

Эффективные взаимодействия и природа куперовской неустойчивости спиновых поляронов на 2D решетке Кондо

B. В. Вальков^{1)+*}[△], М. М. Коровушкин⁺, А. Ф. Барабанов[□]

⁺Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отд. РАН, 660036 Красноярск, Россия

^{*}Сибирский федеральный университет, 660041 Красноярск, Россия

[△]Сибирский государственный аэрокосмический университет, 660074 Красноярск, Россия

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

Поступила в редакцию 18 июля 2008 г.

Показано, что в режиме сильной связи для двумерной решетки Кондо между спиновыми поляронами возникают двух- и трехцентровые взаимодействия, приводящие как к индуцированию куперовской неустойчивости, так и к ее подавлению. Существенно, что, в отличие от $t-J^*$ -модели, трехцентровые взаимодействия способствуют куперовскому спариванию и обеспечивают реализацию сверхпроводящей фазы с высокой критической температурой T_c . Рассчитанные концентрационные зависимости T_c демонстрируют хорошее соответствие с экспериментальными данными по купратным сверхпроводникам.

PACS: 71.10.Fd, 71.27.+a, 74.20.Mn, 74.72.-h, 75.30.Mb, 75.50.Ee

1. Известно, что электронная структура CuO_2 -плоскости высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) может быть хорошо описана в рамках модели Эмери [1, 2]. При низком уровне легирования соотношение между параметрами модели таково, что можно перейти к эффективному гамильтониану. В рамках этого гамильтониана состояния ионов меди являются гомеополярными, характеризуются наличием спинового момента $S = 1/2$ и связываются между собой через механизм косвенного обменного взаимодействия. Дырочные носители тока кислородной подсистемы посредством $s-d$ -обменной связи взаимодействуют с локализованными спиновыми моментами ионов меди. Таким образом, хорошей моделью для описания низкоэнергетического спектра фермиевских возбуждений ВТСП является решетка Кондо.

Для нормальной фазы особенности элементарных возбуждений, найденные для решетки Кондо, к настоящему времени изучены достаточно хорошо. Ключевой идеей при таком подходе является концепция спинового полярона [3], в соответствие с которой элементарное возбуждение в 2D антиферромагнетике (АФМ) может быть представлено как частица (электрон или дырка), окруженная облаком спиновых флюктуаций. Эта сложная квазичастица, обладающая ренормированной массой и движущаяся на фоне АФМ упорядочения, и является спиновым полaronом [4].

Такое описание фермиевских возбуждений в ВТСП является оправданным, если константа $s-d$ -обменного взаимодействия больше интеграла пересека, а концентрация носителей тока относительно мала. При этом концепция спинового полярона позволяет сравнительно просто воспроизвести особенности псевдощелевого поведения ВТСП [5]. Это обстоятельство делает актуальным постановку вопроса об описании сверхпроводящей фазы в условиях, когда куперовская неустойчивость развивается не для затравочных фермionов, а в подсистеме спиновых поларонов. Рассмотрение этой задачи является предметом данной работы.

2. Для описания сверхпроводящей фазы в ансамбле спиновых поларонов запишем гамильтониан решетки Кондо в следующем виде:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= J \sum_f \mathbf{S}_f \mathbf{s}_f + U \sum_f \hat{n}_{f\uparrow} \hat{n}_{f\downarrow} + \hat{H}_{\text{int}}, \\ \hat{H}_{\text{int}} &= \sum_{fm\alpha} t_{fm} c_{f\alpha}^\dagger c_{m\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{fm} I_{fm} \mathbf{S}_f \mathbf{S}_m. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь два первых слагаемых гамильтониана описывают $s-d$ -обменное взаимодействие АФМ типа ($J > 0$) между локализованными спиновыми моментами ионов меди и спиновыми моментами дырок, а также хаббардовское отталкивание двух дырок с энергией Хаббарда U , находящихся на одном узле, \mathbf{S}_f – векторный оператор локализованного спинового момента, \mathbf{s}_f – векторный оператор спина дырки. В атомном представлении эти слагаемые соответствуют гамиль-

¹⁾e-mail: vvv@iph.krasn.ru

тониану \hat{H}_0 . Оператор взаимодействия учитывает кинетическую энергию дырок, записанную в представлении Ванье, а также гейзенберговское обменное взаимодействие АФМ типа в подсистеме локализованных спиновых моментов, $c_{f\alpha}^\dagger$ и $c_{f\alpha}$ – операторы рождения и уничтожения дырки на узле f с проекцией спина α .

Вывод эффективных взаимодействий, возникающих между спин-поляронными квазичастицами, основан на использовании условия, что $s-d$ -обменный интеграл J и энергия Хаббарда U являются наибольшими энергетическими параметрами рассматриваемой системы. В этом случае естественно перейти к представлению, в котором сильные взаимодействия принимают диагональный вид. С этой целью введем полный набор восьми одноузельных состояний. Обозначим посредством $| \uparrow \rangle$ и $| \downarrow \rangle$ одноузельные состояния, не содержащие дырок, в которых проекции локализованного спина равняются $+1/2$ и $-1/2$, соответственно. Далее в этом разделе для краткости будем опускать индекс узла. Состояния с одной дыркой на узле классифицируются по значению полного момента и его проекции. Вектор

$$|S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (c_{-1/2}^\dagger | \uparrow \rangle - c_{1/2}^\dagger | \downarrow \rangle)$$

соответствует состоянию спинового синглета с нулевым значением полного момента. Триплетные состояния с проекцией полного момента $\pm 1, 0$ описываются векторами

$$| \pm 1 \rangle = c_{\pm 1/2}^\dagger | \uparrow, \downarrow \rangle, \quad | 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (c_{-1/2}^\dagger | \uparrow \rangle + c_{1/2}^\dagger | \downarrow \rangle).$$

Два состояния с противоположными проекциями локализованного момента и двумя дырками на одном узле описываются посредством векторов

$$|+ \rangle = c_{1/2}^\dagger c_{-1/2}^\dagger | \uparrow \rangle, \quad |- \rangle = c_{1/2}^\dagger c_{-1/2}^\dagger | \downarrow \rangle.$$

На введенном базисе одноузельных состояний построим операторы Хаббарда $X^{pq} = |p\rangle\langle q|$ [6, 7] и реализуем представление для спиновых,

$$\begin{aligned} S^t &= X^{\uparrow\downarrow} + \frac{1}{\sqrt{2}} (X^{S,-1} + X^{0,-1} + X^{10} - X^{1S}) + X^{+-}, \\ S^z &= \frac{1}{2} (X^{\uparrow\uparrow} - X^{\downarrow\downarrow} + X^{0S} + X^{S0} + \\ &\quad + X^{11} - X^{-1,-1} + X^{++} - X^{--}), \end{aligned} \quad (2)$$

и фермиевских,

$$\begin{aligned} c_\uparrow^\dagger &= X^{1\uparrow} + X^{-,-1} + \frac{1}{\sqrt{2}} (X^{0\downarrow} - X^{S\downarrow} + X^{+S} + X^{+0}), \\ c_\downarrow^\dagger &= X^{-1\downarrow} - X^{+1} + \frac{1}{\sqrt{2}} (X^{0\uparrow} + X^{S\uparrow} + X^{-S} - X^{-0}), \end{aligned} \quad (3)$$

операторов. Двухдырочные и триплетные состояния отделены от синглетного состояния на величины энергии $U + 3J/4$ и J , соответственно.

3. В условиях, когда U и J велики, можно перейти к эффективному гамильтониану \hat{H}_{eff} , в котором вклады от верхних одноузельных состояний будут учтены по операторной форме теории возмущений. Введем оператор проецирования на три нижних одноузельных состояния $P = \prod_f (X_f^{\uparrow\uparrow} + X_f^{\downarrow\downarrow} + X_f^{SS})$ и, используя условия малости

$$\frac{t_{fm}}{J} \ll 1, \quad \frac{t_{fm}}{U + 3J/4} \ll 1, \quad \frac{I_{fm}}{J} \ll 1,$$

получим, что эффективный гамильтониан

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{eff}} = P H P + P H_{\text{int}} (H_0 - E_0^{(0)})^{-1} \times \\ \times (P H_{\text{int}} P - H_{\text{int}} P) + \dots \end{aligned} \quad (4)$$

с квадратичной по отмеченным параметрам точностью может быть записан в виде

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{eff}} = \sum_f (\varepsilon_{sp} - \mu) X_f^{SS} + \frac{1}{2} \sum_{f m \sigma} t_{fm} X_f^{S\sigma} X_m^{\sigma S} + \\ + \frac{1}{2} \sum_{f m} I_{fm} \tilde{S}_f \tilde{S}_m + \frac{1}{2} \sum_{f m} V_{fm} X_f^{SS} X_m^{SS} + \hat{H}_{(3)}, \end{aligned} \quad (5)$$

где $\sigma = \uparrow, \downarrow$. В (5) первое слагаемое описывает набор невзаимодействующих спиновых поляронов (структура этих квазичастиц в исходном базисе обсуждается в заключении) с ренормированной энергией $\varepsilon_{sp} = -3J/4 + \Delta\varepsilon$. Ренормировка

$$\Delta\varepsilon = -\frac{3}{4} \sum_m \left(\frac{t_{fm} t_{mf}}{J} + \frac{I_{fm} I_{mf}}{4J} \right) \quad (6)$$

обусловлена квантовыми процессами виртуальных переходов в триплетные состояния за счет перескоков и обменного взаимодействия (см. представления для спиновых и фермиевских операторов), μ – химический потенциал системы. Второе слагаемое описывает кинетическую энергию спин-поляронных квазичастиц с ренормированным интегралом перескока (спин-поляронное сужение зоны). Обменное взаимодействие отражается третьим слагаемым \hat{H}_{eff} , в котором участвуют редуцированные, по сравнению с исходным представлением, квазиспиновые операторы $\tilde{S}_f^\dagger = X_f^{\uparrow\downarrow}$, $\tilde{S}_f^z = \frac{1}{2} (X_f^{\uparrow\uparrow} - X_f^{\downarrow\downarrow})$. В результате отмеченных выше виртуальных квантовых “забросов” в верхние одноузельные состояния между спиновыми поляронами возникает взаимодействие, отображенное в \hat{H}_{eff} посредством четвертого слагаемого. Интенсивность этого взаимодействия определяется матричным элементом

$$V_{fm} = \frac{3}{2} \frac{t_{fm} t_{mf}}{J} - \frac{t_{fm} t_{mf}}{U + 3J/4} + \frac{9}{32} \frac{I_{fm} I_{mf}}{J}. \quad (7)$$

Видно, что процессы виртуальных забросов в триплетные состояния индуцируют отталкивание спиновых поляронов, тогда как виртуальные переходы в состояния с двумя дырками на узле приводят к притяжению. При выбранных соотношениях между параметрами суммарный итог рассмотренных процессов проявляется как отталкивание спин-поляронных квазичастиц. Это взаимодействие сказывается на условиях реализации куперовской неустойчивости, поскольку оно ужесточает требования по сравнению с предельным случаем $U, J \rightarrow \infty$. Последнее слагаемое в \hat{H}_{eff} описывает трехцентровые взаимодействия

$$\begin{aligned} \hat{H}_{(3)} = & \sum_{\substack{f m g \sigma \\ f \neq g}} \left(\frac{t_{fm} t_{mg}}{4J} \right) X_f^{S\sigma} X_m^{\sigma\bar{\sigma}} X_g^{\bar{\sigma}S} - \\ & - \sum_{\substack{f m g \sigma \\ f \neq g}} \left(\frac{t_{fm} t_{mg}}{2J} \right) X_f^{S\sigma} \left(X_m^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} + \frac{1}{2} X_m^{\sigma\sigma} \right) X_g^{\sigma S} - \\ & - \sum_{\substack{f m g \sigma \\ f \neq g}} \left(\frac{t_{fm} t_{mg}}{4(U + 3J/4)} \right) X_f^{S\sigma} X_m^{SS} X_g^{\sigma S} - \\ & - \sum_{\substack{f m g \sigma \\ f \neq g}} \left(\frac{I_{fm} I_{mg}}{4J} \right) \tilde{S}_f \tilde{S}_g X_m^{SS}, \end{aligned} \quad (8)$$

имеющие существенное значение для реализации ВТСП (см. ниже). Заметим, что оператор $X_f^{\sigma S}$ играет роль оператора уничтожения дырки с проекцией спинового момента $-\sigma$, осуществляя перевод узла f из синглетного состояния в состояние без дырки. Оператор же $X_f^{S\sigma}$ соответствует рождению дырки с проекцией спинового момента $-\sigma$, поскольку его действие сводится к тому, что узел f из состояния $|\sigma\rangle$ при добавлении дырки переводится в синглет $|S\rangle$.

4. Для получения уравнений самосогласования в сверхпроводящей фазе использовался метод неприводимых функций Грина [8]. Вводя нормальные, $\langle\langle X_f^{\downarrow S} | X_{f'}^{\downarrow S} \rangle\rangle_\omega$, и аномальные, $\langle\langle X_f^{S\uparrow} | X_{f'}^{S\downarrow} \rangle\rangle_\omega$, спин-поляронные функции Грина, записывались уравнения движения для них. В дальнейшем применялась схема проецирования полученных уравнений на введенный базис спин-поляронных функций Грина. В результате такой процедуры были получены уравнения Горькова

$$\begin{aligned} (\omega - \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}) \langle\langle X_{\mathbf{k}\uparrow} | X_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle &= \left(\frac{1+n}{2} \right) + \Delta_{\mathbf{k}} \langle\langle X_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger | X_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle, \\ (\omega + \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}) \langle\langle X_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger | X_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle &= \Delta_{\mathbf{k}} \langle\langle X_{\mathbf{k}\uparrow} | X_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle \end{aligned} \quad (9)$$

для фурье-образов нормальных и аномальных функций Грина:

$$\begin{aligned} \langle\langle X_f^{\downarrow S} | X_{f'}^{\downarrow S} \rangle\rangle_\omega &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_f - \mathbf{R}_{f'})} \langle\langle X_{\mathbf{k}\uparrow} | X_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle, \\ \langle\langle X_f^{S\uparrow} | X_{f'}^{S\downarrow} \rangle\rangle_\omega &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_f - \mathbf{R}_{f'})} \langle\langle X_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger | X_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle. \end{aligned} \quad (10)$$

В системе уравнений $\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}} = -3J/4 + V_0 n + [(1+n)/4]t_{\mathbf{k}}$ – ренормированный спектр фермиевских возбуждений, определяемый полярной зоной, $t_{\mathbf{k}}$ – фурье-образ интеграла перескока, V_0 – фурье-образ для нулевого значения квазимпульса матричного элемента взаимодействия спиновых поларонов, n – концентрация дырок в расчете на один узел. Возникшая при введении аномальной функции Грина сверхпроводящая щель определяется выражением

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \left(2t_{\mathbf{q}} + 2\tilde{V}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \frac{3}{2} I_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \right) \frac{\langle X_{-\mathbf{q}\downarrow} X_{\mathbf{q}\uparrow} \rangle}{1+n}. \quad (11)$$

Входящая в ядро этого интегрального уравнения функция $\tilde{V}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}$ возникла в результате учета отталкивательного взаимодействия спиновых поларонов (слагаемое эффективного гамильтониана $\sim V_{fm}$), а также трехцентровых взаимодействий. При этом часть вкладов от $H_{(3)}$, не дающих вклада в сверхпроводящую щель с $d_{x^2-y^2}$ -типов симметрии, из-за экономии места здесь не приводится. В представлении Ванье ренормированный за счет $H_{(3)}$ матричный элемент \tilde{V}_{fm} имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \tilde{V}_{fm} = & \frac{2-n}{2} \frac{t_{fm} t_{mf}}{J} - \frac{(1-n/4)t_{fm} t_{mf}}{U + 3J/4} + \\ & + \frac{5-4n}{32} \frac{I_{fm} I_{mf}}{J}. \end{aligned} \quad (12)$$

Вычисляя аномальную функцию Грина и используя спектральную теорему, получим, что уравнение самосогласования для сверхпроводящей щели $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta \cdot (\cos k_x - \cos k_y)$ может быть записано в виде

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \left(\frac{3}{2} I_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - 2\tilde{V}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \right) \left(\frac{\Delta_{\mathbf{q}}}{4E_{\mathbf{q}}} \right) \operatorname{th} \left(\frac{E_{\mathbf{q}}}{2T} \right). \quad (13)$$

Отсюда следует, что температура перехода в сверхпроводящую фазу с $d_{x^2-y^2}$ -типов симметрии параметра порядка определяется решением уравнения

$$1 = \frac{\tilde{G}}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{3}{8} \frac{(\cos q_x - \cos q_y)^2}{(\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{q}} - \mu)} \operatorname{th} \left(\frac{\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{q}} - \mu}{2T_c} \right), \quad (14)$$

где константа связи может быть представлена следующим образом:

$$\tilde{G} = I - \frac{2(2-n)t^2}{3J} + \frac{(4-n)t^2}{3(U+3J/4)} - \frac{(5-4n)I^2}{24J}. \quad (15)$$

При записи этого выражения пренебрегалось вкладами, определяемыми интегралами перескоков и обменными параметрами между узлами из дальних координационных сфер. Возможность такого упрощения обусловлена относительно быстрым убыванием отмеченных параметров с расстоянием между узлами. Для сравнения отметим, что без учета трехцентровых взаимодействий константа связи определялась бы выражением

$$G = I - \frac{2t^2}{J} + \frac{4t^2}{3(U+3J/4)} - \frac{3I^2}{8J}. \quad (16)$$

Эффективная константа связи \tilde{G} формируется в результате действия нескольких факторов. Первое слагаемое, $\sim I$, соответствует притяжению спиновых поляронов и обеспечивает положительный вклад в суммарный механизм куперовского спаривания. Физическая причина этого притяжения проста и связана с тем, что спиновый момент узла, где находится полярон, равен нулю. Поэтому если два полярона находятся на расстоянии, большем межатомного расстояния, то потеря обменной энергии $\sim 8I$. Если же спиновые поляроны находятся на ближайших узлах, то эта потеря $\sim 7I$. Таким образом, характерная энергия притяжения $\sim I$, что и отражено в константе связи. Заметим, что относительный выигрыш в энергии в двумерном случае превосходит соответствующий выигрыш для трехмерного случая.

Второй вклад в константу \tilde{G} обусловлен учетом двух- и трехцентровых взаимодействий между спиновыми поляронами. Итоговая величина этого взаимодействия складывается из трех слагаемых. Первое и третье слагаемые происходят от процессов виртуальных переходов в триплетные спин-поляронные состояния как за счет перескоков дырок, так и за счет обменного взаимодействия. Эти вклады формируют отталкивательное взаимодействие спиновых поляронов. Второе слагаемое в выражении для \tilde{V}_{fm} происходит от процессов "заброса" в одноузельные состояния с двумя дырками (этим объясняется наличие параметра U в знаменателе). Видно, что эти процессы приводят к взаимному притяжению поляронов. Таким образом, трехцентровые взаимодействия частично компенсируют уменьшение константы связи, вызванное отталкиванием спиновых поляронов, и, тем самым (см. ниже), существенно влияют на условия реализации сверхпроводящей фазы.

Отметим, что для $t-J^*$ -модели важная роль трехцентровых взаимодействий отмечалась ранее в работе [9]. Однако в случае $t-J^*$ -модели трехцентровые взаимодействия уменьшали константу связи (и тем самым сильно подавляли критическую температуру), тогда как в системе спиновых поляронов трехцентровые взаимодействия приводят к противоположному эффекту, значительно повышая критическую температуру. Это утверждение продемонстрировано на рис.1. При расчете концентрационной за-

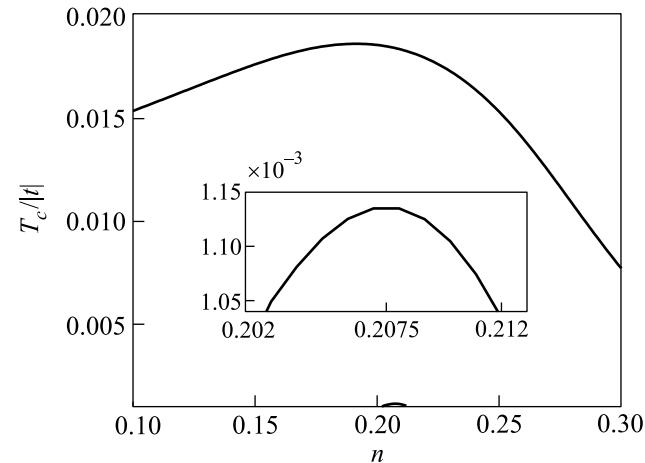


Рис.1. Концентрационная зависимость критической температуры, рассчитанная при учете $H_{(3)}$ (верхняя кривая) и без их учета (нижняя кривая) для набора параметров $t = 1\text{эВ}$, $t' = 0.6|t|$, $t'' = 0.22|t|$, $J = 5|t|$, $U = 5|t|$, $I = 0.33|t|$. На вставке в крупном масштабе представлена нижняя кривая

висимости критической температуры параметры выбирались таким образом, чтобы без учета трехцентровых взаимодействий существовала область реализации сверхпроводящей фазы. Видно, что при учете трехузельных взаимодействий критические температуры в данной области параметров достигают достаточно высоких значений T_c в области оптимального допирования ($\sim 170\text{K}$). Если же трехцентровые взаимодействия не принимаются во внимание, то максимальное значение критической температуры достигает лишь $\sim 13\text{K}$.

В случае, когда параметры выбираются так, чтобы в области оптимального допирования реализовывались критические температуры, характерные для купратных сверхпроводников, то без учета трехцентровых взаимодействий сверхпроводящая фаза оказывается подавленной. На рис.2 показаны расчетные зависимости $T_c(n)$ при учете трехцентровых взаимодействий для двух значений хаббардовского параметра U . Видно, что возрастание U приводит к понижению критической температуры в соответствии с

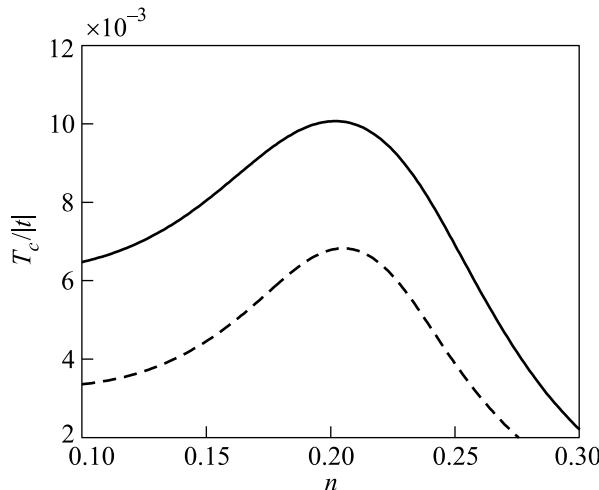


Рис.2. Концентрационная зависимость критической температуры, рассчитанная для набора параметров $t = 1\text{эВ}$, $t' = 0.6|t|$, $t'' = 0.22|t|$, $J = 5|t|$, $I = 0.3|t|$ при $U = 7|t|$ (сплошная линия) и $U = 10|t|$ (штриховая линия)

тем, что при таком изменении U эффективность виртуальных “забросов” в состояния с двумя дырками подавляется, и суммарная константа связи уменьшается. Из представленных концентрационных зависимостей критической температуры следует, что рассмотренная концепция куперовской неустойчивости в системе спиновых поляронов может служить реальной альтернативой при интерпретации ВТСП в купратных оксидах.

5. В заключение остановимся на структуре спин-поляронных квазичастиц. Прежде всего заметим, что после перехода к эффективному гамильтониану все вычисления проводятся в новом базисе. Это означает, что для построения функции некоторого состояния в исходном представлении необходимо провести соответствующие преобразования (это соответствует обычным процедурам при унитарных поворотах). Следовательно, для получения вида волновой функции спинового полярона в исходном базисе необходимо провести соответствующие преобразования. Пусть, например, в новом базисе состояние с одним спиновым поляроном описывается функцией $|1_{sp}\rangle = X_m^{S\sigma}|0\rangle$. Здесь $|0\rangle$ соответствует состоянию без поляронов. В исходном же базисе это состояние с рассматриваемой в задаче точностью описывается волновой функцией

$$|\Psi\rangle = X_m^{S\sigma}|0\rangle + \frac{1}{H_0 - E_0^{(0)}}(PH_{\text{int}}P - H_{\text{int}}P)X_m^{S\sigma}|0\rangle =$$

$$\begin{aligned} &= X_m^{S\sigma}|0\rangle + \\ &+ \sum_{f\sigma_1} \frac{t_{fm}}{J} \left(\frac{1}{\sqrt{2}}X_f^{\eta(\bar{\sigma}_1),\bar{\sigma}_1} + \frac{1}{2}X_f^{0\sigma_1} \right) X_m^{\sigma_1\sigma}|0\rangle - \\ &- \sum_f \frac{I_{fm}}{2J} \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\tilde{S}_f^+ X_m^{-1\sigma} - \right. \\ &\left. - \frac{1}{\sqrt{2}}\tilde{S}_f^- X_m^{1\sigma} + \tilde{S}_f^z X_m^{0\sigma} \right) |0\rangle, \end{aligned} \quad (17)$$

где $\eta(\sigma) = \pm 1$ при $\sigma = \uparrow, \downarrow$, соответственно. Видно, что в исходном базисе спин-поляронное состояние представляет собой когерентную смесь затравочного состояния и состояний, когда дырка находится на соседних с исходным m узлах в триплетных состояниях (слагаемые $\sim t_{fm}$), а также состояний, для которых узел m переведен в триплетные состояния (слагаемые $\sim I_{fm}$), а соседние узлы находятся в коррелированных со значением проекции триплетного момента бездырочных состояниях с определенной проекцией спинового момента. Именно по отношению к этим сложным квазичастицам и реализуется рассмотренный в статье механизм куперовской неустойчивости, приводящий к ВТСП.

Работа выполнена при поддержке Программы Президиума РАН “Квантовая макрофизика”, Российского фонда фундаментальных исследований (грант # 06-02-16100), Интеграционного проекта СО РАН № 3.4. Один из авторов (М.К.) благодарит Красноярский краевой фонд науки (грант # 18G).

1. V. J. Emery, Phys. Rev. Lett. **58**, 2794 (1987).
2. C. M. Varma, S. Schmitt-Rink, and E. Abrahams, Solid State Commun. **62**, 681 (1987).
3. A. F. Barabanov, R. O. Kuzian, and L. A. Maksimov, Phys. Rev. B **55**, 4015 (1997).
4. А. Ф. Барабанов, А. В. Михеенков, А. М. Белемук, Письма в ЖЭТФ **75**, 118 (2002).
5. А. Ф. Барабанов, А. М. Белемук, Письма в ЖЭТФ **87**, 725 (2008).
6. J. C. Hubbard, Proc. R. Soc. London A **285**, 542 (1965).
7. Р. О. Зайцев, Диаграммные методы в теории сверхпроводимости и магнетизма, М.: Едиториал УРСС, 2004.
8. N. M. Plakida, V. Yu. Yushankhay, and I. V. Stasyuk, Physica C **162-164**, 787 (1989).
9. В. В. Вальков, Т. А. Валькова, Д. М. Дзебисашвили, С. Г. Овчинников, Письма в ЖЭТФ **75**, 450 (2002).