_r^{\downarrow\downarrow} X_r^{\uparrow\uparrow} \rangle = N/2, \\ \langle Z_r^{\uparrow\downarrow} X_r^{\downarrow\uparrow} \rangle &= \langle Z_r^{\downarrow\uparrow} X_r^{\uparrow\downarrow} \rangle = -N/2, \\ \langle X_r^{\uparrow\uparrow} \rangle &= N/2, \quad \langle X_r^{00} \rangle = 1-N. \end{aligned} \quad (21)$$

Итак, получаем

$$E_{\mathbf{p}} = -(tz\gamma_{\mathbf{p}}) \frac{1+N}{4}, \quad \gamma_{\mathbf{p}} = \frac{1}{z} \sum_{\mathbf{g}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{g}}. \quad (22)$$

Существенная черта полученного решения – зависимость ширины зоны от заполнения. При изменении числа электронов N от 0 до 1 ширина зоны меняется от 1/4 до 1/2 ширины зоны свободных фермионов. Подчеркнем, что при выводе (22) мы пренебрегли спин-спиновыми корреляциями на соседних узлах ($\langle \mathbf{S}_{\mathbf{r}} \mathbf{S}_{\mathbf{r}+\mathbf{g}} \rangle = 0$). Это означает, в частности, что мы пренебрегли суперобменом соседних локализованных спинов через электроны проводимости, который имеет порядок t^2/J . Кроме суперобмена, существуют и другие процессы магнитного упорядочения, в частности, процессы, приводящие к ферромагнитному

спариванию. Анализ конкуренции различных магнитных основных состояний лежит вне рамок настоящего раздела. Поэтому мы можем лишь, определив температуру магнитного упорядочения $T_m \sim t^2/J$, утверждать, что результат (22) сохраняет силу при температурах $T_m \ll T$.

При $t < T$ ширина синглетной зоны незначительна, и задача сводится к рассмотренной в предыдущем разделе. В температурном диапазоне $T_m \ll T \ll t$ заполнение синглетной зоны аналогично фермиевскому распределению, но не совпадает с ним. Назовем его квазифермиевским распределением. Из (19), (20) получаем

$$N_p = \langle \alpha_p^\dagger \alpha_p \rangle = \frac{1+N}{2} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_p - \mu)} + 1}, \quad \varepsilon_p = \varepsilon_0 + E_p. \quad (23)$$

При очень малом заполнении, $N \ll 1$, из (23) получаем распределение, аналогичное фермиевскому, с весом 1/4:

$$N_p = \frac{1}{2} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_p - \mu)} + 1}, \quad (24)$$

аналогично результату (5) предыдущего раздела. Это распределение верно для достаточно малого химического потенциала $\mu < \min \varepsilon_p + O(tN/N_L)$, $N \ll 1$.

Для больших значений химического потенциала необходимо определить число электронов $N(\mu)$ из (23). Это дает

$$\begin{aligned} N &= N_L^{-1} \sum_p N_p = F/(2-F), \\ F &= N_L^{-1} \sum_p (e^{\beta(\varepsilon_p - \mu)} + 1)^{-1}. \end{aligned} \quad (25)$$

Из этого соотношения можно определить и квазиферми-поверхность (ФП), как область, где квазифермиевское распределение (23) падает от $(1+N)/2$ до нуля. Благодаря весовому фактору, принимающему значения между 1/4 и 1/2 (в зависимости от величины N), квази-ФП для данного числа электронов больше, чем обычная ФП. Из (25) видно, что число электронов меняется от нуля до единицы с ростом химического потенциала. В области $\varepsilon_0 + tz < \mu < |\varepsilon_0| - tz$ заполнение $N = 1$ аналогично ситуации в модели Хаббарда в случае, когда химический потенциал лежит между двумя хаббардовскими подзонами.

Таким образом, даже для рассмотренной здесь чрезвычайно простой модели при заполнении синглетной зоны электронами наблюдается сильное отклонение от распределения Ферми. Спектральный вес носителей в зоне составляет всего лишь от одной четверти до половины спектрального веса для свободных фермионов. И спектральный вес, и ширина зоны

зависят от заполнения (spectral weight transfer [7]). Этот эффект должен экспериментально наблюдаться, например, как уменьшение спектрального веса в фотоэмиссионных экспериментах. Можно ожидать уменьшения спектрального веса и при температурах меньше температуры магнитного упорядочения. Однако дисперсионное соотношение (22) в этом случае может измениться.

3. Локальный полярон, одетый в спиновые волны

В настоящем разделе будет продемонстрирована необходимость усложнения структуры спинового полярона для адекватного описания низкоэнергетической части спектра носителей. Сначала остановимся на пределе нулевой температуры [4], а далее покажем, как можно непрерывно перейти к конечным температурам [8].

3.1. Случай нулевой температуры. Для реалистичной модели в гамильтониане решетки Кондо, естественно, следует учитывать не только кондовский обмен и кинетическую энергию, как в предыдущем разделе, но и АФМ взаимодействие соседних локализованных спинов. Этому отвечает дополнительный член

$$H_2 = \frac{1}{2} I \sum_{rg} S_{r+g}^\alpha S_r^\alpha. \quad (26)$$

Выпишем сначала первые два уравнения бесконечной цепочки уравнений для запаздывающих функций Грина, описывающих движение локального полярона на АФМ спиновом фоне. Этот раздел посвящен анализу только спектра квазичастиц. Поэтому для простоты обозначений мы будем писать просто операторы a вместо функций Грина $\langle\langle a | b^+ \rangle\rangle$ и опустим неоднородные члены $\langle [a, b^+]_+ \rangle$. Тогда указанные уравнения приобретают вид

$$(\omega - \epsilon_p) a_p = J b_p, \quad b_p = N^{-\frac{1}{2}} \sum_r b_r e^{-ipr}, \quad b_r = \tilde{S}_r a_r, \quad (27)$$

$$\begin{aligned} \omega \tilde{S}_{r+R} a_r &= [\tilde{S}_{r+R} a_r, H_0 + H_1 + H_2] = \\ &= \sum_g t_g \tilde{S}_{r+R} a_{r+g} + J \tilde{S}_{r+R} \tilde{S}_r a_r + \\ &+ I i e_{\alpha\beta\gamma} \sum_g \sigma_\alpha S_{r+R+g}^\beta S_{r+R}^\gamma a_r. \end{aligned} \quad (28)$$

Здесь суммирование идет по узлам r квадратной решетки и по их ближайшим соседям $|g| = 1$. Для краткости мы опустили спиновые индексы у операторов рождения $a_{r\sigma}^+$ и уничтожения $a_{r\sigma}$ ферми-частиц

(пусть это будут электроны) и использовали обозначение $\tilde{S}_r = S_r^\alpha \sigma^\alpha$. Здесь и ниже мы предполагаем, что электронный спектр имеет вид

$$\epsilon_p = -\epsilon_{p+Q} = -2t(\cos p_x + \cos p_y). \quad (29)$$

Рассматривая движение локального магнитного полярона в пределе $N \ll 1$, можно видеть, что в кинетической энергии возникают члены, пропорциональные спин-спиновым корреляционным функциям $C = \langle \mathbf{S}_r \mathbf{S}_{r+g} \rangle$ на соседних узлах, то есть определяемые ближним магнитным порядком. Однако очевидно, что при наличии дальнего порядка движение полярона должно зависеть и от параметра, отвечающего этому АФМ дальнему порядку. У магнитной подложки с дальним порядком для рассматриваемого сферически симметричного состояния $\langle S_r^\alpha \rangle = 0$, $C_R^{\alpha\beta} = \langle S_r^\alpha S_{r+R}^\beta \rangle = M \delta^{\alpha\beta} e^{iQR}$, $|R| \gg 1$, $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$. То есть в этом состоянии среднее $\langle S_Q S_Q \rangle$ является макроскопической величиной. Это означает, что спаривание локального полярона с S_Q ($\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$) отвечает новому поляронному состоянию бесконечного радиуса. При этом важно учитывать квантовый характер спиновой Q -волны, поскольку переходы между состояниями локального полярона и состояниями делокализованного полярона существенно должны определять поляронные зоны.

Естественно ввести следующие операторы, описывающие поляронные состояния бесконечного радиуса:

$$c_r = \tilde{Q}_r a_r, \quad c_p = \tilde{Q}_0 a_{p+Q}, \quad (30)$$

$$\tilde{Q}_r = N^{-1} \sum_R e^{iQR} \tilde{S}_{r+R} = e^{iQr} \tilde{Q}_0, \quad (31)$$

$$d_r = \tilde{Q}_r \tilde{S}_r a_r, \quad d_p = \tilde{Q}_0 b_{p+Q}. \quad (32)$$

Операторы c_r и d_r учитывают дальние корреляции между спином и электроном ($|R| \gg 1$). Отметим, что принятый набор состояний замкнут относительно кондовского взаимодействия. Из (27) и (30), (32) легко видеть, что

$$(\omega - \epsilon_{p+Q}) c_p = J d_p. \quad (33)$$

Чтобы замкнуть систему уравнений для функций Грина, используем стандартную проекционную технику Цванцига-Мори [9]. Спроектируем соответству-

ющие коммутаторы на следующий ортонормированный набор базисных операторов:

$$\begin{aligned} B_{1r} &= a_r, \\ B_{2r} &= f_2^{-1/2} b'_r, \quad b'_r = b_r - c_r, \\ B_{3r} &= f_3^{-1/2} c_r, \\ B_{4r} &= f_4^{-1/2} d'_r, \quad d'_r = d_r - M a_r + M f_2^1 (b_r - c_r), \end{aligned} \quad (34)$$

где f_i – соответствующие нормировочные множители. Коэффициенты в проекционных соотношениях $[B_i, H] = \sum_j a_{ij} B_j$ определяются как

$$a_{ij} = \langle [B_{ir}, H], B_{jr}^+ \rangle_+ . \quad (35)$$

С учетом уравнений (27), (33) и (35) получаем в импульсном представлении простую систему четырех уравнений:

$$\omega B_{i,p} = \sum_j a_{ij}(p) B_{j,p}. \quad (36)$$

Мы не приводим матричные элементы спектральной матрицы $a_{ij}(p)$ (см. [4]), которые существенно зависят от параметра дальнего магнитного порядка M и коррелятора C .

Итак, в принятом приближении движение электрона на антиферромагнитном фоне описывается квазичастицей, которая является когерентной суперпозицией четырех ферми-полей – поля голого электрона a_p , поля делокализованного полярона c_p и двух полей локализованного полярона b_p и d_p , которые гибридизованы в основном благодаря кондовскому взаимодействию. Систему (36) можно рассматривать как систему уравнений Шредингера, в которой матричные элементы a_{ij} представляют собой амплитуды переходов из состояния j в состояние i . Наличие недиагональных матричных элементов отражает квантовую природу спина S и Q -волн. Собственные функции и собственные значения уравнений (36) описывают элементарные возбуждения, которые формируют четыре зоны. Структура зон зависит от состояния магнитной подсистемы (от величин M и C) и соотношений между энергетическими параметрами t, J, I . Ниже мы будем использовать следующие типичные значения для величин M и C : $M = 0.1, C = -0.335$.

В принятой модели все спектры зависят от импульса только через ϵ_p . Отметим, что при вычислении матричных элементов (35) мы использовали приближение низкой плотности ферми-частиц, то есть $\langle a_p^+ a_p \rangle \rightarrow 0$.

На рис.1а представлены четыре ветви квазичастичного спектра $E^{(i)}(p)$, $i = 1 - 4$ для случая $J \gg t, I$

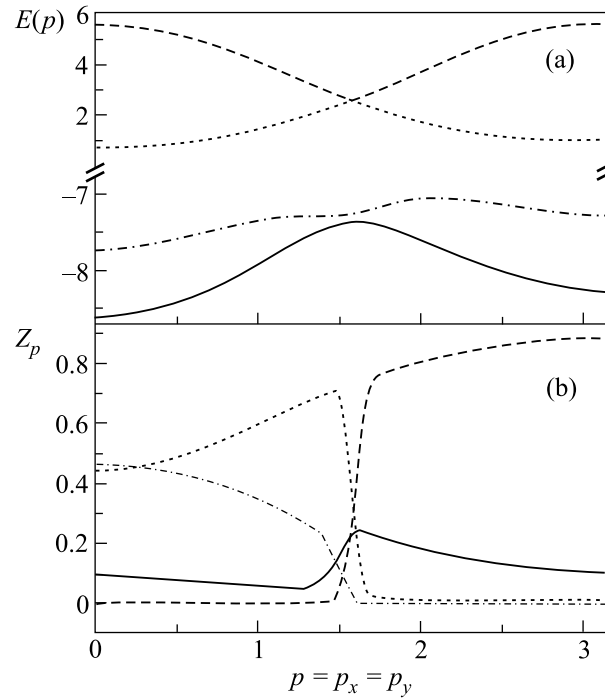


Рис.1. (а) Квазичастичный спектр $E^{(i)}(p)$ для $J = 5 \gg t, I, t = 1, I = 0.1$ вдоль симметричного направления $p = p_x = p_y$; (б) значения вычетов $Z_p^{(i)}$ электронной функции Грина $\langle\langle a_{p\sigma} | a_{p\sigma}^+ \rangle\rangle$ в полюсах $E^{(i)}(p)$. Различные типы линий отвечают четырем зонам

(в пределе сильной корреляции). На рис.1б представлены вычеты $Z_p^{(i)}$ электронных функций Грина, соответствующие полюсам $E^{(i)}(p)$:

$$\langle\langle a_{p\sigma} | a_{p\sigma}^+ \rangle\rangle = \langle\langle B_{1,p} | B_{1,p}^+ \rangle\rangle = \sum_{i=1}^4 \frac{Z_p^{(i)}}{\omega - E^{(i)}(p)}. \quad (37)$$

В пределе малой плотности вычеты $Z_p^{(i)}$ определяются решением уравнений движения для функций Грина $\langle\langle B_{i,p} | B_{1,p}^+ \rangle\rangle$ с неоднородными членами $W_{i,1} = \langle [B_{i,p}, B_{1,p}^+]_+ \rangle = \delta_{i,1}$. $Z_p^{(i)}$ определяет одночастичную спектральную функцию $A(p, \omega) = \sum_i Z_p^{(i)} \delta[\omega - E^{(i)}(p)]$. $Z_p^{(i)}$ характеризует вклад (вес) состояния голой частицы a_p в квазичастичное состояние с энергией $E^{(i)}(p)$. Поэтому $\sum_i Z_p^{(i)} = 1$.

На рис.1а нижние зоны (с центром в $E^{(s)} \cong -3J/2$) соответствуют движению локального полярона в синглетном состоянии $b^{(s)} = b - a/2$ и движению такого полярона, спаренного с Q -волной. Верхние зоны (с центром в $E^{(t)} \cong J/2$) описывают движение локального полярона в триплетном состоянии $b^{(t)} = b + 3a/2$ и его спаривание с Q -волной. Терминология “синглетов” и “триплетов” означает, что при

действию на состояние спиновой подсистемы операторы $b_r^{(s)+}, b_r^{(t)+}$ создают соответственно синглетную или триплетную спин-электронные пары на узле r .

Существенно, что полученные четыре зоны лишь приближенно симметричны по отношению к границе магнитной зоны Бриллюэна. В импульсном пространстве расстояние между двумя квазичастичными состояниями с одинаковой энергией может отличаться от антиферромагнитного вектора \mathbf{Q} . То есть обусловленный этими зонами “shadow band” эффект может отличаться от стандартного, управляемого вектором \mathbf{Q} в двухподрешеточном неелевском антиферромагнетике [10].

Нижняя часть спектра элементарных возбуждений в значительной степени определяется состояниями b_p и d_p . В то же время, как видно из рис.1b (сплошная кривая), возможное заполнение каждого p -состояния частицей с данным спином для нижней зоны не так уж мало и близко к 0.1. Отметим, что столь сильное отличие заполнения от единицы приводит к тому, что ФП велика уже при малых заполнениях.

Если значения трех энергетических параметров t, I, J одного порядка, элементарное возбуждение в любой из четырех зон является когерентной суперпозицией состояний a, b, c, d , в которую эти состояния входят со сравнимыми весами. Подчеркнем, что неучет Q -поляронов, то есть состояний c и d , ведет к исчезновению двух зон и может существенно изменить оставшиеся зоны.

3.2. Структура полярона при конечных температурах. В предыдущем разделе было описано расщепление зоны локального полярона благодаря его “одеванию” в антиферромагнитную спиновую волну $S_{\mathbf{Q}}$ при $T = 0$. Описание основывалось на макроскопичности ненулевой величины $\langle \mathbf{S}_{\mathbf{Q}} \mathbf{S}_{\mathbf{Q}} \rangle$. Однако очевидно, что с ростом температуры спектр должен меняться непрерывно и упомянутое расщепление не может исчезнуть скачком, хотя при конечных температурах $\langle \mathbf{S}_{\mathbf{Q}} \mathbf{S}_{\mathbf{Q}} \rangle$ не является уже величиной макроскопической.

Представим теперь метод описания спектра при конечной температуре [8]. В этом методе принимается более сложная структура спинового полярона: полярон является суперпозицией локального спинового полярона, локального спинового полярона, одетого в континуум спиновых волн $S_{\mathbf{q}}$ с \mathbf{q} близким к \mathbf{Q} , а при $T = 0$ и локального спинового полярона, одетого в $S_{\mathbf{Q}}$. Как и ранее, подход будет продемонстрирован на примере кондо-решетки. Однако здесь мы будем учитывать перескоки не только на первых, но и на вторых и третьих ближайших соседей. Такая модель

более реалистична, поскольку дает минимум нижней зоны, близкий к $\mathbf{k} = (\pi/2, \pi/2)$.

Итак, гамильтониан имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{J} + \hat{T} + \hat{I}, \\ \hat{J} &= J \sum_{\mathbf{r}} \mathbf{a}_{\mathbf{r}}^+ \tilde{\mathbf{S}}_{\mathbf{r}} \mathbf{a}_{\mathbf{r}}, \\ \hat{T} &= \tau_g \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{g}} a_{\mathbf{r}+\mathbf{g}}^+ a_{\mathbf{r}} + \tau_d \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{d}} a_{\mathbf{r}+\mathbf{d}}^+ a_{\mathbf{r}} + \\ &\quad + \tau_{2g} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{g}} a_{\mathbf{r}+2\mathbf{g}}^+ a_{\mathbf{r}}, \\ \hat{I} &= \frac{I}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{g}} \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{r}} \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{r}+\mathbf{g}}. \end{aligned} \quad (38)$$

Здесь $\mathbf{g} = \pm \mathbf{g}_x \pm \mathbf{g}_y$ – векторы ближайших соседей; \mathbf{d} и $2\mathbf{g}$ – векторы вторых и третьих ближайших соседей. Фермиевский оператор $a_{\mathbf{r}, \sigma}^+$ рождает дырку со спином $S = 1/2$ и проекцией $\sigma/2$ ($\sigma = \pm 1$). Как и ранее, в кондовском члене \hat{J} использовано обозначение $\tilde{\mathbf{S}}_{\mathbf{r}} = S_{\mathbf{r}}^{\alpha} \sigma^{\alpha}$.

Чтобы исследовать спектр возбуждений, введем базис узельных операторов

$$A_{\mathbf{r},1} = a_{\mathbf{r}}, \quad A_{\mathbf{r},2} = \tilde{\mathbf{S}}_{\mathbf{r}} a_{\mathbf{r}}. \quad (39)$$

Для учета при $T = 0$ спинового полярона бесконечного радиуса добавим также операторы

$$\begin{aligned} A_{\mathbf{r},j} &= \tilde{Q}_{\mathbf{r}} A_{\mathbf{r},i}, \quad \tilde{Q}_{\mathbf{r}} = N^{-1} \sum_{\rho} e^{i\mathbf{Q}\rho} \tilde{\mathbf{S}}_{\mathbf{r}+\rho}, \\ j &= i + 2, \quad i = (1 \div 2), \end{aligned} \quad (40)$$

которые описывают спаривание локального полярона со спиновыми возбуждениями (с дальним порядком). Отметим, что при $M = \langle \mathbf{S}_{\mathbf{Q}} \mathbf{S}_{\mathbf{Q}} \rangle = 0$ вклад от этих операторов исчезает. И, наконец, введем операторы

$$\begin{aligned} A_{\mathbf{r},j} &= \tilde{Q}_{\mathbf{r}}^{(1)} A_{\mathbf{r},i}, \quad \tilde{Q}_{\mathbf{r}}^{(1)} = N^{-1} \sum_{\rho, \mathbf{q} \in \Omega} e^{i\mathbf{q}\rho} \tilde{\mathbf{S}}_{\mathbf{r}+\rho}, \\ j &= i + 4, \quad i = (1 \div 2). \end{aligned} \quad (41)$$

Здесь Ω – небольшая область зоны Бриллюэна около точки (π, π) (см. ниже рис.3). Суммирование не включает $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$.

Операторы $A_{\mathbf{r},5}$ и $A_{\mathbf{r},6}$ описывают полярон промежуточного радиуса, то есть спаривание локального полярона со спиновыми волнами, квазиимпульс которых лежит в квадратной области вокруг \mathbf{Q} с линейными размерами L .

Спин-поляронный спектр $\varepsilon_i(\mathbf{k})$ (где i – номер зоны) находится с помощью матрицы двухвременных запаздывающих функций Грина $G_{i,j}(t, \mathbf{k})$ для операторов $A_{\mathbf{k}, \sigma, i}$. Система уравнений движения для $G_{i,j}(\omega, \mathbf{k})$ решалась в рамках стандартной проекционной техники Цванцига-Мори, где мы ограничивались указанным выше базисом операторов $\{A_{\mathbf{k}, \sigma, i}\}$.

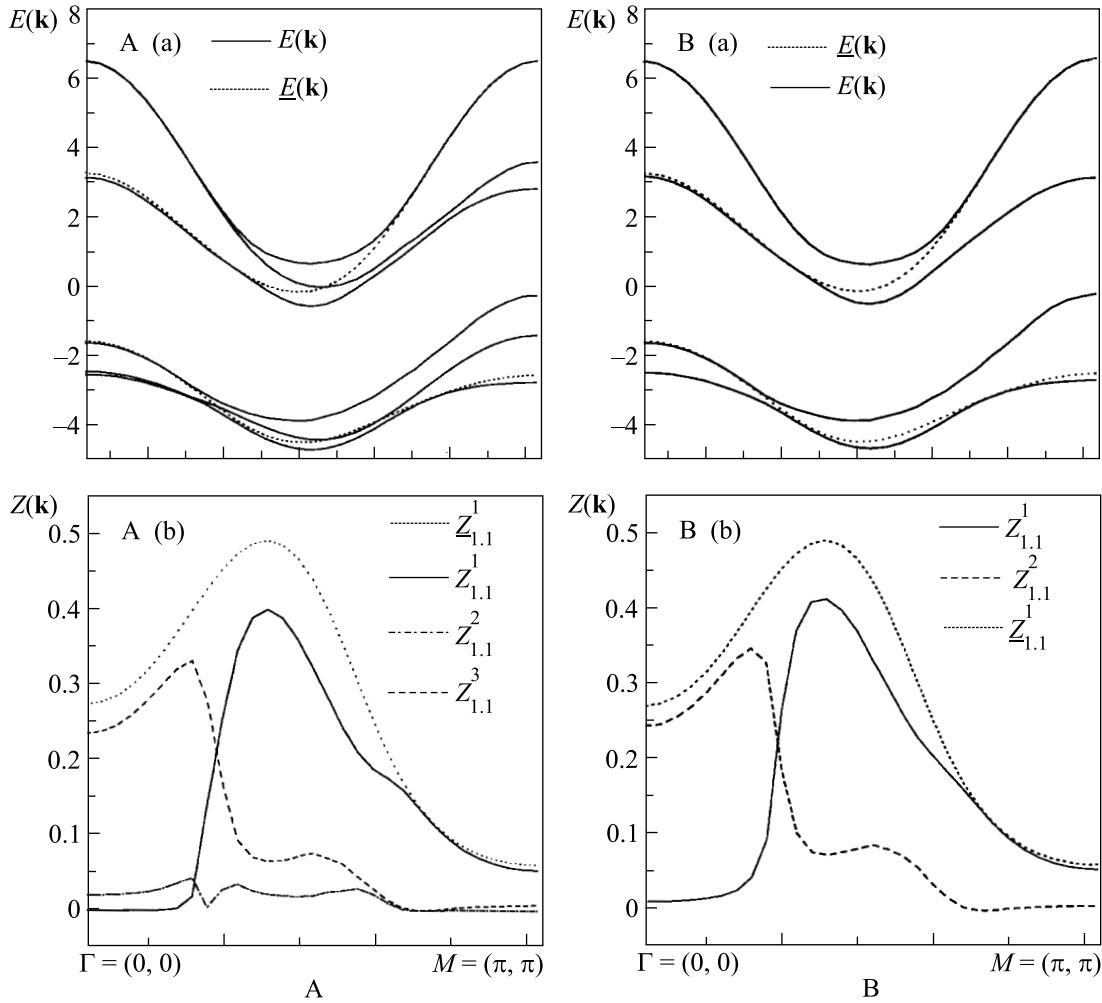


Рис.2. **А.**(а) Спектр $E^i(k)$ при $T = 0$ вдоль направления $k = k_x = k_y$. $\underline{E}^{(i)}(k)$ – то же в приближении локального поларона. (б) Вычеты $Z_{1,1}^{(i)}(k)$ функции Грина $\langle\langle a_{k\sigma}^+ | a_{k\sigma}^+ \rangle\rangle$, соответствующие полюсам $E^{(i)}(k)$. **В.**(а) Спектр $E^i(k)$ квазичастичных возбуждений при $T = 0.1I$ вдоль $k = k_x = k_y$. $\underline{E}^{(i)}(k)$ – то же в приближении локального поларона. (б) Вычеты $Z_{1,1}^{(i)}(k)$ функции Грина $\langle\langle a_{k\sigma}^+ | a_{k\sigma}^+ \rangle\rangle$, соответствующие полюсам $E^{(i)}(k)$. $Z_{1,1}^{(1)}(k)$ соответствует $\underline{E}^{(1)}(k)$ в приближении локального поларона

Не будем приводить здесь соответствующие матричные элементы из-за их громоздкости.

При $T = 0$ (случай 1) используется базис из шести операторов $i = 1 - 6$. При конечных температурах операторы $A_{\mathbf{k},\sigma,3}$ и $A_{\mathbf{k},\sigma,4}$ отсутствуют, так как они описывают полярон бесконечного радиуса, который может существовать только при наличии дальнего порядка.

Итак, функции Грина имеют следующий вид:

$$G_{i,j}(\omega, \mathbf{k}) = \sum_{l=1}^{12} \frac{Z_{(i,j)}^{(l)}(\mathbf{k})}{\omega - \varepsilon_l(\mathbf{k})}. \quad (42)$$

Величина $Z_{(1,1)}^{(l)}(\mathbf{k})$ имеет смысл числа голых дырок с данным спином σ и импульсом \mathbf{k} в состоянии $|\mathbf{k}, \sigma\rangle$

квазичастичной зоны $\varepsilon_l(\mathbf{k})$. Отметим, что спектральные веса (вычеты) $Z_{(i,j)}(\mathbf{k})$ удовлетворяют правилу сумм $\sum_s Z_{(1,1)}^{(s)}(\mathbf{k}) = 1$. Зависимость спектра спин-поляронных возбуждений ε_l от корреляционной функции $M = \langle \mathbf{S}_{\mathbf{Q}} \mathbf{S}_{\mathbf{Q}} \rangle$ проявляется только при учете Q -поляронных состояний $A_{\mathbf{r},3}$ и $A_{\mathbf{r},4}$. Для вычисления спектра $\varepsilon(\mathbf{k})$ необходимо знать спиновые корреляционные функции $\langle \mathbf{S}_{R_1} \mathbf{S}_{R_2} \rangle$. Метод их вычисления изложен в [11, 3]. В частности, при $T = 0$ были получены следующие численные значения для спиновых корреляционных функций: $\langle \mathbf{S}_R \mathbf{S}_{R+g} \rangle = -0.332$, $\langle \mathbf{S}_R \mathbf{S}_{R+d} \rangle = -0.145 + M$ и $\langle \mathbf{S}_R \mathbf{S}_{R+2g} \rangle = -0.144 + M$, где $M = 0.0577$. Использовались следующие значения параметров модели: $\tau = 1$, $\tau_{2g} = 0.5\tau$, $\tau_d = \tau_{2g}$, $\tau_g = -\tau_{2g}$, $J = 5\tau_{2g}$ и $I = 0.5\tau_{2g}$, выбранные так,

чтобы минимум нижней зоны лежал недалеко от точки $(\pi/2, \pi/2)$. Значение параметра L , который для операторов $A_{\mathbf{q}, 5(6)}$ определяет область Ω , для каждого \mathbf{k} в зоне Бриллюэна находилось вариационным методом. Оказалось, что размер области Ω сильно зависит от \mathbf{k} . Например, $L(0, 0) = 0.05\pi$, но $L(\pi, \pi) = 0.35\pi$. Вычисления производились в пределе малого заполнения $n \ll 1$, где n – полное число носителей на ячейку.

Случай 2 отвечает температуре $T = 0.1I$, которая соответствует корреляционной длине $\xi = 40$ постоянных решеток.

Результаты для наиболее интересных нижних зон $\epsilon_l(\mathbf{k})$ для \mathbf{k} вдоль симметричного направления от $\Gamma = (0, 0)$ до $M = (\pi, \pi)$ (в случаях 1 и 2) представлены соответственно на рис.2А и 2В. На рис.3 представлены эквивалентные поверхности для

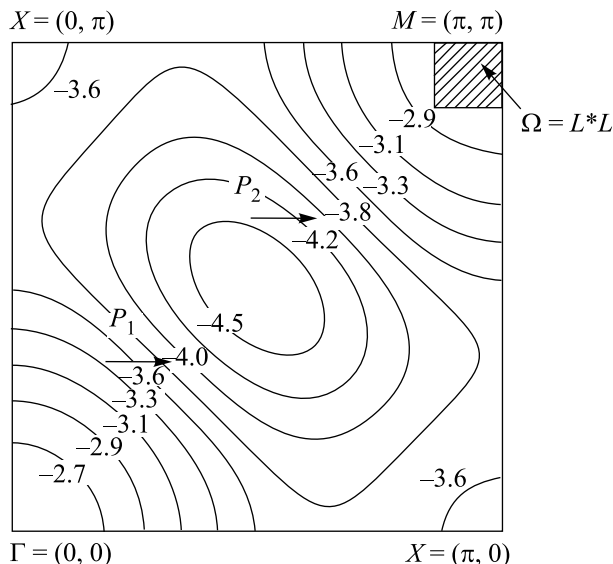


Рис.3. Поверхности постоянной энергии для нижней зоны $E^{(1)}(k)$ при $T = 0.1I$

первой зоны. Как видно из рис.2А(а) и 2В(а), в обоих случаях минимум нижней зоны лежит вблизи точки $(\pi/2, \pi/2)$, что характерно для модели Эмери и соответствует экспериментально наблюдаемому спектру [12]. Из рисунков также видно, что случаи $T = 0$ и $T \neq 0$ аналогичны, за исключением того, что при ненулевой температуре – когда нет дальнего порядка – пропадает вторая зона.

На рис.2А(б) и 2В(б) изображены веса голых носителей $Z_{1,1}$ в зависимости от \mathbf{k} соответственно для $T = 0$ и $T \neq 0$. При нулевой температуре вычет второй зоны пренебрежимо мал, а в остальном рисунки идентичны. Таким образом, набор операторов $A_{1,2,3,4}$, необходимый при $T = 0$, при исчезновении

дальнего порядка может быть адекватно заменен набором операторов $A_{1,2,5,6}$.

Подчеркнем, что полученные в этом разделе результаты, как и в случае нулевой температуры, описывают shadow-band эффект и сильное нарушение теоремы Латинджера.

Интересно, что с ростом температуры (то есть с убыванием корреляционной длины ξ) форма зон качественно не меняется вплоть до температур, соответствующих корреляционной длине в 3–6 постоянных решетки.

4. Спиновый полярон для реалистичной модели

Последние ARPES-исследования указывают на отличие спектров оптимально допированных купратов от купратов-изоляторов. Экспериментальные данные в недопированных соединениях [12, 13] указывают на изотропное дно зоны около точки $(\pi/2, \pi/2)$ в импульсном пространстве, большую разность в энергиях между $N = (\pi/2, \pi/2)$ и так называемую остаточную (remnant) ферми-поверхность [14] (поверхность, на которой происходит резкое падение одночастичного спектрального веса). В оптимально допированных купратах обнаружены [15–21] область плоской зоны, большая ФП с центром в точке $M = (\pi, \pi)$ и так называемая теневая (shadow) ФП, возникающая вследствие антиферромагнитных спиновых корреляций [10]. Область плоской зоны имеет форму протяженной седловой точки в направлении $(\pi/2, 0) - (\pi, 0)$. Теневая ФП напоминает основную ФП, но смещенную на антиферромагнитный вектор $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$. Кроме того, при промежуточном допировании наблюдается высокоэнергетическая псевдощель (high energy pseudogap) около точки X с энергией порядка $0.1 \div 0.2$ эВ [13, 22–24]. В рамках модели жесткой зоны изотропный минимум спектра недопированных соединений должен при увеличении допирования приводить к небольшим дырочным карманам около точки N . Однако экспериментальные данные указывают на отсутствие таких карманов [24], и, по-видимому, ФП при оптимальном и промежуточном допировании имеет дугообразный вид [25]. Разрешить такое очевидное противоречие можно только рассматривая эволюцию спектральной плотности при допировании.

До сих пор мы использовали только те или иные модификации модели решетки Кондо. Однако эта модель (так же, как, например, $t-J$ -модель) не содержит важных реалистических черт плоскости CuO_2 , в частности, конкретного вида решетки и прямых

кислород-кислородных перескоков. Достаточно реалистичной для плоскости CuO_2 можно считать эффективную спин-фермионную модель [26, 27] (она получается редукцией еще более сложной и полной модели Эмери).

Все вышеупомянутые ARPES-результаты в широком интервале допирования можно объяснить в рамках спин-поляронного подхода для спин-фермионной модели [28], если принять во внимание сложную структуру спинового полярона (суперпозицию спин-поляронных состояний различных радиусов [29]) и фрустрацию в спиновой подсистеме. Для этого в гамильтониане спин-фермионной модели надо учесть как кондовские перескоки кислородных дырок с переворотом спина меди с амплитудой τ , так и прямые кислород-кислородные перескоки с амплитудой h . Для спиновой подсистемы необходимо учитывать АФМ взаимодействие между первыми J_1 и вторыми J_2 ближайшими соседями квадратной решетки меди. Константы J_1 и J_2 выражаются через параметр фрустрации p : $J_1 = (1 - p)J$, $J_2 = pJ$, $0 \leq p \leq 1$, $J > 0$. Параметр фрустрации p растет с ростом концентрации дырок x .

Как и везде ранее, задача решается в рамках проекционной техники с учетом сферически-симметричного состояния спиновой подсистемы. Базисные операторы спинового полярона при конечной температуре строятся аналогично предыдущему разделу (с учетом двух возможных положений кислородной дырки в элементарной ячейке).

Мы приведем результаты только для режима слабого допирования $x = 0.02$ ($p = 0.1$) и для температуры $T = 0.2J$ (выбраны характерные значения параметров $\tau \sim 0.4$ эВ, $J = 0.4\tau$ и $h = 0.4\tau$).

На рис.4 представлены спектр $\varepsilon_1(\mathbf{k})$ и спектральный вес голлой дырки $n_{h,\sigma}^{(1)}(\mathbf{k})$ нижней зоны с помощью линий уровня $\varepsilon_1(\mathbf{k}) = \text{const}$ и $n_{h,\sigma}^{(1)}(\mathbf{k}) = \text{const}$ для значений параметра фрустрации $p = 0.1$. Кружки нанесены на контуры постоянной энергии, которые соответствуют ФП с $x = 0.02$. Диаметр кружков пропорционален спектральному весу $n_{h,\sigma}^{(1)}(\mathbf{k})$ на ФП.

Как видно из рис.4а, минимум $\varepsilon_1(\mathbf{k})$ близок к точке N и спектр довольно изотропен около дна зоны. Спектр вдоль направлений $\Gamma-M$ и $\Gamma-X-M$ воспроизводит ARPES-результаты (сравните, например, рис.3 в [13]). Ширина нижней дырочной зоны (верхней электронной) $W_1 \approx (4.4 - 3.3)\tau = 0.44$ эВ также соответствует ARPES-результатам $W_1 \approx 0.2$ эВ для $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCuO}_{6+0.5}$ [13], $W_1 \approx 0.3$ эВ для $\text{Ca}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ [14], $W_1 \approx 0.35$ эВ для La_2CuO_4 [12]. Некоторая не-

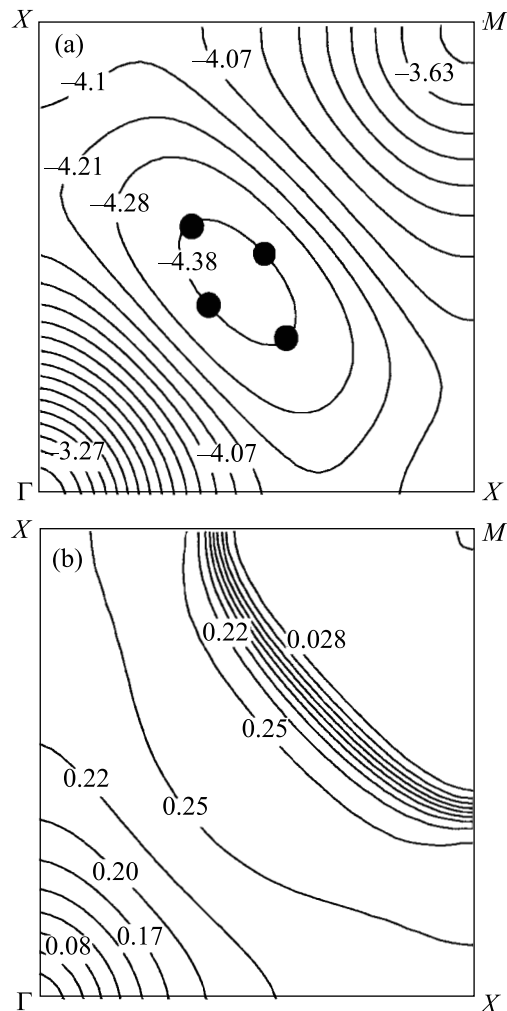


Рис.4. Дырочный спектр $\varepsilon_1(\mathbf{k})$ – (а) и спектральный вес голлой дырки $n_{h,\sigma}^{(1)}(\mathbf{k})$ – (б) для нижней зоны представлены линиями $\varepsilon_1(\mathbf{k}) = \text{const}$ (в единицах $\tau = 1$) и $n_{h,\sigma}^{(1)}(\mathbf{k}) = \text{const}$. Кружки на (а) нанесены на контур постоянной энергии, который соответствует ферми-поверхности, рассчитанной для дырочного допирования $x = 0.02$ (параметр фрустрации $p = 0.1$). Диаметр кружков пропорционален спектральному весу $n_{h,\sigma}^{(1)}(\mathbf{k})$ на ферми-поверхности. Результаты приведены в первом квадранте зоны Бриллюэна. Для точек симметрии приняты обозначения $\Gamma = (0, 0)$, $X = \{(\pi, 0), (0, \pi)\}$, $M = (\pi, \pi)$

определенность в этих экспериментальных данных связана с падением спектрального веса около точки Γ .

Наиболее важный результат в режиме очень малого допирования – резкое падение спектрального веса нижней зоны при движении по \mathbf{k} из точки N в точку M , см. рис.4б. Видно, что \mathbf{k} -линия такого резкого падения спектрального веса близка к той, которая дает остаточную ФП в ARPES-экспериментах

[14, 12]. Спектр спинового полярона на рис.4а обладает симметрией, близкой к симметрии магнитной зоны Бриллюэна, но спектральный вес $n_{h,\sigma}^{(1)}(\mathbf{k})$ имеет симметрию истинной зоны Бриллюэна, см. рис.4б.

Детальное рассмотрение [28] показывает, что учет сложной структуры спинового полярона и реальных черт плоскости CuO_2 позволяет в рамках единого подхода описать основные результаты ARPES-экспериментов и в широком интервале по дырочно-му допированию. В частности, наличие псевдощели при промежуточном допировании, а также большой поверхности Ферми и перемещения дна зоны в точку $M = (\pi, \pi)$ при переходе к оптимальному допированию.

5. Сверхпроводимость в подходе спинового полярона

До сих пор мы рассматривали только нормальные свойства сильнокоррелированных систем. Обратимся теперь к вопросу о сверхпроводимости. В этом разделе будет показано, что и при изучении сверхпроводящих свойств недостаточно рассматривать спаривание голых дырок $a_{\mathbf{k}\sigma}^+$ [30]. Необходимо более сложное возбуждение – спиновый полярон, который в общем случае описывается оператором

$$p_{\mathbf{k}\sigma}^+ = a_{\mathbf{k}\sigma}^+ + b_{\mathbf{k}\sigma}^+, \quad (43)$$

где $b_{\mathbf{k}}^+$ представляет собой сумму членов, имеющих следующий символический вид: $a_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2-\dots-\mathbf{k}_n}^+ \hat{S}_{\mathbf{k}_1} \hat{S}_{\mathbf{k}_2} \dots \hat{S}_{\mathbf{k}_n}$, $\hat{S}_{\mathbf{k}_i}$ (см., например, [31]).

Вернемся к простейшему варианту решетки Кондо, как в разд. 3.1. В рамках этой модели продемонстрируем важность учета аномальных функций Грина вида $\langle\langle b_{-\mathbf{k},-\sigma}^+ | a_{\mathbf{k},\sigma}^+ \rangle\rangle$. Более того, будет показано, что в рассматриваемом подходе без учета подобных функций Грина сверхпроводимость невозможна. Фактически это означает, что механизмом сверхпроводящего спаривания в данной модели является сильное взаимодействие электронов с возбуждениями антиферромагнитно упорядоченной спиновой подсистемы.

Напомним гамильтониан (квадратной) решетки Кондо:

$$H = \sum_{\mathbf{r},\mathbf{g}} t_{\mathbf{g}} a_{\mathbf{r}+\mathbf{g},\sigma}^+ a_{\mathbf{r},\sigma} + J \sum_{\mathbf{r},\sigma_1,\sigma_2} a_{\mathbf{r},\sigma_1}^+ S_{\mathbf{r}}^\alpha \hat{\sigma}_{\sigma_1,\sigma_2}^\alpha a_{\mathbf{r},\sigma_2} + \frac{1}{2} I \sum_{\mathbf{r},\mathbf{g}} S_{\mathbf{r}+\mathbf{g}}^\alpha S_{\mathbf{r}}^\alpha. \quad (44)$$

Все обозначения неоднократно пояснялись выше.

Запишем теперь первые два уравнения бесконечной цепочки уравнений для функций Грина, описывающих движение дырки на антиферромагнитном фоне (ср.(27), (28)):

$$\omega \langle\langle a_{\mathbf{r}\sigma} | a_{\mathbf{r}_1,\sigma}^+ \rangle\rangle = \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}_1} + \sum_{\mathbf{g}} t_{\mathbf{g}} \langle\langle a_{\mathbf{r}+\mathbf{g},\sigma} | a_{\mathbf{r}_1,\sigma}^+ \rangle\rangle + J \langle\langle b_{\mathbf{r}\sigma} | a_{\mathbf{r}_1,\sigma}^+ \rangle\rangle, \quad (45)$$

$$\omega \langle\langle b_{\mathbf{r}\sigma} | a_{\mathbf{r}_1,\sigma}^+ \rangle\rangle = \sum_{\mathbf{g},\sigma_1} t_{\mathbf{g}} \langle\langle S_{\mathbf{r}}^\alpha \hat{\sigma}_{\sigma,\sigma_1}^\alpha a_{\mathbf{r}+\mathbf{g},\sigma_1} | a_{\mathbf{r}_1,\sigma}^+ \rangle\rangle + i I e_{\alpha\beta\gamma} \sum_{\mathbf{g},\sigma_1} \hat{\sigma}_{\sigma,\sigma_1}^\alpha \langle\langle S_{\mathbf{r}+\mathbf{g}}^\beta S_{\mathbf{r}}^\gamma a_{\mathbf{r},\sigma_1} | a_{\mathbf{r}_1,\sigma}^+ \rangle\rangle + J \frac{3}{4} \langle\langle a_{\mathbf{r}\sigma} | a_{\mathbf{r}_1,\sigma}^+ \rangle\rangle - J \langle\langle b_{\mathbf{r}\sigma} | a_{\mathbf{r}_1,\sigma}^+ \rangle\rangle + J \sigma \langle\langle 2b_{\mathbf{r},-\sigma}^+ \sum_{\sigma_1} (\sigma_1 a_{\mathbf{r},\sigma_1} a_{\mathbf{r},-\sigma_1}) | a_{\mathbf{r}_1,\sigma}^+ \rangle\rangle. \quad (46)$$

Здесь $b_{\mathbf{r}\sigma} = S_{\mathbf{r}}^\alpha \hat{\sigma}_{\sigma,\sigma_1}^\alpha a_{\mathbf{r},\sigma_1}$. Как и везде ранее, в качестве основного состояния спиновой подсистемы принято сферически-симметричное синглетное состояние, которое характеризуется нулевым средним значением проекции спина на любом узле $\langle S_{\mathbf{r}}^\alpha \rangle = 0$ и ненулевыми антиферромагнитными спиновыми корреляциями $\langle S_0^\alpha S_{\mathbf{r}}^\alpha \rangle$. Последнее слагаемое в (46) пропорционально концентрации носителей x , которая является малым параметром задачи ($x \leq 0.2$ в существенной для ВТСП области).

Рассмотрим сначала систему в нормальном состоянии. Для замыкания цепочки уравнений воспользуемся неоднократно упомянутой проекционной техникой Цванцига-Мори [9]. Для системы уравнений (45), (46) это означает, что в правой части (46) необходимо аппроксимировать первые два члена их проекциями на некоторый выбранный операторный базис. При описании системы в нормальном состоянии простейший операторный базис образуется двумя операторами, которые возникают в первом уравнении (45) системы. Это операторы уничтожения для “голого” электрона $a_{\mathbf{r}\sigma}$ и внутриузельного спинового поляронного оператора $b_{\mathbf{r}\sigma}$. Выбор такого базиса означает, что спиновый полярон будет строиться как когерентная суперпозиция оператора $a_{\mathbf{k}\sigma}$ голый дырки и оператора $b_{\mathbf{k}\sigma}$ дырки, связанной с локальным спином. Такой локальный полярон является аналогом синглета Занга-Райса в трехзонной модели Хаббарда. В пределе сильного кондовского взаимодействия J такие локальные поляроны лучше всего описывают истинную нижнюю квазичастичную зону.

Для описания сверхпроводимости необходимо при выполнении проектирования расширить операторный базис a_r, b_r , добавив операторы a_r^+, b_r^+ . Единственный член, имеющий ненулевую проекцию на добавочное подпространство – последнее слагаемое в правой части (46). Его проекция на a_r^+ равна нулю, а проекция на b_r^+ имеет следующий вид (отметим, что в данном случае проекционная техника дает точно такой же результат, как и простейшее расщепление):

$$J\sigma \ll 2b_{r,-\sigma}^+ \sum_{\sigma_1} (\sigma_1 a_{r,\sigma_1} a_{r,-\sigma_1}) | a_{r_1}^+ \gg \approx \approx J\eta^* \ll \sigma b_{r,-\sigma}^+ | a_{r_1}^+ \gg, \quad (47)$$

$$\eta^* = \left\langle \sum_{\sigma_1} (\sigma_1 a_{r,\sigma_1} a_{r,-\sigma_1}) \right\rangle. \quad (48)$$

В результате в правой части (46) возникает аномальная функция Грина $F^2 = \sigma \ll b_{-k,-\sigma}^+ | a_{k,\sigma}^+ \gg$ и аномальное среднее η^* . Выполняя далее стандартные вычисления, в рамках описанной проекционной техники можно получить замкнутую систему уравнений для сверхпроводящего случая [30]. Нахождение из этой системы аномальных функций Грина позволяет получить стандартное уравнение для сверхпроводящей щели, содержащее спектры верхней, ω_2 , и нижней, ω_1 , поляронных зон. Опустив соответствующие промежуточные вычисления, приведем оценку для щели Δ при $T = 0$ в простейшем логарифмическом приближении, пренебрегая зависимостью Δ_k от k . Уравнение для щели имеет стандартный вид теории БКШ, но с эффективной константой связи $g \sim J^3/(\omega_2^2 - \omega_1^2) \sim J$, а не J^2 , как было бы в случае слабого кондовского взаимодействия.

Будем считать, что химический потенциал расположен около центра нижней зоны. Тогда – для типичных значений параметров $t_g = -t$, $J = 3t$, $I = 0.4t$, $t = 1$, $c_g = \langle \mathbf{S}_r \mathbf{S}_{r+g} \rangle = -0.33$ – легко убедиться, что $\omega_2 \sim J$. Энергетический параметр обрезания определяется либо шириной нижней зоны W_1 , либо характерной энергией спиновых возбуждений I . В нашем случае обе эти величины порядка t . В результате для Δ имеет место следующая оценка:

$$\Delta = W_1 \exp\left(-\frac{\pi W_1 \omega_2^2}{2\left(\frac{3}{4}\right)^2 J^3}\right) \sim t \exp(-t/J) \quad (49)$$

Типичное значение W_1 для ВТСП $0.3 \div 0.5$ эВ, что дает для щели разумную оценку $\Delta \approx 100$ К.

Рассматриваемая модель является наиболее яркой демонстрацией такой ситуации, когда только член (47), возникающий в результате проектирования на

сугубо поляронный оператор b^+ , приводит к сверхпроводящему спариванию (причем к спариванию как спиновых поляронов, так и голых дырок).

6. Заключение

Таким образом, мы продемонстрировали основные идеи спин-поляронного подхода для 2D систем с сильной корреляцией. Метод построения сложных поляронных состояний – а только такие состояния могут адекватно описать элементарные возбуждения – общий для всех сильно коррелированных моделей. Этот метод значительно проще и прозрачнее, чем, например, самосогласованное борновское приближение. По нашему мнению, он может оказаться результативным и при дальнейшем развитии теории сильно коррелированных систем, в частности, при исследовании кинетических свойств [32].

Работа выполнена в рамках проектов Российского фонда фундаментальных исследований (# 98-02-17187 и # 01-02-16719) и поддержана NATO Collaborative Linkage Grant # PST.CLG.976416.

1. A. F. Barabanov, L. A. Maksimov, and A. V. Mikheyenkov, *Theory of the Spin-Polaron for 2D Antiferromagnets*, in *Lectures on the Physics of Highly Correlated Electron Systems IV*, Ed. F. Mancini, AIP CP, vol. **527**, 2000, p.1.
2. H. Shimahara and S. Takada, *J. Phys. Soc. Jpn.* **60**, 2394 (1991).
3. А. Ф. Барабанов, В. М. Березовский, *ЖЭТФ* **106**, 1156 (1994) [*JETP* **79**, 627 (1994)].
4. L. A. Maksimov, A. F. Barabanov, and R. O. Kuzian, *Phys. Lett.* **A232**, 286 (1997).
5. L. A. Maksimov, R. Hayn, and A. F. Barabanov, *Phys. Lett.* **A238**, 288 (1998).
6. F. C. Zhang and T. M. Rice, *Phys. Rev.* **B41**, 7243 (1990).
7. H. Eskes, M. B. J. Meinders, and G. A. Sawatzky, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 1035 (1991).
8. А. Ф. Барабанов, О. В. Уразаев, А. А. Ковалев, Л. А. Максимов, *Письма в ЖЭТФ* **68**, 386 (1998) [*JETP Lett.* **68**, 412 (1998)].
9. H. Mori, *Prog. Theor. Phys.* **33**, 423 (1965).
10. A. P. Kampf and J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **B42**, 7967 (1990).
11. A. F. Barabanov and O. A. Starykh, *J. Phys. Soc. Jpn.* **61**, 704 (1992).
12. B. O. Wells, Z.-X. Shen, A. Matsuura et al., *Phys. Rev. Lett.* **74**, 964 (1995).
13. D. S. Marshall, D. S. Dessau, A. G. Loeser et al., *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4841 (1996).

14. F. Ronning, C. Kim, D. L. Feng et al., *Science* **282**, 2067 (1998).
15. J. G. Tobin, C. G. Olson, C. Gu et al., *Phys. Rev.* **B45**, 5563 (1992).
16. K. Gofron, J. C. Campuzano, H. Ding et al., *J. Phys. Chem. Solids* **54**, 1193 (1993).
17. A. A. Abrikosov, J. C. Campuzano, and K. Gofron, *Physica* **C214**, 73 (1993).
18. D. S. Dessau, Z.-X. Shen, D. M. King et al., *Phys. Rev. Lett.* **71**, 278 (1993).
19. D. M. King, Z.-X. Shen, D. S. Dessau et al., *Phys. Rev. Lett.* **73**, 3298 (1994).
20. P. Aebi, J. Osterwalder, P. Schwaller et al., *Phys. Rev. Lett.* **72**, 2757 (1994).
21. V. Borisenko, M. S. Golden, S. Legner et al., *Phys. Rev. Lett.* **84**, 4453 (2000).
22. A. G. Loeser, Z.-X. Shen, D. S. Dessau et al., *Science* **273**, 325 (1996).
23. H. Ding, T. Yokoya, J. C. Campuzano et al., *Nature*, **382**, 51 (1996).
24. H. Ding, M. R. Norman, T. Yokoya et al., *Phys. Rev. Lett.* **78**, 2628 (1997).
25. M. R. Norman, H. Ding, M. Randeria et al., *Nature* **392**, 157 (1998).
26. V. J. Emery, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2794 (1987).
27. V. J. Emery and G. Reiter, *Phys. Rev.* **B38**, 4547 (1988).
28. А. Ф. Барабанов, А. А. Ковалев, О. В. Уразаев и др., *ЖЭТФ* **119**, 777 (2001) [*JETP* **119**, 677 (2001)].
29. A. F. Barabanov, A. A. Kovalev, O. V. Urazaev, and A. M. Belemouk, *Phys. Lett.* **A265**, 221 (2000).
30. А. Ф. Барабанов, Л. А. Максимов, А. В. Михеенков, *Письма в ЖЭТФ* **74**, 362 (2001) [*JETP Lett.* **74**, 328 (2001)].
31. O. F. de Alcantara Bonfim and G. F. Reiter, in *Proc. of the Univ. of Miami Workshop on Electronic Structure and Mechanisms for High Temperature Superconductivity*, Ed. J. Ashkenazi, Plenum, N.Y., 1991.
32. S. A. Gordyunin, A. M. Belemouk, A. E. Karakozov, and A. F. Barabanov, *Phys. Lett.* **A285**, 197 (2001).