

Куперовская неустойчивость нелокальных спиновых поляронов в CuO_2 -плоскости высокотемпературных сверхпроводников

В. В. Вальков^{1)*□}, Д. М. Дзедзисашвили^{+*}, 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, 660014 Красноярск, Россия

[▽]Институт физики высоких давлений РАН, 142190 Троицк, Россия

Поступила в редакцию 12 августа 2010 г.

После переработки 4 октября 2010 г.

Для реальной структуры CuO_2 -плоскости купратных сверхпроводников получена энергетическая структура нелокальных спиновых поляронов и рассмотрена куперовская неустойчивость в ансамбле таких фермиевских квазичастиц. Нелокальный спиновый полярон формируется из-за обменного взаимодействия спинового момента кислородной дырки со спиновыми моментами двух ближайших ионов меди. Вычисленная на основе диаграммной техники амплитуда рассеяния нелокальных спиновых поляронов в куперовском канале показала сильную взаимосвязь спиновых и зарядовых степеней свободы.

1. После открытия высокотемпературной сверхпроводимости было установлено, что физические свойства нормальной и сверхпроводящей фаз оксидов меди определяются в основном особенностями электронного строения CuO_2 -плоскости, а куперовская неустойчивость формируется под влиянием сильных корреляций между зарядовыми и спиновыми степенями свободы [1–4]. Для описания этих корреляций в режиме сильной связи между спиновой и электронной подсистемами была развита спин-поляронная концепция [5] электронного строения CuO_2 -плоскости. В рамках такого подхода удалось описать ряд особенностей изменения физических свойств купратов при увеличении легирования (например, псевдощелевое поведение спектральной интенсивности [6], а также концентрационную зависимость температуры перехода в сверхпроводящую фазу [7]).

В отмеченных работах теория развивалась на основе гамильтониана 2D решетки Кондо. При этом предполагалось, что спиновый момент дырки обменным образом связывается только с одним локализованным спиновым моментом.

В действительности в CuO_2 -плоскости дырка, находящаяся на ионе кислорода, p - d -обменным образом взаимодействует с двумя ионами меди (см.рис.1). Этот факт был отмечен в работе [8], а его учет при описании эволюции поверхности Ферми в нормальной фазе рассматривался в работе [9]. В данной работе решается задача о возникновении куперовской неустойчивости в условиях,

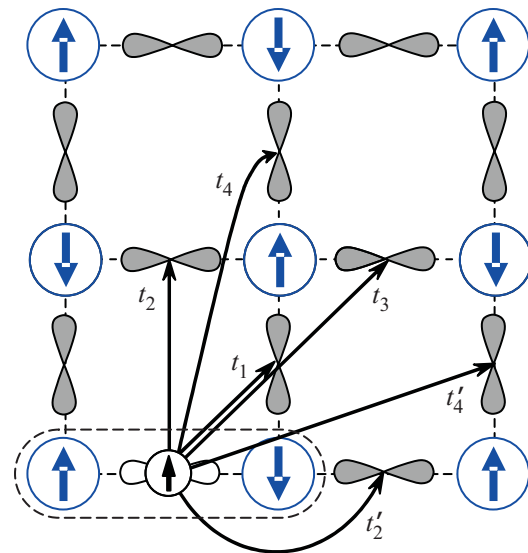


Рис.1. Роль структуры CuO_2 -плоскости в формировании нелокального спинового полярона. Стрелками показаны используемые в работе перескоки дырок по кислородной подсистеме

когда фермиевские квазичастицы представляются посредством нелокальных спиновых поляронов.

Известно, что в режиме сильных электронных корреляций гамильтониан модели Эмери, описывающий электронную структуру CuO_2 -плоскости, сводится к гамильтониану, в котором ионы меди описываются гомеополлярными состояниями со спиновым моментом $S = 1/2$. На рис.1 эти состояния отражены посредством вписанных в круги жирных стрелок. Конфигурация стрелок соответствует неелев-

¹⁾ e-mail: vvv@iph.krasn.ru

ской фазе. Верхние по энергии электронные состояния кислородной подсистемы показаны в виде p_x - и p_y -орбиталей. Находящаяся на такой орбитали дырка посредством p - d -обмена взаимодействует с двумя ближайшими спиновыми моментами ионов меди. На рис.1 в левом нижнем углу показано положение такой дырки. Существенно, что из-за антиферромагнитной связи спиновых моментов ионов меди в неколокальном спиновом поляроне среднеполевой вклад в энергию дырки за счет взаимодействия с соседними спиновыми моментами атомов меди равен нулю. Поэтому при построении неколокальных спиновых поляронов с самого начала квантовые флуктуации в спиновой подсистеме приобретают особую роль.

2. Используя атомное представление, эффективный гамильтониан рассматриваемой спин-фермионной системы CuO_2 -плоскости может быть записан в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{T} + \hat{V}, \quad (1)$$

где

$$\hat{H}_0 = \sum_f (\varepsilon - \mu) X_f^{22} + \sum_g (\varepsilon - \mu) Y_g^{22} +$$

$$+ A \sum_{f\Delta_f} (\mathbf{S}_{f+\Delta_f} \boldsymbol{\sigma}_f) + A \sum_{g\Delta_g} (\mathbf{S}_{g+\Delta_g} \boldsymbol{\sigma}_g),$$

$$\hat{T} = \sum_{ff'\gamma} t_{ff'} X_f^{2\gamma} X_{f'}^{\gamma 2} + \sum_{gg'\gamma} t_{gg'} Y_g^{2\gamma} Y_{g'}^{\gamma 2} +$$

$$+ \sum_{fg\gamma} t_{fg} (X_f^{2\gamma} Y_g^{\gamma 2} + Y_g^{2\gamma} X_f^{\gamma 2}),$$

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{l,l'} I_{ll'} (\mathbf{S}_l \mathbf{S}_{l'}) + \frac{J}{2} \sum_{\langle fg \rangle \gamma} (X_f^{\gamma \bar{\gamma}} Y_g^{\bar{\gamma} \gamma} - X_f^{\gamma \gamma} Y_g^{\bar{\gamma} \bar{\gamma}}),$$

здесь \hat{H}_0 учитывает диагональную часть энергии кислородной подсистемы в представлении Ванье, а также p - d -обменное взаимодействие кислородных дырок со спиновыми моментами ионов меди. В приведенной записи ε соответствует изменению энергии иона кислорода при его переходе из конфигурации p^5 в конфигурацию p^6 , μ – химический потенциал системы. Здесь и в дальнейшем использовано двухподрешеточное описание кислородной подсистемы. При этом ионы с p_x -орбиталями отнесены к F -подрешетке (узлы этой подрешетки обозначаются посредством f, f', f''), а ионы с p_y -орбиталями – к G -подрешетке с узлами g, g', g'' . Операторы Хаббарда $X^{\alpha\beta} = |\alpha\rangle\langle\beta|$ ($\alpha, \beta = \uparrow, \downarrow, 2$) относятся к F -кислородной подрешетке, а операторы $Y^{\alpha\beta} = |\alpha\rangle\langle\beta|$ – к G -подрешетке. Каждый из таких операторов описывает переход иона из

состояния $|\beta\rangle$ в состояние $|\alpha\rangle$. Параметр A в \hat{H}_0 определяет энергию p - d -обменного взаимодействия спина дырки со спиновыми моментами соседних атомов меди, $\boldsymbol{\sigma}_f$ ($\boldsymbol{\sigma}_g$) – векторный оператор спинового момента дырки, находящейся на узле f (g). Векторные операторы спиновых моментов ионов меди обозначены посредством $\mathbf{S}_{f+\Delta_f}$ и $\mathbf{S}_{g+\Delta_g}$, при этом вектор Δ_f может принимать два значения, $\Delta_f = \pm a_x/2$, и связывает узел f с одним из ближайших узлов, где находится ион меди. Аналогично этому, $\Delta_g = \pm a_y/2$ и связывает узел g (ион кислорода с p_y -орбиталью) с ближайшим из двух узлов меди. Оператор кинетической энергии \hat{T} описывает перескоки электронов по ионам кислорода, как в пределах F (G)-подрешеток с интегралами туннелирования $t_{ff'}$ ($t_{gg'}$), так и между подрешетками с интегралами t_{fg} . Первый член в \hat{V} соответствует энергии обменного взаимодействия спиновых моментов между ближайшими ионами меди, находящимися в узлах с номерами l и l' , соответственно. Второе слагаемое отражает наличие обменной связи между ближайшими ионами кислорода по типу обменного взаимодействия в t - J -модели. Параметры обменных взаимодействий обозначены посредством $I_{ll'}$ и J , соответственно.

3. Согласно спин-поляронной концепции, параметр p - d -обменного взаимодействия A будем считать самым большим энергетическим параметром системы. Поэтому одноузельные энергии дырок на кислородных ионах должны вычисляться при точном учете квантовых спиновых флуктуаций, обусловленных сильным p - d -обменным взаимодействием спина дырки с двумя спиновыми моментами ближайших двух атомов меди. Такой учет приводит к ренормировке локальной функции Грина $G(i\omega_n)$. Нахождение ренормированной функции $\tilde{G}(i\omega_n)$ сводится к вычислению локального массового и силового операторов в нулевом приближении по параметрам перескоков и J .

Ниже, по соображениям простоты, приведем решение этой задачи на основе точного решения уравнений движения. Первое точное уравнение движения для оператора $X^{\gamma 2}$ имеет вид

$$(\omega - \varepsilon + \mu) X^{\gamma 2} = -(A/2) d_\gamma, \quad d_\gamma \equiv S^\alpha \sigma_{\nu\gamma}^\alpha X^{\nu 2}. \quad (2)$$

При записи этого уравнения был опущен индекс узла (в рассматриваемой задаче он остается неизменным и поэтому его можно временно не писать). По этой же причине удобным оказалось введение векторного оператора суммарного спинового момента $\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$, составленного из спиновых моментов двух ближайших к рассматриваемому иону кислорода ионов меди. $\sigma_{\nu\gamma}^\alpha$ -компоненты матрицы Паули

$\sigma^\alpha, \alpha = x, y, z$. Как обычно, по дважды повторяющимся индексам подразумевается суммирование.

Запишем второе точное уравнение движения для оператора d_γ :

$$(\omega - \varepsilon - A/2 + \mu) d_\gamma = -(3A/4)X^{\gamma^2} - A\Lambda_\gamma, \quad (3)$$

где $\Lambda_\gamma = (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2) X^{\gamma^2}$. Оператор Λ_γ удовлетворяет третьему точному уравнению движения:

$$(\omega - \varepsilon + \mu) \Lambda_\gamma = -(A/8)d_\gamma. \quad (4)$$

Используя полученную систему трех уравнений, нетрудно записать явное выражение для ренормированной функции $\tilde{G}(i\omega_n)$:

$$\tilde{G}(i\omega_n) = P_0(i\omega_n) / (i\omega_n - \varepsilon + \mu - \Sigma_0(i\omega_n)), \quad (5)$$

в котором локальные силовой и массовый операторы имеют следующий вид:

$$P_0(i\omega_n) = C_h + A \frac{AC_1^{dd}C_h/2 - C_1^{dp}(i\omega_n - \varepsilon + \mu)}{\varphi(i\omega_n)},$$

$$\Sigma_0(i\omega_n) = (3/8)A^2(i\omega_n - \varepsilon + \mu)/\varphi(i\omega_n),$$

$$\varphi(i\omega_n) = (\omega_n - \varepsilon + \mu)(i\omega_n - \varepsilon + \mu - A/2) - A^2/8.$$

Здесь $C_h = 1 - h/2$, h -число дырок в расчете на один ион кислорода, $C_1^{dd} = \langle (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2) \rangle$, $C_1^{dp} = \langle (\mathbf{S}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}) \rangle$ - сферически симметричные спиновые корреляторы между ближайшими узлами меди, а также меди и кислорода, соответственно.

Из (5) после аналитического продолжения находим вырожденный по проекции спина и по номеру кислородной орбитали спектр локализованных фермиевских возбуждений:

$$E_1 = \varepsilon - A/2, \quad E_2 = \varepsilon, \quad E_3 = \varepsilon + A. \quad (6)$$

4. Включение перескоков приводит к формированию энергетических зон, которые можно рассчитать методом диаграммной техники для операторов Хаббарда [10, 11]. Поскольку в области слабого легирования концентрация дырок h в расчете на один ион кислорода мала, то вычисление спин-поляронного спектра можно провести в приближении независимых квазичастиц. Учитывая наличие двух подрешеток в кислородной подсистеме, запишем уравнение Дайсона в матричном виде:

$$\hat{G}(k) = \hat{g}(k) + \hat{g}(k)\hat{\Sigma}(k)\hat{G}(k), \quad (7)$$

где $k = (\mathbf{k}, i\omega_n)$. Матрицы, входящие в (7) определены выражениями

$$\hat{G}(k) = \begin{pmatrix} G^{(11)}(k) & G^{(12)}(k) \\ G^{(21)}(k) & G^{(22)}(k) \end{pmatrix},$$

$$\hat{g}^{-1}(k) = \text{diag}(i\omega_n - \varepsilon + \mu, i\omega_n - \varepsilon + \mu),$$

а неприводимый по Дайсону массовый оператор в приближении Хаббард-I имеет вид

$$\hat{\Sigma}(k) = \begin{pmatrix} \Sigma_0 + P_0 t_{\bar{k}}^{(1)} & P_0 \Gamma_{\bar{k}} \\ P_0 \Gamma_{\bar{k}} & \Sigma_0 + P_0 t_{\bar{k}}^{(2)} \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Здесь $t_{\mathbf{k}}^{(1)}, t_{\mathbf{k}}^{(2)}$ и $\Gamma_{\mathbf{k}}$ есть фурье-образы интегралов перескоков $t_{ff'}$, $t_{gg'}$ и t_{fg} , соответственно, а Σ_0 и P_0 являются функциями $i\omega_n$.

Решая уравнение (7), находим компоненты матричной функции Грина:

$$G^{(11)}(k) = (i\omega_n - \varepsilon + \mu - \Sigma_0 - P_0 t_{\mathbf{k}}^{(2)}) / \det(k),$$

$$G^{(22)}(k) = (i\omega_n - \varepsilon + \mu - \Sigma_0 - P_0 t_{\mathbf{k}}^{(1)}) / \det(k), \quad (9)$$

$$G^{(12)}(k) = G^{(21)}(k) = P_0 \Gamma_{\mathbf{k}} / \det(k),$$

где

$$\det(k) = (i\omega_n - \varepsilon + \mu - \Sigma_0 - P_0 \tilde{t}_{\mathbf{k}}^+) \times (i\omega_n - \varepsilon + \mu - \Sigma_0 - P_0 \tilde{t}_{\mathbf{k}}^-), \quad (10)$$

$$\tilde{t}_{\mathbf{k}}^\pm = \frac{t_{\mathbf{k}}^{(1)} + t_{\mathbf{k}}^{(2)}}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(t_{\mathbf{k}}^{(1)} - t_{\mathbf{k}}^{(2)})^2 + 4\Gamma_{\mathbf{k}}}. \quad (11)$$

Отсюда следует, что шесть ветвей спектра коллективных возбуждений $E_{j,\mathbf{k}}^\pm$ ($j = 1, 2, 3$) получаются как решения двух дисперсионных уравнений третьей степени:

$$\omega - \varepsilon + \mu - \Sigma_0(\omega) - P_0(\omega)\tilde{t}_{\mathbf{k}}^\pm = 0. \quad (12)$$

На рис.2 показаны две верхние ветви электронного спектра спин-поляронных состояний и продемонстрировано существенное влияние на эти ветви интеграла перескока t_4 . Выбор параметров модели для CuO_2 -плоскости содержит элемент неоднозначности. Обсуждается этот актуальный вопрос например, в [6]. Нами при расчетах использовались следующие значения обменных параметров: $A = 2.5$, $J = 2$. Здесь и далее энергетические величины измеряются в единицах интеграла перескока t_1 . Для получения дисперсионных зависимостей, соответствующих ARPES данным, кроме t_1 , были учтены еще три параметра перескока (см. рис.1): $t_2 = -0.5$, $t_3 = -0.2$, $t_4 = 0.45$. Для упрощения считалось, что $t'_2 = t_2$ и $t'_4 = t_4$. Корреляторы $C_1^{dd} = 0.23$ и $C_1^{dp} = -0.43$ выбирались отличными от номинальных значений для изолированного нелокального полярона ($C_1^{dd} = 1/4$ и $C_1^{dp} = -1/2$), поскольку при учете перескоков магнитные корреляции ослабляются.

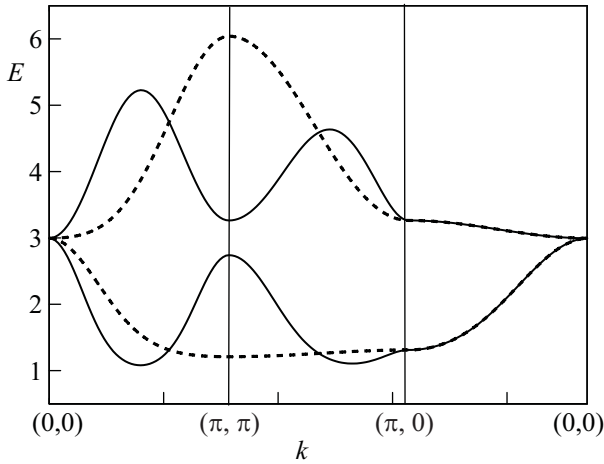


Рис.2. Спектр верхних зон поляронных возбуждений ($\epsilon = 0$). Сплошная линия рассчитана при $t_4 = 0.45$, а пунктирная линия – при $t_4 = 0$

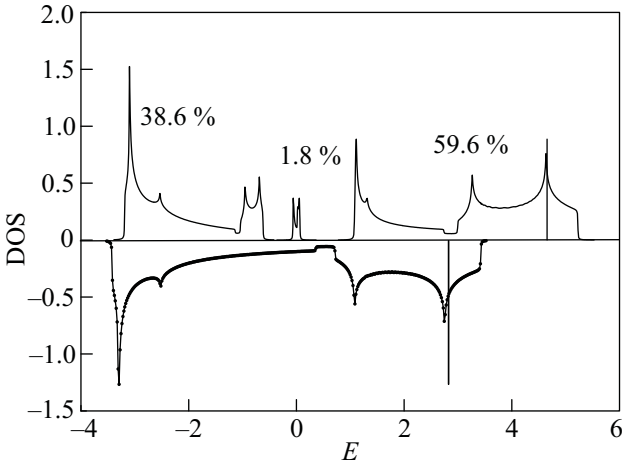


Рис.3. Плотности состояний для поляронов (верхняя часть рисунка) и сильнокоррелированных дырок при $A = 0$ (нижняя часть рисунка)

На верхней части рис.3 представлена плотность состояний спин-поляронных фермионов, рассчитанная для приведенных выше параметров модели и $h = 0.2$. Пунктирной линией показано положение химпотенциала. Сравнение с затравочной плотностью состояний, полученной при $A = 0$ (нижняя часть рис.3), показывает, что при включении p - d обменного взаимодействия вместо двух, появляются шесть зон. Цифрами показана доля спектрального веса, приходящегося на зоны, образованные из уширения каждого из трех локальных уровней.

5. Для определения куперовской неустойчивости вычислялась амплитуда рассеяния носителей тока за счет обменного взаимодействия в кислородной подсистеме (второе слагаемое оператора \hat{V}).

Графическая система уравнений для этой амплитуды в куперовском канале приведена на рис.4. Латинские символы m, n и l пробегает номера подре-

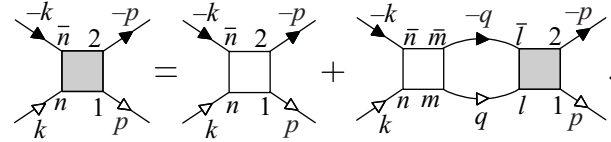


Рис.4. Графическая система уравнений для амплитуды рассеяния квазичастиц в куперовском канале

шеток 1 и 2. Черта над символом означает изменение номера решетки. Так, если $n = 1$ (2), то $\bar{n} = 2$ (1). Темным квадратам соответствуют вершинные функции $\Gamma^{(21)}(\mathbf{k}|\mathbf{p})$ и $\Gamma^{(12)}(\mathbf{k}|\mathbf{p})$. Их отличие состоит в последовательности входящих пропагаторов, относящихся к разным подрешеткам. В вершину с индексом (21) сначала входит пропагатор из второй подрешетки, а затем из первой. Для вершины (12) данная последовательность меняется. Линиям со стрелками сопоставляются определенные в (9) функции Грина с соответствующими индексами. При этом светлая линия отвечает распространению квазичастицы со спином “вверх”, а темная – “вниз”. Определение затравочных вершин дается на рис.5.

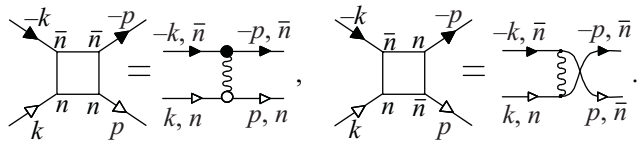


Рис.5. Графики для затравочных вершин

В аналитической записи система уравнений на рис.4 имеет вид ($q = (\mathbf{q}, i\omega_m)$)

$$\Gamma^{(\bar{n}n)}(\mathbf{k}|\mathbf{p}) = -\frac{1}{2} \Gamma_{\bar{n}n;12}^{(0)}(\mathbf{k}|\mathbf{p}) + \frac{T}{2N} \sum_{q,m,l} \Gamma_{\bar{n}n;m\bar{m}}^{(0)}(\mathbf{k}|\mathbf{q}) G^{(\bar{m}l)}(-q) G^{(ml)}(q) \Gamma^{(l)}(\mathbf{q}|\mathbf{p}). \quad (13)$$

Здесь $\Gamma_{\bar{n}n;m\bar{m}}^{(0)}(\mathbf{k}|\mathbf{q}) = \delta_{nm} J_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + \delta_{n\bar{m}} J_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$. Иными словами, если $m = n$, то функция $\Gamma^{(0)}$ равна первой затравочной вершине на рис.5, иначе – второй. Поскольку фурье-образ обменного взаимодействия $J_{\mathbf{k}}$ от частоты ω_n не зависит, то от частот не зависят также и $\Gamma^{(\bar{n}n)}$. При решении системы (13) удобно определить симметричную и антисимметричную комбинации вершин: $\Gamma^{(\pm)} = \Gamma^{(21)} \pm \Gamma^{(12)}$. Для этих вершин из (13) находим:

$$\Gamma^{(\pm)}(\mathbf{k}|\mathbf{p}) = -J^{(\pm)}(\mathbf{k}, \mathbf{p}) + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} J^{(\pm)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) L^{(\pm)}(\mathbf{q}) \Gamma^{(\pm)}(\mathbf{q}|\mathbf{p}), \quad (14)$$

где $J^{(\pm)}(\mathbf{k}, \mathbf{p}) = (J_{\mathbf{k}-\mathbf{p}} \pm J_{\mathbf{k}+\mathbf{p}})/2$. Здесь, следуя работе [12], введена функция

$$L^{(\pm)}(\mathbf{q}) = T \sum_{\omega_m} \left(G^{(11)}(q) G^{(22)}(-q) \pm \pm G^{(12)}(-q) G^{(21)}(q) \right), \quad (15)$$

для которой (после суммирования по мацубаровским частотам) можно получить следующее выражение:

$$L^{(\pm)}(\mathbf{q}) = \sum_{l=1, s=\pm}^3 \frac{\tanh(E_{l\mathbf{q}}^s/2T_c)}{\prod_{j=1, (j \neq l)}^3 \left((E_{l\mathbf{q}}^s)^2 - (E_{j\mathbf{q}}^s)^2 \right)} \times \frac{\Phi^{(\pm)}(E_{l\mathbf{q}}^s)}{2E_{l\mathbf{q}}^s \prod_{r=1}^3 \left((E_{l\mathbf{q}}^s)^2 - (E_{r\mathbf{q}}^{-s})^2 \right)}, \quad (16)$$

где

$$\begin{aligned} \Phi^{(\pm)}(\omega) &= -\varphi(\omega)\varphi(-\omega) \left\{ \pm a(\omega)a(-\omega)\Gamma_{\mathbf{q}}^2 + \right. \\ &+ \left[(\omega - \varepsilon - \mu)(\varphi(\omega) - 3A^2/8) - a(\omega)t_{\mathbf{q}}^{(1)} \right] \times \\ &\times \left. \left[(-\omega - \varepsilon - \mu)(\varphi(-\omega) - 3A^2/8) - a(-\omega)t_{\mathbf{q}}^{(2)} \right] \right\}, \\ a(\omega) &= C_h(\varphi(\omega) + C_1^{dd}A^2/2) - AC_1^{dp}(\omega - \varepsilon - \mu). \end{aligned}$$

Поскольку $J(\mathbf{q}) = 4J \cos(\mathbf{q}_x/2) \cos(\mathbf{q}_y/2)$, то

$$\begin{aligned} J^{(+)}(\mathbf{k}, \mathbf{p}) &= 4J \{ \cos(k_x/2) \cos(k_y/2) \cos(p_x/2) \cos(p_y/2) + \\ &+ \sin(k_x/2) \sin(k_y/2) \sin(p_x/2) \sin(p_y/2) \}, \\ J^{(-)}(\mathbf{k}, \mathbf{p}) &= 4J \{ \cos(k_x/2) \sin(k_y/2) \cos(p_x/2) \sin(p_y/2) + \\ &+ \sin(k_x/2) \cos(k_y/2) \sin(p_x/2) \cos(p_y/2) \}. \quad (17) \end{aligned}$$

Таким образом, ядра уравнений (14) имеют расщепленный характер, и решения этих уравнений записываются в виде

$$\begin{aligned} \Gamma^{(+)}(\mathbf{k}|\mathbf{p}) &= \cos(k_x/2) \cos(k_y/2) C^{(+)}(\mathbf{p}) + \\ &+ \sin(k_x/2) \sin(k_y/2) S^{(+)}(\mathbf{p}), \\ \Gamma^{(-)}(\mathbf{k}|\mathbf{p}) &= \cos(k_x/2) \sin(k_y/2) C^{(-)}(\mathbf{p}) + \\ &+ \sin(k_x/2) \cos(k_y/2) S^{(-)}(\mathbf{p}). \quad (18) \end{aligned}$$

Входящие сюда функции $C^{(\pm)}$ и $S^{(\pm)}$ удовлетворяют простой системе алгебраических уравнений.

Подстановка решений в виде (18) в уравнения (14) позволяет получить выражения, определяющие полюса амплитуды рассеяния и дающих уравнения на критическую температуру сверхпроводящего перехода. Всего получается три независимых уравнения, соответствующих различным типам симметрии сверхпроводящего параметра порядка:

$$\begin{aligned} 1 &= 4J \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \sin^2\left(\frac{q_x}{2}\right) \sin^2\left(\frac{q_y}{2}\right) L^{(+)}(\mathbf{q}), \\ 1 &= 4J \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \cos^2\left(\frac{q_x}{2}\right) \cos^2\left(\frac{q_y}{2}\right) L^{(+)}(\mathbf{q}), \\ 1 &= 4J \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \cos^2\left(\frac{q_x}{2}\right) \sin^2\left(\frac{q_y}{2}\right) L^{(-)}(\mathbf{q}). \quad (19) \end{aligned}$$

На рис.6 сплошной кривой показана зависимость $T_c(n)$ для d -типа симметрии (первое уравнение в

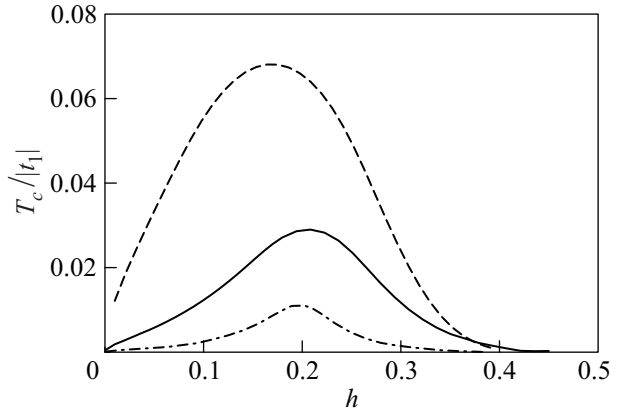


Рис.6. Концентрационные зависимости критической температуры для d -типа симметрии параметра порядка

(19)), полученная из решения уравнения на T_c для тех же значений параметров, что и при вычислении спектра фермиевских возбуждений. Видно, что концентрационная зависимость критической температуры соответствует экспериментальным данным купратных сверхпроводников. Для демонстрации влияния спиновых корреляторов на этом же рисунке пунктирной линией приведены концентрационные зависимости T_c , вычисленные при $C_1^{dd} = C_1^{dp} = 0$. Сравнение со сплошной кривой показывает, что учет корреляторов приводит к существенному уменьшению максимального значения T_c и смещению положения максимума. При расчете графика, показанного штрих-пунктирной кривой, был изменен только параметр p - d -обменного взаимодействия: $A = 4$. Видно, что рост A приводит к уменьшению T_c .

6. Изложенные результаты показывают, что наличие сильной связи между спиновыми моментами

ионов меди и кислородных дырок приводит к существенной перестройке энергетического спектра фермиевских квазичастиц. При учете двух кислородных орбиталей в одной ячейке полная картина спектра описывается шестью зонами. При неизменности суммарного спектрального веса всех зон спектральный вес каждой зоны становится зависящим от спинового состояния локализованной подсистемы. Такая зависимость проявляется через магнитные корреляторы C_1^{dd} и C_1^{dp} . При расчетах использовалось положительное значение C_1^{dd} . Такой выбор обусловлен тем, что при $A \gg I$ возникновение нелокального спинового полярона сопровождается сменой знака C_1^{dd} , так как энергетическому минимуму соответствует ситуация, когда спиновые моменты ионов меди ориентированы параллельно между собой и антипараллельно спинового моменту дырки. Заметим, что без дырки на кислородном ионе коррелятор C_1^{dd} между спиновыми моментами ионов меди, ближайшими к этому иону кислорода, был отрицательным. Следовательно, появление дырки на кислородном ионе приводит к качественному изменению спиновой конфигурации ближайших ионов меди. Очевидно, что такое изменение конфигурации при формировании нелокального спинового полярона служит важным механизмом разрушения неелевской фазы при легировании.

Возможность изменения спинового состояния ионов меди при допировании отмечалась в самых первых работах по теории электронного строения купратов. Причина изменения спиновой конфигурации иона меди связывалась с формированием синглета Жанга-Райса в результате эффективного обменного взаимодействия спиновых моментов одного иона меди и дырки, находящейся на ближайших к нему четырех ионах кислорода [13].

В нашем случае ситуация принципиально иная и связана с одновременным учетом обменной связи спина кислородной дырки со спинами двух ионов меди, находящихся в ближайшей окрестности этой дырки. Именно этим обусловлено формирование нелокального спинового полярона. В результате возникает принципиальное отличие в воздействии на спиновое состояние ионов меди: появление нелокального спинового полярона сопровождается индуцированием сильных корреляций как между спиновым моментом кислородной дырки и двумя спинами ионов меди, так и между самими спинами этих ионов меди, приводя к разрушению антиферромагнитной связи и установлению ферромагнитной связи между ними. В случае же формирования синглета Жанга-Райса устанавли-

вается корреляция только между спиновым моментом одного иона меди и спиновым моментом кислородной дырки. Корреляция же между спиновыми моментами ионов меди не индуцируется совсем.

Поскольку температура сверхпроводящего перехода находилась из анализа амплитуды рассеяния в куперовском канале для нормальной фазы, то из полученных уравнений, к сожалению, нельзя установить важное для практики соотношение между критической температурой и значением сверхпроводящего параметра порядка при нулевой температуре. Для нахождения этого параметра необходимо использовать уравнения, описывающие саму сверхпроводящую фазу. Вывод таких уравнений при учете нелокальных спиновых поляронов выходит за рамки темы данной работы и будет сделан отдельно.

Работа выполнена при поддержке Программы Президиума РАН "Квантовая физика конденсированных сред", междисциплинарного интеграционного проекта №53 СО РАН, а также Российского фонда фундаментальных исследований (гранты: #10-02-00251, #10-02-00614) и Федеральной целевой программы "Научные и научно-педагогические кадры инновационной России" на 2009-2013 годы.

1. P. W. Anderson, *Science* **235**, 1196 (1987).
2. E. Dagotto, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 763 (1994).
3. М. В. Садовский, *УФН* **171**, 539 (2001).
4. Nikolay Plakida, *High-Temperature Cuprate Superconductors Experiment, Theory, and Applications*, Springer, 2010.
5. A. F. Barabanov, L. A. Maksimov, and A. V. Mikhienkov, in *Lectures on the Physics of Highly Correlated Electron Systems IV*, Ed. F. Mancini, AIP CP, **527**, 1 (2000).
6. А. Ф. Барабанов, А. М. Белемук, *Письма в ЖЭТФ* **87**, 725 (2008); *ЖЭТФ* **138**, 289 (2010).
7. В. В. Вальков, М. М. Коровушкин, А. Ф. Барабанов, *Письма в ЖЭТФ* **88**, 426 (2008).
8. V. J. Emery and G. Reiter, *Phys. Rev. B* **38**, 4547 (1988).
9. А. Ф. Барабанов, Р. Наун, Ф. Ф. Ковалев, О. В. Уразаев, А. М. Белемук, *ЖЭТФ* **119**, 777 (2001).
10. Р. О. Зайцев, *ЖЭТФ* **68**, 207 (1975); **70**, 1100 (1976).
11. Р. О. Зайцев, *Диаграммные методы в теории сверхпроводимости и Ферромагнетизма*, М.: УРСС, 176 с. (2004).
12. Р. О. Зайцев, *Письма в ЖЭТФ* **86**, 54 (2007).
13. F. C. Zhang and T. M. Rice, *Phys. Rev. B* **37**, 3759 (1988).