

К вопросу о кинетическом уравнении и электросопротивлении в системах с сильным спин-дырочным взаимодействием

А. М. Белемук, А. Ф. Барабанов, Л. А. Максимов*

Институт физики высоких давлений РАН, 142190 Троицк, Московская обл., Россия

* Российский научный центр “Курчатовский Институт”, 123182 Москва, Россия

Поступила в редакцию 9 июля 2007 г.

В рамках регулярной антиферромагнитной $s-d$ -модели рассматривается задача построения кинетического уравнения с учетом того, что в системах с сильным спин-дырочным взаимодействием (в частности, высокотемпературные сверхпроводники) движение дырки описывается в терминах спинового полярона. На примере электросопротивления показано, что кинетика определяется свойствами зон именно спинового полярона (а не “голой дырки”) и их квазичастичными вычетами Z_k . Рассматриваются случаи малого и оптимального допирования плоскости CuO_2 . Показано, что при едином рассмотрении этих случаев определяющими являются как перестойка спектра нижней полярной зоны, так и сильная зависимость квазичастичных вычетов Z_k от допирования.

PACS: 71.38.+i, 74.20.Mn, 74.72.-h, 75.30.Mb, 75.50.Ee

Известно, что из-за сильного взаимодействия носителей со спиновой подсистемой нормальное состояние высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) характеризуется сложным поведением спектральных и транспортных свойств [1–3]. Это относится к нетривиальной эволюции дырочной и спиновой подсистем при увеличении допирования, когда система из моттовского диэлектрика переходит в металлическое состояние [4].

Подавляющая часть работ [5], претендующая на микроскопическое описание кинетики в ВТСП, посвящена случаю оптимального допирования и основана на концепции почти антиферромагнитной фермий жидкости (ПАФМ) в рамках спин-фермионного гамильтониана \hat{H} на квадратной решетке:

$$\begin{aligned} \hat{H}_t &= \hat{H} + \hat{H}_f, \quad \hat{H}_f = -\hat{d}^x E^x, \\ \hat{H} &= \hat{H}_{00} + \hat{J}, \quad \hat{H}_{00} = \hat{H}_{0h} + \hat{I}, \end{aligned} \quad (1)$$

$$\hat{H}_{0h} = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (2)$$

$$\hat{I} = \frac{1}{2} I(1-p) \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{g}} S_{\mathbf{R}+\mathbf{g}}^\alpha S_{\mathbf{R}}^\alpha + \frac{1}{2} I p \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{d}} S_{\mathbf{R}+\mathbf{d}}^\alpha S_{\mathbf{R}}^\alpha, \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \hat{J} &= \frac{J}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \gamma_1}^\dagger S_{\mathbf{q}}^\alpha \hat{\sigma}_{\gamma_1 \gamma_2}^\alpha a_{\mathbf{k} \gamma_2} = \sum_{\mathbf{q}} \Lambda_{\mathbf{q}}^\alpha S_{\mathbf{q}}^\alpha, \\ \Lambda_{\mathbf{q}}^\alpha &= \frac{J}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \gamma_1}^\dagger \hat{\sigma}_{\gamma_1 \gamma_2}^\alpha a_{\mathbf{k} \gamma_2}. \end{aligned} \quad (3)$$

В гамильтониане \hat{H}_{00} слагаемое \hat{H}_{0h} описывает затравочные ферми-носители и содержит спектр $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ “голых” дырок, \hat{I} отвечает АФМ фruстрированному взаимодействию между $S = 1/2$ спинами; \mathbf{g} и \mathbf{d} – векторы первых и вторых ближайших соседей (б.с.), соответствующие константы АФМ обмена $I_1 = (1-p)I$ и $I_2 = pI$, p ($0 \leq p \leq 1$) – параметр фрустрации.

Слагаемое \hat{J} описывает взаимодействие носителей с подсистемой локализованных спинов $\mathbf{S}_{\mathbf{R}}$ ($\hat{\sigma}^\alpha$ – матрицы Паули, по дважды повторяющимся декартовым, α , и спиновым, γ_1, γ_2 , индексам везде подразумевается суммирование). Полный гамильтониан \hat{H}_t включает взаимодействие \hat{H}_f с электрическим полем E , \hat{d}^x – оператор дипольного момента.

Обычно для адекватного описания температурной зависимости электросопротивления $\rho(T)$ (а также коэффициента Холла $R_H(T)$) при решении кинетического уравнения (КИ) в рамках ПАФМ всегда в гамильтониане \hat{H}_{0h} заменяют спектр $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ на спектр нижней квазичастичной зоны спинового полярона $E_{\mathbf{k}}^{(1)}$, оставляя при этом в \hat{H}_{0h} операторы $a_{\mathbf{k}\sigma}$ фермиевскими. Спектр $E_{\mathbf{k}}^{(1)}$ отвечает “большой” поверхности Ферми (ПФ) и хорошо измеряется в экспериментах по фотоэмиссии с угловым разрешением (ARPES). Такая замена является не очевидной и неизбежно приводит к неправильному числу дырок $\tilde{n}_h \approx 1.2$ вместо реального $n_h \lesssim 0.2$. Однако с точки зрения физических величин, фигурирующих в КИ уравнении и в выражении для среднего тока, эта замена представляется разумной, так как кинетику должны определять именно скорости квазичастич, $\mathbf{V}_{\mathbf{k}}^{(1)} = \partial E_{\mathbf{k}}^{(1)} / \partial \mathbf{k}$,

нижней поляронной зоны, а не голых дырок, $\mathbf{v}_k = \partial\varepsilon_k/\partial\mathbf{k}$.

В настоящей работе в рамках гамильтониана (1) мы представим вывод КИ, который явно основывается на спин-поляронной концепции, приводит к наблюдаемойся зависимости $\rho(T)$ при большой ПФ и $n_h \lesssim 0.2$ (благодаря малой величине квазичастичных вычетов $Z_k^{(1)} \lesssim 0.2$ нижней поляронной зоны в функции Грина голой дырки), а также к естественному возникновению скоростей квазичастиц $\mathbf{V}_k^{(1)} = \partial E_k^{(1)}/\partial\mathbf{k}$.

Носители будем описывать в многополюсном приближении, то есть в достаточно полном базисе спинового полярона. Считая, что допиривание стимулирует фruстрацию спиновой подсистемы, рассматриваются случаи малого и оптимального допиривания плоскости CuO₂. Одновременное рассмотрение этих случаев оказывается возможным лишь при учете сильной перестройки функции вычетов $Z_k^{(1)}$ с допиранием.

Остановимся сначала на равновесных функциях Грина для голых дырок и на примере простейшего приближения введем спин-поляронные состояния.

При характерных значениях $J \simeq 0.1$ эВ гамильтониан \hat{J} отвечает сильному взаимодействию голой дырки со спиновой подсистемой. В результате элементарные зарядовые возбуждения должны описываться спиновым поляроном – суперпозицией оператора голой дырки $a_{k\sigma}$ и операторов спиновых поляронов, описывающих “одевание” $a_{k\sigma}$ в операторы спиновой подсистемы. Задача решается в рамках стандартного проекционного метода Мори-Цванцига для функций Грина. Метод подразумевает выбор конечного набора базисных операторов, который должен с самого начала учитывать спаривание голой дырки с локализованными спинами.

Известно [6], что минимальным “хорошим” узельным набором служит следующий набор базисных операторов:

$$\varphi_{r\sigma}^{(1)} = a_{r\sigma}, \quad \varphi_{r\sigma}^{(2)} = S_r^\alpha \hat{\sigma}_{\sigma\sigma_1}^\alpha a_{r\sigma_1}, \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \varphi_{r\sigma}^{(3)} &= \frac{1}{N} \sum_{\rho, \mathbf{q} \in \Omega} e^{i\mathbf{q}\rho} S_{r+\rho}^\alpha \hat{\sigma}_{\sigma\sigma_1}^\alpha a_{r\sigma_1}, \\ \varphi_{r\sigma}^{(4)} &= \frac{1}{N} \sum_{\rho, \mathbf{q} \in \Omega} e^{i\mathbf{q}\rho} S_{r+\rho}^\alpha \hat{\sigma}_{\sigma\sigma_1}^\alpha S_r^\beta \hat{\sigma}_{\sigma_1\sigma_2}^\beta a_{r\sigma_2}, \end{aligned} \quad (5)$$

$$\Omega = \{\mathbf{q}: |\pm(\pi/g) - q_{x,y}| < L\}.$$

Первые два оператора, $\varphi_{r\sigma}^{(1)}, \varphi_{r\sigma}^{(2)}$, можно трактовать как локальные спин-поляронные операторы, следующие два оператора, $\varphi_{r\sigma}^{(3)}, \varphi_{r\sigma}^{(4)}$, отвечают спиновому

полярону промежуточного радиуса и описывают спаривания локальных поляронных операторов $\varphi_{r\sigma}^{(1)}, \varphi_{r\sigma}^{(2)}$ со спин-волновыми операторами

$$S_\mathbf{q}^\alpha = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_\rho e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}+\rho)} S_{\mathbf{r}+\rho}^\alpha.$$

Особенностью операторов (5) является то, что они отражают спаривание спиновых волн $S_\mathbf{q}^\alpha$ с импульсами \mathbf{q} близкими к АФМ вектору $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$: \mathbf{q} заполняют область Ω , состоящую из четырех квадратов $L \times L$ в углах первой зоны Бриллюэна 3σ (ниже мы полагаем $\Omega = L \times L = 0.25(\pi/g)^2$). Спаривание с такими $S_\mathbf{q}^\alpha$ учитывает резкий пик спин-спинового структурного фактора в области, близкой к АФМ вектору \mathbf{Q} , и ведет к расщеплению нижней квазичастичной зоны, возникающей в приближении локального полярона [6]. Кроме того, учет конечной области Ω необходим для описания правильного предельного перехода $T \rightarrow 0$.

Стандартная проекционная процедура решения уравнений для функций Грина в импульсном представлении для операторов (4), (5) дает четыре зоны спинового полярона $E_k^{(s)}$ (s – номер зоны), явное выражение для функции Грина голой дырки $G_h(\mathbf{k}, \omega) = \langle\langle a_{k\sigma} | a_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle_\omega$, выражение для числа голых дырок $n_{k\sigma}$ через квазичастичные вычеты $Z_k^{(s)}$ и позволяет переписать гамильтониан \hat{H} (1) в поляронном базисе как \hat{H}_p :

$$\begin{aligned} G_h(\mathbf{k}, \omega) &= \sum_{s=1}^4 \frac{Z_k^{(s)}}{\omega - E_k^{(s)}}, \\ n_{k\sigma} &= \langle\langle a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} \rangle\rangle = \sum_{s=1}^4 Z_k^{(s)} n_F(E_k^{(s)}); \\ n_h &= \sum_{\mathbf{k}, \sigma, s} Z_k^{(s)} n_F(E_k^{(s)}), \end{aligned} \quad (6)$$

где $n_F(E_k) = (e^{(E_k - \mu)/T} + 1)^{-1}$, μ – химический потенциал;

$$\varphi_{\mathbf{k}, \sigma}^{(i)} = U_{ij}^{-1}(\mathbf{k}) \alpha_{\mathbf{k}\sigma}^{(j)}, \quad \langle\langle \alpha_{\mathbf{k}\sigma}^{(s)} | \alpha_{\mathbf{k}\sigma}^{(s')\dagger} \rangle\rangle_\omega = \frac{1}{\omega - E_k^{(s)}} \delta_{ss'}, \quad (7)$$

$$Z_k^{(s)} = \overline{U_{s1}^{-1}(\mathbf{k})} U_{s1}^{-1}(\mathbf{k}), \quad u_{\mathbf{k}s} = U_{s1}^{-1}(\mathbf{k}), \quad Z_k^{(s)} = u_{\mathbf{k}s}^2,$$

$$\sum_s Z_k^{(s)} = 1, \quad a_{\mathbf{k}, \sigma} = \sum_{s=1}^4 u_{\mathbf{k}s} \alpha_{\mathbf{k}\sigma}^{(s)},$$

$$\begin{aligned}\hat{H}_p &= \sum_{\mathbf{k}, s} E_{\mathbf{k}}^{(s)} \alpha_{\mathbf{k}\sigma}^{(s)\dagger} \alpha_{\mathbf{k}\sigma}^{(s)} = \hat{H}_{00} + \hat{J}_p, \\ \hat{J}_p &= \hat{P} \hat{J} \hat{P}, \quad \hat{P} = \sum_{\mathbf{k}, s} |\alpha_{\mathbf{k}, \gamma}^{(s)}| < \alpha_{\mathbf{k}, \gamma}^{\dagger(s)} |,\end{aligned}\quad (8)$$

Здесь \hat{P} – проекционный оператор на поляронное подпространство. Матрица $U_{ij}^{-1}(\mathbf{k})$ вычисляется в явном виде через спиновые корреляционные функции, которые в свою очередь находятся через восприимчивость $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ фрустрированной АФМ спиновой подсистемы.

Гамильтониан \hat{H}_p содержит оператор \hat{J}_p , который представляет собой часть \hat{J} , ответственную за формирование поляронов из голой дырки. Оператор \hat{J}_p учитывает только те матричные элементы \hat{J} , которые описывают процессы рассеяния полярона без изменения квазимпульса, то есть процессы вида $\hat{J}_p \alpha_{\mathbf{k}\sigma}^{(s1)} = \alpha_{\mathbf{k}\sigma}^{(s2)}$. Эти процессы рассеяния учитываются при формировании поляронов в рамках проекционного подхода.

Сравнение проекционного метода сложного спинового полярона [6] с вычислениями в рамках самосглосованного борновского приближения (SCBA) (при $T = 0$) [7] ясно показывает, что нижняя зона $E_{\mathbf{k}}^{(1)}$ и вычеты $Z_{\mathbf{k}}^{(1)}$ хорошо описывают SCBA-квазичастичный пик и его интенсивности. Верхние три зоны $E_{\mathbf{k}}^{(2,3,4)}$ эффективно описывают некогерентную часть $A_{incoh}(\mathbf{k}, \omega)$ у полной дырочной SCBA-спектральной функции

$$A_{SCBA}(\mathbf{k}, \omega) = Z_{\mathbf{k}}^{(1)} \delta(\omega - E_{\mathbf{k}}^{(1)}) + A_{incoh}(\mathbf{k}, \omega)$$

Движение голой дырки под действием, например, внешнего электрического поля в терминах полярных операторов представляет собой движение спиновых поляронов $\alpha_{\mathbf{k}\sigma}^{(s)}$ сразу по четырем зонам со скоростью $\mathbf{V}_{\mathbf{k}}^{(s)} = \partial E_{\mathbf{k}}^{(s)} / \partial \mathbf{k}$.

При рассмотрении кинетического уравнения следует ввести оператор $\hat{\tilde{J}}$, такой что $\hat{H} = \hat{H}_p + \hat{\tilde{J}}$. Здесь $\hat{\tilde{J}}$ следует понимать как оператор, учитывающий те матричные элементы \hat{J} , которые приводят к рассеянию между поляронами, $\hat{\tilde{J}} \alpha_{\mathbf{k}\sigma}^{(s1)} = \alpha_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^{(s2)} S_{-\mathbf{q}}^{\alpha}$, с изменением квазимпульса, $\mathbf{q} \neq \mathbf{0}$, и с одновременным возбуждением спиновой подсистемы. Очевидно, что во втором порядке по J именно эта вершина должна описывать столкновительный член в кинетическом уравнении для поляронов.

В поляронном представлении гамильтониан принимает вид

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{\tilde{J}}, \quad \hat{H}_0 = \hat{H}_{00} + \hat{J}_p = \hat{H}_p + \hat{I}, \quad (9)$$

$$\hat{H}_p = \sum_{\mathbf{k}, s} E_{\mathbf{k}}^{(s)} \alpha_{\mathbf{k}\sigma}^{(s)\dagger} \alpha_{\mathbf{k}\sigma}^{(s)},$$

$$\hat{\tilde{J}} = \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \Lambda_{\mathbf{q}}^{\alpha} S_{\mathbf{q}}^{\alpha},$$

$$\Lambda_{\mathbf{q}}^{\alpha} = \frac{J}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \left(\sum_{s1=1}^4 u_{\mathbf{k}s1} \alpha_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \gamma_1}^{\dagger(s1)} \right) \hat{\sigma}_{\gamma_1 \gamma_2}^{\alpha} \left(\sum_{s2=1}^4 u_{\mathbf{k}s2} \alpha_{\mathbf{k}\gamma_2}^{(s2)} \right), \quad (10)$$

$$\hat{H}_t = \hat{H} + \hat{H}_f, \quad \hat{H}_f = -\hat{d}^x E, \quad \hat{d}^x = e \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} x_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k}'\sigma}, \quad (11)$$

$$x_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \langle \mathbf{k} | \hat{x} | \mathbf{k}' \rangle = (\Delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}+\mathbf{q}} + \Delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}-\mathbf{q}})/2q|_{\lim(q=>0)},$$

$$\mathbf{q} = (q, 0); \quad x_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} = x_{\mathbf{k}', \mathbf{k}}. \quad (12)$$

В операторе \hat{d}^x подразумевается переход к операторам $\alpha_{\mathbf{k}\sigma}^{(s)}$ и введено квазиоднородное поле E , направленное вдоль оси X , см. (11).

Для получения выражения для электросопротивления в настоящей работе использован вариант теории линейного отклика, в котором ищется величина поля E , которое поддерживает фиксированную величину электрического тока j (а не ток при заданном поле). Отклонение от равновесия (\varkappa – параметр отклонения системы, задающий j) в начальный момент времени $t = 0$ характеризуем конечным набором операторов \hat{F}_l^s и матрица плотности $\hat{\rho}$ задается в виде

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}^0 + \hat{\phi}^0, \quad \hat{\rho}^0 = Z_0^{-1} \exp(-\hat{H}_0/T), \quad \langle \hat{A} \rangle = \text{Sp}\{\hat{\rho}^0 \hat{A}\}, \quad (13)$$

$$\hat{\phi}^0 = \hat{\rho}^0 \hat{F}, \quad \hat{F} = \sum_{l,s} \eta_l^s \hat{F}_l^s, \quad (14)$$

$$\langle \hat{F}_l^s \rangle_0 = 0, \quad \hat{F}_l^s|_{t=0} = \sum_{l_1, s_1} \eta_{l_1}^{s_1} \langle \hat{F}_l^s \hat{F}_{l_1}^{s_1} \rangle,$$

$$\hat{F}_l^s = \sum_{\mathbf{k}} F_l^s(\mathbf{k}) \alpha_{\mathbf{k}\sigma}^{(s)\dagger} \alpha_{\mathbf{k}\sigma}^{(s)}, \quad [\hat{F}_l^s, H_0] = 0, \quad [\hat{F}_l^s, \hat{\rho}^0] = 0. \quad (15)$$

Упомянем, что в токовом состоянии моменты $F_l^s(\mathbf{k})$ нечетны по \mathbf{k} , а простейшему одномоментному приближению, связанному с нижней поляронной зоной, отвечает момент $\hat{F}_l^1 = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{V}_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)\dagger} \alpha_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)}$.

Уравнение для эволюции матрицы плотности $\hat{\rho}_t = \hat{\rho} + \hat{\rho}'_t$, $i \frac{\partial \hat{\rho}'_t}{\partial t} = [(\hat{H}_0 + \hat{J} + \hat{H}_f), (\hat{\rho} + \hat{\rho}'_t)]$, и его решение для $\hat{\rho}_t$ ищем с точностью до членов первого порядка по $\hat{H}_f \sim E \sim \varkappa \lambda^2$, считая $\hat{\phi}^0 \sim \varkappa$, а $\hat{J} \sim \lambda$, λ – параметр рассеяния. В этом приближении, переходя к представлению взаимодействия $(\hat{A}(t) = e^{i\hat{H}_0 t} \hat{A} e^{-i\hat{H}_0 t})$, имеем

$$\rho'_t = (-i) \left\{ \int_0^t [H_f(\tau - t), \hat{\rho}^0] d\tau + \int_0^t [\hat{J}(\tau - t), \hat{\rho}] d\tau \right\} +$$

$$+ (-i)^2 \int_0^t d\tau \int_0^\tau d\tau' [\hat{J}(\tau - t), [\hat{J}(\tau' - t), \hat{\rho}^0]]. \quad (16)$$

Условия квазистационарности токовой матрицы плотности $\hat{\rho}$ на больших временах сводятся к $\overline{F_l^s}|_{t \rightarrow \infty} = \overline{F_l^s}|_{t=0}$, то есть системе уравнений

$$\text{Sp}\{\rho'_t \hat{F}_l^s\}|_{t \rightarrow \infty} = 0. \quad (17)$$

В пределе бесконечного числа моментов система (17) эквивалентна точному кинетическому уравнению для одночастичной неравновесной матрицы плотности. Уравнения системы (17) имеют обычный кинетический вид:

$$\begin{aligned} & i \int_0^t d\tau \text{Sp}\{\hat{F}_l^s [H_f(\tau - t), \hat{\rho}^0] + \\ & \int_0^t d\tau \int_0^\tau d\tau' \text{Sp}\{\hat{F}_l^s [\hat{J}(\tau - t), [\hat{J}(\tau' - t), \hat{\rho}^0]]\}|_{t \rightarrow \infty} = 0, \end{aligned} \quad (18)$$

первый и второй члены отвечают соответственно полевому и столкновительному членам, которые обозначим соответственно как tX_l^s и tP_l^s . Уравнения (17) определяют коэффициенты η_l^s , входящие в $\hat{\phi}^0$.

Детальный вид столкновительного члена в (18) содержит выражения вида $\text{Sp}\{\hat{F}_l^s (\Lambda_{\mathbf{q}_1}^\alpha(\tilde{\tau}) S_{\mathbf{q}_1}^\alpha(\tilde{\tau}) \Lambda_{\mathbf{q}_2}^\beta(\tilde{\tau}') S_{\mathbf{q}_2}^\beta(\tilde{\tau}') \hat{\rho}^0 \hat{F}_{l_1}^{s_1})\}$, ($\tilde{\tau} = \tau - t$, $\tilde{\tau}' = \tau' - t$), при вычислении которых используем приближение связанных мод (“mode-coupling approximation”) [8], которое состоит в том, что на первом этапе отдельно усредняются “внешние”, $S_{\mathbf{q}}^\alpha$, операторы (то есть $S_{\mathbf{q}}^\alpha$, входящие в \hat{J} (10)) и для них проводится первоначальное усреднение. Возникшие в результате такой процедуры неусредненные средние от оставшихся операторов вычисляются на следующем этапе: $\text{Sp}\{\hat{F}_l^s (\Lambda_{\mathbf{q}_1}^\alpha(\tilde{\tau}) S_{\mathbf{q}_1}^\alpha(\tilde{\tau}) \Lambda_{\mathbf{q}_2}^\beta(\tilde{\tau}') S_{\mathbf{q}_2}^\beta(\tilde{\tau}') \hat{\rho}^0 \hat{F}_{l_1}^{s_1})\} \Rightarrow \{(\text{Sp}\hat{F}_l^s \Lambda_{\mathbf{q}_1}^\alpha(\tilde{\tau}) \Lambda_{\mathbf{q}_2}^\beta(\tilde{\tau}') \hat{\rho}^0 \hat{F}_{l_1}^{s_1})\} \{(\text{Sp}\hat{\rho}^0 S_{\mathbf{q}_1}^\alpha(\tilde{\tau}) S_{\mathbf{q}_2}^\beta(\tilde{\tau}'))\}$.

В результате для столкновительного члена можно получить

$$P_l^s = 2N \sum_{l_1} \eta_{l_1}^{s_1} P_{ll_1}^{s,s_1}, \quad (19)$$

$$\begin{aligned} P_{ll_1}^{s,s_1} = & J^2 \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} (F_l^s(\mathbf{k}) - F_l^s(\mathbf{k} + \mathbf{q})) \times \\ & \times (F_{l_1}^{s_1}(\mathbf{k}) - F_{l_1}^{s_1}(\mathbf{k} + \mathbf{q})) Z_{\mathbf{k}}^{(s)} Z_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{(s_1)} \times \\ & \times n_F(E_{\mathbf{k}}^{(s)}) (1 - n_F(E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{(s_1)})) \times \\ & \times n_B(E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{(s)} - E_{\mathbf{k}}^{(s_1)}) \chi''(\mathbf{q}, (E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{(s_1)} - E_{\mathbf{k}}^{(s)})), \end{aligned} \quad (20)$$

$\chi''(\mathbf{q}, \omega)$ – мнимая часть спиновой восприимчивости, $n_B(\omega)$ – базе-функция.

Предполагая на вычислительном этапе, что квазидиагональность H_f (11) приводит в выражениях для $\hat{\phi}^0$ (13) к квазидиагональности \hat{F}_l^s , полевой член X_l^s в (18) приводится к виду

$$X_l^s = E \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}}^{x(s)} \left(\frac{-\partial n_F(E_{\mathbf{k}}^{(s)})}{\partial E_{\mathbf{k}}^{(1)}} \right) Z_{\mathbf{k}}^{(s)} F_l^s(\mathbf{k}). \quad (21)$$

И, наконец, для среднего тока можно получить

$$\begin{aligned} j^x = & \sum_{l,s} \eta_l^s \text{Sp}\hat{\rho} \hat{F}_l^s [\hat{H}_0 \hat{x}] = \frac{2}{g^2 a_z N} \times \\ & \times \sum_{l,s,\mathbf{k}} \eta_l^s F_l^s(\mathbf{k}) V_{\mathbf{k}}^{x(s)} Z_{\mathbf{k}}^s f^0(E_{\mathbf{k}}^{(s)}) (1 - f^0(E_{\mathbf{k}}^{(s)})), \end{aligned} \quad (22)$$

a_z – расстояние между плоскостями CuO₂ (при расчетах принималось $a_z = 6.6$ Å, объем элементарной ячейки $g^2 a_z = 93$ Å³).

Найденные из уравнения $X_l^s + P_l^s = 0$ (18) коэффициенты η_l^s позволяют определить плотность тока и диагональную компоненту тензора сопротивления ρ .

В интересующем нас случае допирования $n_h \lesssim 0.2$ химический потенциал μ лежит достаточно глубоко по энергии внутри нижней поляронной зоны. Это позволяет в выражениях для тока, полевого и столкновительного членов ограничиться рассмотрением только нижней зоны $s = 1$ и в выражениях (20), (22) снять суммирование по s . Таким образом задача свелась к обычному однозонному случаю, где в качестве характеристик спектра носителей выступает спектр нижней поляронной зоны. Существенное отличие от традиционных выражений состоит в том, что, как в уравнениях кинетики (20), (21), (22), так и в выражении для n_h (6) явным образом фигурирует функция вычетов $Z_{\mathbf{k}}^{(1)}$. Ниже будем учитывать только нижнюю поляронную зону и опускать ее индекс (1) в обозначениях энергии, вычетов, скоростей, а также у коэффициентов η_l и моментов $F_l(\mathbf{k})$ (13).

Известно, что зарядовая динамика носителей в плоскостях CuO_2 хорошо описывается трехзонной моделью Эмери [9, 10]. Расчет спектра спинового полярона на основе модели Эмери [6] приводит в широкой области допирования к спектру, наблюдаемому в экспериментах по ARPES. Ключевым для описания свойств нижней полярной зоны является предположение о соответствии между допированием в моделях со свободными носителями и фрустрацией p в чисто спиновой модели [11]. Это предположение физически естественно: движущаяся дырка разрушает магнитный порядок; в чисто спиновой модели то же самое происходит с ростом p . Кроме того, оно основано на сходном характере изменения спиновых корреляторов в зависимости от x и p . Подчеркнем, однако, что никаких строгих утверждений относительно соответствия $x \leftrightarrow p$ не существует. Однако фрустрация всегда присутствует в спиновой подсистеме у допированной плоскости CuO_2 . Даже в диэлектрическом пределе отношение обмена на вторых соседях к обмену на первых оценивается примерно в $I_2/I_1 \approx 0.1$ [12]. Широко обсуждается также роль фрустрации как движущей силы образования различных спин-жидкостных состояний. Считается, что в области $I_2/I_1 \approx 0.5$ (это отвечает $p \approx 0.3$) может иметь место квантовый фазовый переход [1]. Близкие значения параметра фрустрации принимаются при обсуждении страйп-сценария возникновения несоизмеримых пиков [3].

Уменьшение спиновой корреляционной длины ζ с ростом p соответствует изменению спиновых корреляционных функций, которые явным образом входят в уравнения для функций Грина спинового полярона и радикальным образом влияют на спектр $E_{\mathbf{k}}$ и на функцию вычетов $Z_{\mathbf{k}}$. Ниже будем рассматривать задачу электросопротивления для случая малой спиновой корреляционной длины порядка нескольких постоянных решетки $\zeta \simeq g$ – случай A ($p \simeq 0.3$) и для большой $\zeta \gtrsim 10g$ – случай B ($p \simeq 0.1$). Случаи A и B мы соотносим к купратам, близким к оптимальному допированию и к сильно недодопированным купратам.

Спин-фермионный гамильтониан (1) применительно к модели Эмери в случае A приводит к спектру $E_{\mathbf{k}}^A$ и функцию вычетов $Z_{\mathbf{k}}^A$ [6], характерный вид которых приведен на рис.1 и 2. Аналитический вид $E_{\mathbf{k}}^A$ аппроксимируется с помощью гармоник квадратной симметрии:

$$E_{\mathbf{k}}^A = \tau(a_1 \gamma_g(\mathbf{k}) + a_2 \gamma_g^2(\mathbf{k}) + a_3 \gamma_d(\mathbf{k}) + a_4 \gamma_d^2(\mathbf{k}) + a_5 \gamma_g(\mathbf{k}) \gamma_d(\mathbf{k})); \quad (23)$$

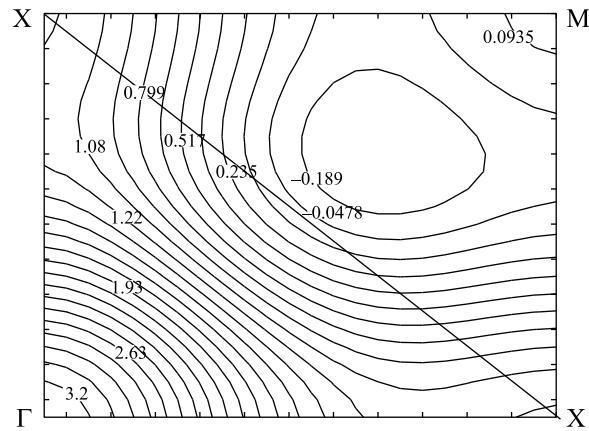


Рис.1. Диорочный спектр $E_{\mathbf{k}}^A$ (23), представленный линиями $E_{\mathbf{k}}^A = \text{const}$ в единицах $\tau = 0.2$ эВ в первой четверти ЗБ

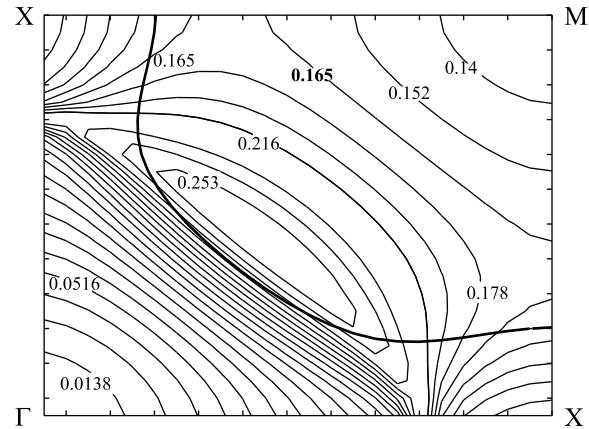


Рис.2. Функция вычетов $Z_{\mathbf{k}}^A$ (допирание близкое, к оптимальному), представленная линиями постоянных значений в первой четверти ЗБ. Жирная линия – ПФ в случае A

$$\begin{aligned} \gamma_g(\mathbf{k}) &= (\cos gk_x + \cos gk_y)/2, \\ \gamma_d(\mathbf{k}) &= \cos gk_x \cos gk_y, \end{aligned} \quad (24)$$

где $a_1 = 1.5, a_2 = 3.0, a_3 = -1.25, a_4 = 0.0, a_5 = 0.1$. Ниже предполагаются следующие характерные для модели Эмери значения энергетических параметров: $\tau = 0.2$ эВ, $J = \tau$, $I = 0.5\tau$, температура $T = 0.1I \approx 120$ К.

Вид $Z_{\mathbf{k}}^B$ приведен на рис.3. Что касается спектра $E_{\mathbf{k}}^B$, то его вид качественно отвечает следующему сценарию эволюции $E_{\mathbf{k}}$ при увеличении ζ : дно зоны спектра $E_{\mathbf{k}}^A$ (см. рис.1) сдвигается вдоль диагонали $\Gamma \leftrightarrow M$ в направлении точки $\Gamma(0, 0)$, что обеспечивает при малом допировании “большую” ПФ, расположенную вблизи границы магнитной ЗБ (МЗБ) $X \leftrightarrow X$. К такому сценарию приводят как ARPES эксперимента, так и вычисления спектра спинового

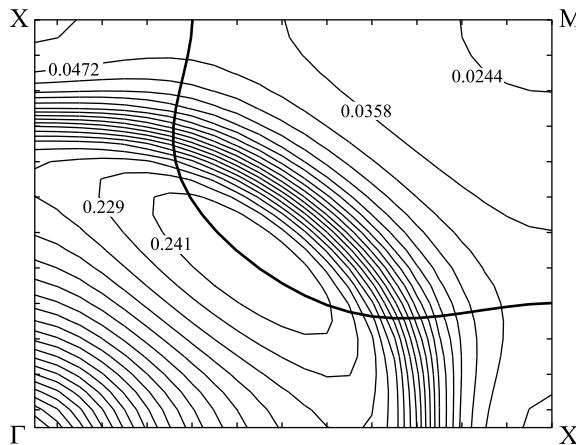


Рис.3. Функция вычетов $Z_{\mathbf{k}}^B$ (малое допиривание), представленная линиями постоянных значений в первой четверти ЗБ. Жирная линия – ПФ в случае B

полярона. При этом неизбежно вблизи ПФ и МЗБ возникает уплощение спектра $E_{\mathbf{k}}^B$ относительно спектра $E_{\mathbf{k}}^A$, которое можно трактовать как сужение зоны при усиливании поляронного эффекта (уменьшении фрустрации). Это сужение мы будем учитывать, принимая $E_{\mathbf{k}}^B = 0.75E_{\mathbf{k}}^A$. Электросопротивление вычислялось для ПФ, представленных жирными линиями на рис.2 и 3 соответственно для случаев A ($\mu^A = 0.82\tau$) и B ($\mu^B = 0.375\tau$).

Чтобы при этом явно прояснить роль уплощения $E_{\mathbf{k}}$ и зависимости $Z_{\mathbf{k}}$ от \mathbf{k} , мы в обоих случаях используем единую спиновую восприимчивость $\chi(\mathbf{q}, \omega) = -\langle\langle S_{\mathbf{q}}^{\alpha} | S_{-\mathbf{q}}^{\alpha} \rangle\rangle_{\omega+i\epsilon}$ следующего вида:

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{-A_{\mathbf{q}}}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2 + i\omega\gamma}, \quad (25)$$

который возникает в рамках сферически симметричного самосогласованного подхода [13, 14] в методе не-приводимых двухвременных запаздывающих функций Грина $\langle\langle S_{\mathbf{q}}^{\alpha} | S_{-\mathbf{q}}^{\alpha} \rangle\rangle_{\omega+i\epsilon}$ [15, 16, 14] или методе функций памяти [17]. Спиновая восприимчивость выбирается такой же, как в при вычислении электросопротивления при $T = 0.1I$ в [18], где подробно обсуждаются метод самосогласованного вычисления $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ и выбор затухания $\gamma = 0.45I$.

Выход за традиционное одномоментное приближение при решении КИ принципиально необходим для учета сильной анизотропии рассеяния из-за сильного рассеяние носителей на спиновой моде с АФМ вектором \mathbf{Q} . Большое число моментов также необходимо для демонстрации сходимости метода.

Ниже в качестве моментов $F_l(\mathbf{k})$ функции распределения используются полиномы от компонент скорости $V_{\mathbf{k}}^{\alpha}$ и ее производных

$$F_l^E(\mathbf{k}) = \{V_{\mathbf{k}}^x, (V_{\mathbf{k}}^y)^2 V_{\mathbf{k}}^x, \frac{\partial V_{\mathbf{k}}^x}{\partial k_y} V_{\mathbf{k}}^y, \frac{\partial V_{\mathbf{k}}^y}{\partial k_x} V_{\mathbf{k}}^x, \frac{\partial V_{\mathbf{k}}^x}{\partial k_y} \frac{\partial V_{\mathbf{k}}^y}{\partial k_x} V_{\mathbf{k}}^x, (V_{\mathbf{k}}^x)^3, \frac{\partial V_{\mathbf{k}}^x}{\partial k_x} V_{\mathbf{k}}^x\}. \quad (26)$$

Для хорошей сходимости оказывается достаточным учет первых трех-четырех моментов.

В случае A вычисления приводим к значению электросопротивления $\rho_A = 85.2 \text{ мкОм}\cdot\text{см}$ и числу дырок $n_h = 0.21$, что сравнимо с $\rho(T = 120 \text{ K}) \approx 100 \text{ мкОм}\cdot\text{см}$ для $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ при $0.16 > x > 0.22$ [4]. Если вычислять электросопротивление, формально полагая $Z_{\mathbf{k}}^A = 1$, это ρ_A обозначим как $\tilde{\rho}_A$ (ниже с “волной” обозначаются величины, вычисленные в предположении $Z_{\mathbf{k}}^A = 1$), то получим $\tilde{\rho}_A = 84.2 \text{ мкОм}\cdot\text{см} \approx \rho_A$ и $\tilde{n}_h \approx 1.13$. Близость значений $\tilde{\rho}_A \approx \rho_A$ связана с тем, что $Z_{\mathbf{k}}^A$ слабо зависит от \mathbf{k} в области \mathbf{k} -пространства ЗБ, которая находится вблизи ПФ и дает вклад в кинетику. В этой области $Z_{\mathbf{k}} \approx \text{const} = Z$. Тогда, как видно из (19), (20), (21), $\eta_l \sim Z^{-1}$ и определяемое током (22) сопротивление ρ не зависит от величины Z . В этом случае остаются справедливы ответы, полученные в рамках спин-фермионных моделей, не учитывающих функцию вычетов. Однако очевидно, что малость $Z_{\mathbf{k}}^A$ (характерная величина $Z_{\mathbf{k}}^A \lesssim 0.2$) и зависимость $Z_{\mathbf{k}}$ от \mathbf{k} во всей области \mathbf{k} -пространства ЗБ, см. рис.2, приводят при большой ПФ к $n_h \lesssim 0.2$ и влияет на положение ПФ относительно магнитной ЗБ. Последнее существенно определяет величину интеграла столкновений при сильном рассеянии на АФМ вектор \mathbf{Q} .

Переходя к случаю B прежде всего отметим, что $Z_{\mathbf{k}}^B$ и ПФ, рис.3, правильно отражают свойства спектра недодированных купратов: при движении вдоль ПФ от точки пересечения с диагональю ГМ к точке пересечения ПФ с границей ЗБ XM значение дырочных вычетов $Z_{\mathbf{k}}^B$ падает от 0.24 до 0.04, что качественно отражает известное открытие псевдощели на ПФ. Вычисления в случае B приводят к $\rho_B = 231.1 \text{ мкОм}\cdot\text{см}$ и числу дырок $n_h = 0.08$, что близко к $\rho(T = 120 \text{ K}) \approx 220 \text{ мкОм}\cdot\text{см}$ для $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ при $x \approx 0.1$ [4]. Формально полагая $Z_{\mathbf{k}} = 1$, можно найти $\tilde{\rho}_B = 162.1 \text{ мкОм}\cdot\text{см}$ и $\tilde{n}_h \approx 0.92$. То есть в случае малого допирования учет зависимости функции вычетов $Z_{\mathbf{k}}$ от \mathbf{k} становится существенным. Кроме того, полностью нарушается эмпирическое приближение $n_h \approx \tilde{n}_h - 1$.

Наши вычисления демонстрируют также сильную зависимость ρ от сужения зоны, которая в простых металлах описывается формулой Друде $\rho = m^*/ne^2\tau$. Оказывается, что если принять представление на рис.3 положение ПФ в ЗБ и вычислять электросопротивление с неуплощенным спектром $E_{\mathbf{k}}^A$

(жесткая зона, но с вычетами $Z_{\mathbf{k}}^B$, рис.3), то со- противление окажется равным $\rho'_B = 124.9 \text{ мкОм}\cdot\text{см}$ ($\ll 231.1 \text{ мкОм}\cdot\text{см}$), при этом n_h остается прежним $n_h = 0.08$. Если в том же случае B (напомним, в случае B ПФ всегда расположена так, как представлено на рис.3) при жесткой зоне $E_{\mathbf{k}} = E_{\mathbf{k}}^A$ принять приближение “жестких” вычетов $Z_{\mathbf{k}} = Z_{\mathbf{k}}^A$, то это приведет еще к меньшему электросопротивлению $\rho''_B = 89.5 \text{ мкОм}\cdot\text{см}$. Если же в случае жесткой зоны положить $Z_{\mathbf{k}} = 1$, то окажется $\tilde{\rho}'_B = 82.25 \text{ мкОм}\cdot\text{см}$ и $\tilde{n}_h \approx 0.92$.

Итак, кроме вывода кинетического уравнения в случае спин-поляронной природы носителей, мы показали, что при описании кинетики на основе поверхностей Ферми, даваемых ARPES измерениями при различном допировании (например, ПФ на рис.2,3), необходим учет как изменения функции вычетов $Z_{\mathbf{k}}$, так и сужения зоны.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований.

1. P. A. Lee, N. Nagaosa, and X.-G. Wen, Rev. Mod. Phys. **78**, 173 (2006).
2. A. Damascelli, Z. Hussain, and Z.-X. Shen, Rev. Mod. Phys. **75**, 473 (2003).
3. S. Sachdev, in *Quantum magnetism*, Lecture Notes in Physics, Springer, Berlin, 2004; cond-mat/0401041; M. Vojta, T. Vojta, and R. K. Kaul, Phys. Rev. Lett. **97**, 097001 (2006).
4. Y. Ando, Y. Kurita, S. Komiya et al., Phys. Rev. Lett. **92**, 197001 (2004).
5. B. P. Stojkovic and D. Pines, Phys. Rev. B **55**, 8576 (1997); A. Perali, M. Sindel, and G. Kotliar, Eur. Phys.

- J. B **24**, 487 (2001); R. Hlubina and T. M. Rice, Phys. Rev. B **51**, 9253 (1995); A. Malinowski, M. Z. Cieplak, S. Guha et al., Phys. Rev. B **66**, 104512 (2002).
6. А. Ф. Барабанов, А. А. Ковалев, О. В. Уразаев и др., ЖЭТФ **119**, 777 (2001); А. Ф. Barabanov, A. A. Kovalev, O. V. Urazaev, and A. M. Belemouk, Phys. Lett. A **265**, 221 (2000); А. Ф. Барабанов, Е. Жасинас, О. В. Уразаев, Л. А. Максимов, Письма в ЖЭТФ **66**, 173 (1997) (JETP Lett. **66**, 182 (1997)).
7. R. O. Kuzian, R. Hayn, A. F. Barabanov, and L. A. Maksimov, Phys. Rev. B **58**, 6194 (1998).
8. N. Plakida, Z. Phys. B **103**, 383 (1997).
9. V. J. Emery, Phys. Rev. Lett. **58**, 2794 (1987), V. J. Emery and G. Reiter, Phys. Rev. B **38**, 4547 (1988).
10. F. C. Zhang and T. M. Rice, Phys. Rev. B **37**, 3759 (1988).
11. M. Inui, S. Doniach, and M. Gabay, Phys. Rev. B **38**, 6631 (1988).
12. J. F. Annet, R. M. Martin, A. K. McMahan et al., Phys. Rev. B **40**, 2620 (1989).
13. H. Shimahara and S. Takada, J. Phys. Soc. Jpn. **60**, 2394 (1991).
14. А. Ф. Барабанов, В. М. Березовский, ЖЭТФ **106**, 1156 (1994); J. Phys. Soc. Jpn. **63**, 3974 (1994); А. Ф. Barabanov and L. A. Maksimov, Phys. Lett. A **207**, 390 (1995).
15. Ю. А. Церковников, ТМФ **7**, 250 (1971); **49**, 219 (1981).
16. N. N. Plakida, Phys. Lett. A **43**, 481 (1973).
17. P. Prelovšek, I. Sega, and J. Bonča, Phys. Rev. Lett. **92**, 027002 (2004); I. Sega, P. Prelovšek, and J. Bonča, Phys. Rev. B **68** 054524 (2003).
18. А. Ф. Барабанов, А. В. Михеенков, and А. М. Белемук, Phys. Lett. A **365**, 469 (2007); cond-matt/060924; А. В. Михеенков, А. Ф. Барабанов, ЖЭТФ **132**, вып. 8 (2007) (в печати).