

# Базисные состояния и коллективные возбуждения нелокальных трехспиновых поляронов над синглетной фазой $\text{CuO}_2$ -плоскости

В. В. Вальков, Д. М. Дзедзисашвили, А. Ф. Барабанов<sup>×</sup>

Институт физики им. Киренского СО РАН, 660036 Красноярск, Россия

Сибирский государственный аэрокосмический университет им. Решетнева, 660014 Красноярск, Россия

<sup>×</sup> Институт физики высоких давлений РАН, 142190 Троицк, Россия

Поступила в редакцию 25 января 2012 г.

Построен ортонормированный базис, описывающий однодырочные состояния  $\text{CuO}_2$ -плоскости при точном учете  $p$ - $d$ -обменной связи между спиновыми моментами дырки и двух ближайших ионов меди. При вычислении спектра коллективных возбуждений нелокальных трехспиновых поляронов введенный базис позволил включить эффекты, обусловленные зависимостью гейзенберговского взаимодействия между ближайшими ионами меди от занятости дыркой промежуточного иона кислорода. Учет этой корреляции, а также нелокальности  $p$ - $d$ -обменной связи определяет главное отличие развитого подхода к описанию энергетической структуры от расчетов, связанных с использованием синглета Жанга–Райса.

**1. Введение.** Особенности спектра фермиевских возбуждений определяют необычные свойства высокотемпературных сверхпроводников. Поэтому изучение их энергетической структуры остается в центре внимания. Один из основных вопросов связан с выяснением вклада магнитной подсистемы ионов меди в характеристики фермиевских квазичастиц.

В режиме сильной связи спиновых моментов локализованных и коллективизированных электронов 2D-решетки Кондо удовлетворительное описание энергетической структуры получается на основе спин-поляронной концепции [1]. Такой подход позволяет не только проследить за эволюцией дырочного спектра при возрастании легирования [2, 3], но и вскрыть механизм куперовской неустойчивости в ансамбле спиновых поляронов [4].

Геометрическое расположение ионов кислорода и меди в  $\text{CuO}_2$ -плоскости ограничивает применение модели 2D-решетки Кондо, поскольку появляющаяся при легировании дырка обменным образом взаимодействует не с одним, а с двумя ионами меди. Поэтому при большой величине обменной связи в системе возникает нелокальный трехспиновый полярон (НТСП) [5]. Эта нелокальность существенно усложняет математическое описание спектра коллективных возбуждений НТСП.

Экспериментальное подтверждение концепции НТСП было получено в работе [6]. В ней показано, что в легированном  $\text{Sr La}_2\text{CuO}_4$  сигнал ЭПР пропорционален концентрации Sr, а величина спинового момента парамагнитных центров равна  $1/2$ , что невозможно для синглетов Жанга–Райса. Аргументом в пользу НТСП служит также и полученное опи-

сание нетривиальной температурной зависимости  $g$ -фактора.

До недавнего времени спектр возбуждений НТСП находился численно только для конечных ( $4 \times 4$  или  $4 \times 8$ ) кластеров [7–11]. Была установлена стабильность НТСП с минимумом энергии возбуждения в точке  $(\pi/2, \pi/2)$  зоны Бриллюэна.

В данной работе предложен аналитический метод, позволивший впервые решить задачу о спектре коллективных возбуждений НТСП при учете зависимости интенсивности обменной связи спиновых моментов двух ближайших ионов меди от нахождения дырки на промежуточном ионе кислорода. Развита концепция основана на введении специального набора операторов, удовлетворяющих уравнениям движения с гамильтонианом  $H_{p-d}$ . С их помощью построен описывающий НТСП ортонормированный базис над синглетной функцией основного состояния  $|G\rangle$  гейзенберговского гамильтониана со взаимодействием антиферромагнитного типа. В рамках этого базиса получено решение уравнения Шредингера для спин-поляронных квазичастиц и описана их энергетическая структура.

**2. Эффективный гамильтониан системы.** Для реального кристаллографического строения  $\text{CuO}_2$ -плоскости гамильтониан, описывающий коллективные состояния дырки, движущейся по кислородной подсистеме и обменно связанной со спиновыми моментами ионов меди, представим в виде

$$\hat{H} = \sum_l \hat{H}_0(l) + \hat{H}_I + \hat{K}. \quad (1)$$

Оператор

$$\hat{\mathcal{H}}_0(l) = \varepsilon_p \sum_{\sigma} X_l^{\sigma\sigma} + A (\mathbf{S}_l \boldsymbol{\sigma}_l). \quad (2)$$

описывает изменение состояния системы при появлении дырки на узле  $l$ . Здесь  $X_l^{\sigma\sigma} = |l\sigma\rangle\langle l\sigma|$  – операторы Хаббарда, кет-вектор  $|l\sigma\rangle$  соответствует однодырочному состоянию иона кислорода с номером  $l$ , проекцией спинового момента  $\sigma$  и энергией  $\varepsilon_p$ . Второе слагаемое в (2) соответствует  $p$ - $d$ -обменному взаимодействию дырки, находящейся на  $l$ -м ионе кислорода, с локализованными спиновыми моментами, расположенными на двух ближайших ионах меди с радиусами-векторами  $l1$  и  $l2$  (см. рис.1). Здесь

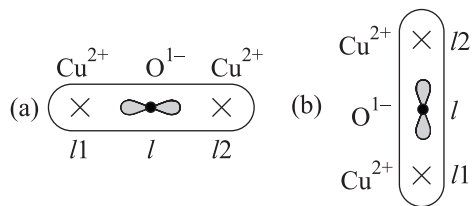


Рис. 1. Пространственная конфигурация НТСП: (а) – дырка на  $p_x$ -орбитали; (б) – дырка на  $p_y$ -орбитали

$\mathbf{S}_l = \mathbf{S}_{l1} + \mathbf{S}_{l2}$ ,  $\mathbf{S}_{l1}$  и  $\mathbf{S}_{l2}$  – векторные операторы локализованных спиновых моментов ионов меди,  $\boldsymbol{\sigma}_l$  – векторный оператор спинового момента дырки. Интенсивность  $p$ - $d$ -обменной связи определяется параметром  $A$ .

Для дальнейшего существенно, что обменное взаимодействие между локализованными спинами  $\mathbf{S}_{l1}$  и  $\mathbf{S}_{l2}$  обращается в нуль, если дырка попадает на ион кислорода с номером  $l$ , находящийся между этими спиновыми моментами [10]. Учет этой важной корреляции приводит к более сложному виду оператора обменного взаимодействия:

$$\hat{\mathcal{H}}_I = I \sum_l (\mathbf{S}_{l1} \mathbf{S}_{l2}) X_l^{00}. \quad (3)$$

Третий член эффективного гамильтониана (1) соответствует кинетической энергии:

$$\hat{K} = \sum_{l'l''} t_{ll''} X_l^{\sigma 0} X_{l''}^{0\sigma}. \quad (4)$$

Интенсивность перескока дырки между кислородными узлами  $l'$  и  $l$  определяется элементом  $t_{ll'}$ .

**3. Ортонормированный базис нелокальных трехспиновых поляронов.** Поскольку без легирования между спиновыми моментами ионов меди реализуется обменное взаимодействие антиферромагнитного типа ( $I > 0$ ), основное состояние  $|G\rangle$  системы спиновых моментов ионов меди  $\text{CuO}_2$ -плоскости

описывается синглетной функцией  $|G\rangle$ . Это означает, что

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{\text{exch}}|G\rangle &= E_{\text{exch}}|G\rangle, \\ (\mathbf{S}_L)^2|G\rangle &= 0|G\rangle, \quad S_L^z|G\rangle = 0|G\rangle. \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь  $\hat{\mathcal{H}}_{\text{exch}}$  соответствует гамильтониану  $\hat{\mathcal{H}}_I$  без операторов  $X_l^{00}$  (см. (3)). Вектор-оператор суммарного спинового момента локализованной подсистемы и его  $z$ -проекция определяются выражениями

$$\mathbf{S}_L = \sum_f \mathbf{S}_f, \quad S_L^z = \sum_f S_f^z. \quad (6)$$

При построении базиса НТСП будем исходить из требования, чтобы его векторы не только описывали состояния одной дырки на ионе кислорода с номером  $l$ , но и точно учитывали бы обменную  $p$ - $d$ -связь этой дырки со спиновыми моментами двух ближайших ионов меди. С этой целью определим семейство операторов:

$$\begin{aligned} \hat{P}_{1l\sigma} &= \left[ 1 + \frac{4}{3} (\mathbf{S}_{l1} \mathbf{S}_{l2}) - \frac{4}{3} \cdot 2\sigma S_l^z \right] X_l^{0\sigma} - \frac{4}{3} S_l^{2\bar{\sigma}} X_l^{0\bar{\sigma}}, \\ \hat{P}_{2l\sigma} &= [1 - 4 (\mathbf{S}_{l1} \mathbf{S}_{l2})] X_l^{0\sigma}, \end{aligned} \quad (7)$$

$$\hat{P}_{3l\sigma} = \left[ 1 + \frac{4}{3} (\mathbf{S}_{l1} \mathbf{S}_{l2}) + \frac{2}{3} \cdot 2\sigma S_l^z \right] X_l^{0\sigma} + \frac{2}{3} S_l^{2\bar{\sigma}} X_l^{0\bar{\sigma}},$$

где  $S_l^{2\sigma} = S_l^+$  при  $\sigma = +1/2$  и  $S_l^{2\sigma} = S_l^-$  при  $\sigma = -1/2$ . Тогда искомым базис НТСП состоит из набора ортонормированных состояний с  $S_{\text{tot}} = 1/2$ :

$$|\psi_{jl\sigma}\rangle = a_j \hat{P}_{jl\sigma}^+ |G\rangle, \quad j = 1, 2, 3. \quad (8)$$

Выполнимость высказанных требований к базису основана на справедливости уравнений

$$\begin{aligned} [\hat{P}_{1l\sigma}, \hat{\mathcal{H}}_0(l)] &= (\varepsilon_p - A) \cdot \hat{P}_{1l\sigma}, \\ [\hat{P}_{2l\sigma}, \hat{\mathcal{H}}_0(l)] &= \varepsilon_p \cdot \hat{P}_{2l\sigma}, \\ [\hat{P}_{3l\sigma}, \hat{\mathcal{H}}_0(l)] &= (\varepsilon_p + A/2) \cdot \hat{P}_{3l\sigma}, \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} (\mathbf{S}_{\text{tot}})^2 |\psi_{jl\sigma}\rangle &= \left(\frac{3}{4}\right) |\psi_{jl\sigma}\rangle, \quad \sigma = \pm\frac{1}{2}, \\ S_{\text{tot}}^z |\psi_{jl\sigma}\rangle &= \sigma |\psi_{jl\sigma}\rangle. \end{aligned} \quad (10)$$

Вектор-оператор спинового момента всей системы и его проекция на ось  $Oz$  определяются выражениями

$$\mathbf{S}_{\text{tot}} = \mathbf{S}_L + \sum_l \boldsymbol{\sigma}_l, \quad S_{\text{tot}}^z = S_L^z + \sum_l \sigma_l^z. \quad (11)$$

Доказательство (10) основано на использовании свойств  $|G\rangle$  и коммутационных соотношений

$$[S_{\text{tot}}^z, \hat{P}_{jl\sigma}^+] = \sigma \hat{P}_{jl\sigma}^+, \quad [S_{\text{tot}}^+, \hat{P}_{jl\sigma}^+] = \delta_{\sigma\downarrow} \hat{P}_{jl\uparrow}^+, \quad (12)$$

где  $\delta_{\sigma\sigma'}$  – символ Кронекера.

Ортогональность (8) при  $l \neq l'$  следует из того, что

$$X_l^{\sigma 0} X_{l'}^{0\sigma} |G\rangle = 0. \quad (13)$$

Если индексы узлов совпадают, но  $i \neq j$ , то ортогональность (8) получаем из равенств

$$\hat{P}_{il\sigma} \hat{P}_{jl\sigma}^+ = 0, \quad \hat{P}_{il\bar{\sigma}} \hat{P}_{jl\sigma}^+ = 0, \quad i \neq j, \quad (14)$$

которые следуют из (7) и тождеств

$$\begin{aligned} (\mathbf{S}_{l1} \mathbf{S}_{l2})^2 &= \frac{3}{16} - \frac{1}{2} (\mathbf{S}_{l1} \mathbf{S}_{l2}), \\ S_l^z (\mathbf{S}_{l1} \mathbf{S}_{l2}) &= \frac{1}{4} S_l^z, \quad S_l^{2\sigma} (\mathbf{S}_{l1} \mathbf{S}_{l2}) = \frac{1}{4} S_l^{2\sigma}, \\ S_l^{2\bar{\sigma}} S_l^{2\sigma} &= \frac{3}{2} + 2 (\mathbf{S}_{l1} \mathbf{S}_{l2}) - 2\sigma S_l^z - (S_l^z)^2. \end{aligned} \quad (15)$$

Если  $i = j$ , но спиновые проекции различны, то

$$\begin{aligned} \hat{P}_{1l\bar{\sigma}} \hat{P}_{1l\sigma}^+ &= -\frac{16}{3} X_l^{00} S_l^{2\sigma}, \quad \hat{P}_{2l\bar{\sigma}} \hat{P}_{2l\sigma}^+ = 0, \\ \hat{P}_{3l\bar{\sigma}} \hat{P}_{3l\sigma}^+ &= \frac{4}{3} X_l^{00} S_l^{2\sigma}. \end{aligned} \quad (16)$$

Отсюда следует, что  $\langle \psi_{jl\sigma} | \psi_{jl\bar{\sigma}} \rangle = 0$ , поскольку оператор  $S_l^{\pm}$  переводит состояние  $|G\rangle$  в подпространство с  $S_{\text{tot}} = 1$ , ортогональное  $|G\rangle$ . Для  $j = 2$  ортогональность следует из второго равенства (16).

При совпадающих квантовых числах получаем

$$\begin{aligned} \hat{P}_{1l\sigma} \hat{P}_{1l\sigma}^+ &= \frac{16}{3} X_l^{00} \left[ \frac{3}{4} + (\mathbf{S}_{l1} \mathbf{S}_{l2}) - 2\sigma S_l^z \right], \\ \hat{P}_{2l\sigma} \hat{P}_{2l\sigma}^+ &= 4 X_l^{00} [1 - 4 (\mathbf{S}_{l1} \mathbf{S}_{l2})], \\ \hat{P}_{3l\sigma} \hat{P}_{3l\sigma}^+ &= \frac{4}{3} X_l^{00} \left[ \frac{3}{2} + 2 (\mathbf{S}_{l1} \mathbf{S}_{l2}) + 2\sigma S_l^z \right]. \end{aligned} \quad (17)$$

Поэтому нормировочные константы  $a_j$  в (8) выражаются через спиновый коррелятор для двух ближайших к кислородному узлу  $l$  соседних ионов меди:

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{8\sqrt{3/2} + 2C_1}}, \quad a_2 = \frac{1}{2\sqrt{1 - 4C_1}}, \\ a_3 &= \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{3/2} + 2C_1}, \quad C_1 = \langle G | \mathbf{S}_{l1} \mathbf{S}_{l2} | G \rangle. \end{aligned} \quad (18)$$

**4. Коллективные состояния НТСП и корреляционные ренормировки.** При включении перескоков однодырочное состояние представимо в виде суперпозиции состояний (8):

$$|\Psi_{\sigma}\rangle = \sum_{i=1}^3 \left( \sum_l \alpha_{il} |\psi_{il\sigma}\rangle + \sum_m \beta_{im} |\psi_{im\sigma}\rangle \right). \quad (19)$$

Здесь учтена двухподрешеточная структура кислородной подсистемы  $\text{CuO}_2$ -плоскости. Индексами  $l, l', l'', \dots$  обозначаются узлы из первой кислородной подрешетки ( $p_x$ -орбитали), а индексами  $m, m', m'', \dots$  – из второй ( $p_y$ -орбитали). Из определения операторов  $P_{jl\sigma}$  следует точное соотношение:

$$X_l^{0\sigma} = \sum_{j=1}^3 \gamma_j \hat{P}_{jl\sigma}, \quad \gamma_1 = \gamma_2 = \frac{1}{4}, \quad \gamma_3 = \frac{1}{2}. \quad (20)$$

Поэтому оператор кинетической энергии переписывается в виде

$$\begin{aligned} \hat{K} &= \sum_{ij} \gamma_i \gamma_j \left[ \sum_{lm\sigma} t_{lm} \left( \hat{P}_{il\sigma}^+ \hat{P}_{jm\sigma} + \hat{P}_{jm\sigma}^+ \hat{P}_{il\sigma} \right) + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{l'l'\sigma} t_{l'l'} \hat{P}_{il\sigma}^+ \hat{P}_{j'l'\sigma} + \sum_{mm'\sigma} t_{mm'} \hat{P}_{im\sigma}^+ \hat{P}_{j'm'\sigma} \right]. \end{aligned} \quad (21)$$

Из условия ортогональности базиса (8) получаем

$$\begin{aligned} (E - E_{\text{exch}}) \alpha_{il} &= E_i \alpha_{il} + \sum_j \alpha_{jl} I^{ij} + \\ &\quad + \sum_{j'l'} \alpha_{j'l'} t_{l'l'}^{ij} + \sum_{jm'} \beta_{jm'} t_{lm'}^{ij}, \\ (E - E_{\text{exch}}) \beta_{im} &= E_i \beta_{im} + \sum_j \beta_{jm} I^{ij} + \\ &\quad + \sum_{jm'} \beta_{jm'} t_{mm'}^{ij} + \sum_{j'l'} \alpha_{j'l'} t_{ml'}^{ij}. \end{aligned} \quad (22)$$

Ренормированные параметры

$$t_{gg'}^{ij} = t_{gg'} T_{gg'}^{ij}, \quad I^{ij} = IM^{ij} \quad (23)$$

выражаются через корреляторы, определенные на синглетной фазе (индексы “ $g$ ” и “ $g'$ ” произвольные):

$$\begin{aligned} T_{gg'}^{ij} &= \gamma_i \gamma_j a_i a_j \sum_{\sigma'} \langle G | \hat{P}_{ig\sigma} \hat{P}_{ig'\sigma'}^+ \hat{P}_{jg'\sigma'} \hat{P}_{jg\sigma}^+ | G \rangle, \\ M^{ij} &= a_i a_j \sum_{g'} \langle G | \hat{P}_{ig\sigma} \left[ (\mathbf{S}_{g'1} \mathbf{S}_{g'2}), \hat{P}_{jg'\sigma}^+ \right] | G \rangle. \end{aligned} \quad (24)$$

Учет нелокальной спин-поляронной связи приводит к трем эффектам. Первый из них связан с возникновением расщепления энергетической структуры из-за наличия трех типов НТСП. Второй эффект заключается в возникновении гибридизации между различными типами НТСП. Третий проявляется в ренормировке интегралов перескоков.

Входящие в (22) энергии  $E_i$  определяются выражениями

$$\begin{aligned} E_1 &= \varepsilon_p - A - I/4, \quad E_2 = \varepsilon_p + 3I/4, \\ E_3 &= \varepsilon_p + A/2 - I/4. \end{aligned} \quad (25)$$

Видно, что, кроме расщепления энергетической структуры НТСП, возникла дополнительная сдвигка одноузельных энергий, обусловленная спецификой обменного взаимодействия. Этот важный эффект связан с отмечавшейся выше сильной корреляцией между интенсивностью обменного взаимодействия и наличием дырки на промежуточном ионе кислорода (см. выражение (3) и комментарий после него). Конкретная зависимость этих величин от обменного интеграла  $I$  определяется тем, что формирование состояний  $|\psi_{1l\sigma}\rangle$  и  $|\psi_{3l\sigma}\rangle$  происходит в результате сложения суммарного момента ионов меди ( $\mathbf{S}_{l1} + \mathbf{S}_{l2} = 1$ ) со спином дырки ( $\sigma_l = 1/2$ ). Поэтому без дырки обменная энергия пары спиновых моментов ионов меди равнялась  $I/4$ . Появление дырки с возникновением НТСП первого либо третьего типа, как отмечалось ранее, уничтожает обменную связь и приводит к дополнительному вкладу в одноузельную энергию  $-I/4$ . При этом НТСП второго типа возникает при появлении дырки на узле  $l$ , причем ее спиновый момент складывается с  $\mathbf{S}_l = \mathbf{S}_{l1} + \mathbf{S}_{l2} = 0$ . Поскольку для такого случая энергия обменного взаимодействия равнялась  $-(3/4)I$ , уничтожение обменной связи дает проигрыш в энергии для НТСП второго типа на величину  $(3/4)I$ .

Переходя в  $\mathbf{k}$ -представление и вводя энергии возбуждений

$$\epsilon = E - E_{\text{exch}}, \quad (26)$$

приходим к системе шести уравнений:

$$\begin{aligned} [\epsilon - E_i] \alpha_{i\mathbf{k}} &= \sum_j \alpha_{j\mathbf{k}} \left( I^{ij} + t_{1\mathbf{k}}^{ij} \right) + \sum_j \beta_{j\mathbf{k}} \Gamma_{\mathbf{k}}^{ij}, \\ [\epsilon - E_i] \beta_{i\mathbf{k}} &= \sum_j \beta_{j\mathbf{k}} \left( I^{ij} + t_{2\mathbf{k}}^{ij} \right) + \sum_j \alpha_{j\mathbf{k}} \Gamma_{\mathbf{k}}^{ij}. \end{aligned} \quad (27)$$

В принятой системе обозначений (см. рис. 2)

$$\begin{aligned} \Gamma_{\mathbf{k}}^{ij} &= 4t_1 T_1^{ij} \sin(k_x/2) \sin(k_y/2) + \\ &+ 4t_4 T_4^{ij} \sin(k_x/2) \sin(3k_y/2) + \\ &+ 4t_4' T_4'^{ij} \sin(3k_x/2) \sin(k_y/2), \\ t_{1\mathbf{k}}^{ij} &= -2t_2' T_2'^{ij} \cos(k_x) + 2t_2 T_2^{ij} \cos(k_y) - \\ &- 4t_3 T_3^{ij} \cos(k_x) \cos(k_y) + \\ &+ 2t_5 T_5^{ij} \cos(2k_y) - 2t_5' T_5'^{ij} \cos(2k_x). \end{aligned} \quad (28)$$

Индекс “ $n$ ” у ренормирующего множителя  $T_n^{ij}$  соответствует номеру той координационной сферы, в пределах которой находится узел  $l'$  по отношению к узлу  $l$ . Выражение для  $t_{2\mathbf{k}}^{ij}$  получается из  $t_{1\mathbf{k}}^{ij}$  посредством замены  $k_x \leftrightarrow k_y$ .

Используя (14), (16) и (17), получаем, что

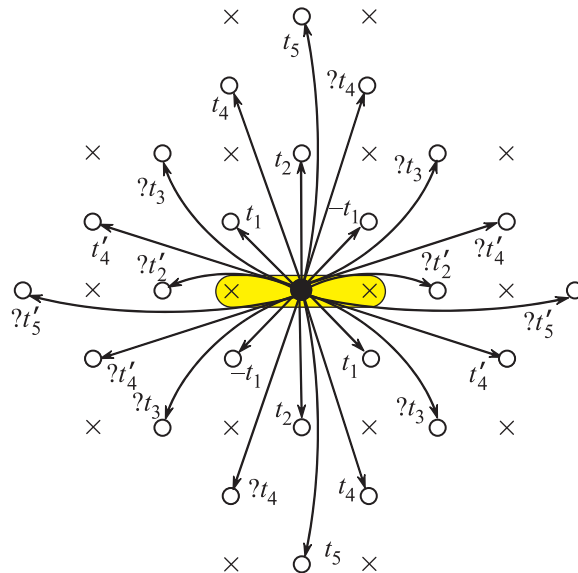


Рис. 2. Интегралы перескоков дырки на ионы кислорода (светлые кружки). Затемненный овал включает ион кислорода с находящейся на нем дыркой (темный кружок) и два иона меди (крестики), участвующие в формировании НТСП

$$\begin{aligned} I^{11} &= a_1^2 \frac{8}{9} I (-15C_1 + 2C_2 + C_3), \\ I^{22} &= a_2^2 \cdot 8I (-3C_1 + 2C_2 + C_3), \\ I^{33} &= a_3^2 I \frac{16}{9} \left( -3C_1 + C_2 + \frac{1}{3}C_3 \right), \\ I^{12} = I^{21} &= a_1 a_2 \frac{8}{3} I (3C_1 - 2C_2 - C_3), \\ I^{13} = I^{31} &= a_1 a_3 \frac{8}{9} I (3C_1 + 2C_2 + C_3), \\ I^{23} = I^{32} &= a_2 a_3 \frac{8}{3} I (3C_1 - 2C_2 - C_3) \end{aligned} \quad (29)$$

определяются значениями корреляционных функций спиновых моментов ионов меди для синглетной фазы:

$$C_j = \langle G | (\mathbf{S}_{\mathbf{R}_f} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{R}_f + \delta_j}) | G \rangle, \quad (30)$$

где  $\mathbf{R}_f$  – радиус-вектор иона меди, а  $\delta_j$  – вектор, соединяющий этот ион с другим ионом меди из  $j$ -й координационной сферы.

Для выбранного числа интегралов перескоков в теорию входят восемь матриц  $T_n^{ij}$ . В частности, элементы ренормировочной матрицы для первой координационной сферы выражаются через те же двухспиновые корреляторы, что и элементы матрицы  $\hat{I}$ :

$$\begin{aligned}
T_1^{11} &= a_1^2 \frac{4}{3} \left( \frac{7}{4} + \frac{14}{3} C_1 + \frac{5}{3} C_2 \right), \\
T_1^{22} &= a_2^2 (1 - 8C_1 + 4C_2), \\
T_1^{33} &= a_3^2 \frac{4}{9} (3 + 8C_1 + 2C_2), \\
T_1^{12} = T_1^{21} &= a_1 a_2 \frac{2}{3} \left( \frac{3}{2} - 4C_1 - 2C_3 \right), \\
T_1^{13} = T_1^{31} &= a_1 a_3 \frac{4}{9} \left( \frac{3}{4} + 2C_1 - C_2 \right), \\
T_1^{23} = T_1^{32} &= a_2 a_3 \frac{2}{3} \left( \frac{3}{2} - 4C_1 - 2C_2 \right). \quad (31)
\end{aligned}$$

При увеличении номера координационной сферы элементы ренормирующих матриц становятся зависящими не только от двухспиновых корреляционных функций  $C_n$  с большим  $n$ , но и от четырехспиновых корреляторов  $C_j^{(4)}$ . Индекс “ $j$ ” в обозначении четырехспиновых корреляторов определяет расстояние между узлами ионов кислорода  $g$  и  $g'$ , чьи ближайшие ионы меди входят в определение  $C_j^{(4)}$ :

$$C_{gg'}^{(4)} = \langle G | (\mathbf{S}_{g1} \mathbf{S}_{g2}) (\mathbf{S}_{g'1} \mathbf{S}_{g'2}) | G \rangle. \quad (32)$$

Индексы “ $j$ ” совпадают с индексами соответствующих интегралов перескоков кислородных дырок, изображенных на рис. 2.

Например, элементы матрицы  $\hat{T}_5$ :

$$\begin{aligned}
T_5^{11} &= a_1^2 \frac{4}{3} \left[ \frac{3}{4} + 2C_1 + \frac{8}{3} (C_3 + C_4) + \frac{4}{3} C_5^{(4)} \right], \\
T_5^{22} &= a_2^2 (1 - 8C_1 + 16C_5^{(4)}), \\
T_5^{33} &= a_3^2 \frac{4}{9} \left( \frac{9}{4} + 6C_1 + 2C_3 + 2C_4 + 4C_5^{(4)} \right), \\
T_5^{12} = T_5^{21} &= a_1 a_2 \frac{2}{3} \left( \frac{3}{2} - 4C_1 - 8C_5^{(4)} \right), \\
T_5^{13} = T_5^{31} &= a_1 a_3 \frac{4}{9} \left[ \frac{9}{4} + 6C_1 - 4(C_3 + C_4 - C_5^{(4)}) \right], \\
T_5^{23} = T_5^{32} &= a_2 a_3 \frac{2}{3} \left( \frac{3}{2} - 4C_1 - 8C_5^{(4)} \right), \quad (33)
\end{aligned}$$

определяются двухспиновыми корреляторами вплоть до четвертой координационной сферы в подрешетке ионов меди, а также четырехспиновым коррелятором  $C_5^{(4)}$  из пятой координационной сферы подрешетки ионов кислорода. Элементы матриц  $\hat{T}$ , ренормирующие остальные интегралы туннелирования, имеют похожий вид. В силу громоздкости они здесь не приводятся.

**5. Энергетическая структура НТСП и ее зависимость от характеристик синглетной фазы.** Спектр фермиевских коллективных возбуждений НТСП на  $\text{CuO}_2$ -плоскости определяется в результате решения системы (27) при конкретных значениях спиновых корреляторов (30) и (32).

На рис. 3 представлен спектр возбуждений НТСП и продемонстрирована его модификация при изме-

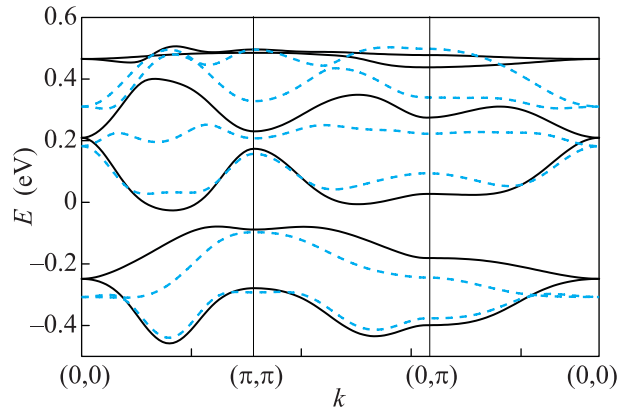


Рис. 3. Спектр коллективных возбуждений НТСП для параметров (в эВ)  $t_1 = 0.1$ ,  $t_2 = t_2 = 0.06$ ,  $t_3 = -0.02$ ,  $t_4 = t_4 = 0.045$ ,  $t_5 = t_5 = 0.02$ ,  $A = 0.4$ ,  $I = 0.1$ ,  $\varepsilon_p = 0$ . Сплошные линии показывают энергетическую структуру при значениях корреляторов  $C_1 = -0.33$ ,  $C_2 = 0.21$ ,  $C_3 = 0.18$ ,  $C_4 = -0.15$ ,  $C_6 = -0.1$  и все  $C_j^{(4)} \approx (C_1)^2$ . Штриховые линии – спектр для случая, когда только коррелятор  $C_1 = -0.33$  отличен от нуля

нению значений спиновых корреляторов. Параметры перескоков выбирались так, чтобы нижняя ветвь спектра в точке  $(\pi/2, \pi/2)$  зоны Бриллюэна достигала минимального значения, а ширина зоны проводимости составляла  $W \sim 0.5$  эВ. Обменное взаимодействие  $I \sim 1000$  К. Параметр  $p$ - $d$ -обмена  $A \gg t_1$ . Сплошными линиями на рисунке показаны ветви спектра возбуждений НТСП, рассчитанные при значениях двухспиновых корреляторов  $C_1$ ,  $C_2$  и  $C_3$ , взятых из [12]. Для четырехспинового коррелятора использовалось расщепление.

Возникновение шести ветвей спектра обусловлено как двухподрешеточной структурой расположения кислородных ионов, так и наличием трех энергетических уровней ( $E_1$ ,  $E_2$ ,  $E_3$ ) изолированного НТСП (25). Расщепленный характер зон возникает при выполнении условия  $A \gg t_1$ . Низкоэнергетическим возбуждениям при выбранных параметрах соответствует область вблизи точки  $(\pi/2, \pi/2)$  зоны Бриллюэна. Если все корреляторы, кроме  $C_1$ , положить равными нулю, то в отличие от верхних ветвей, нижняя ветвь спектра изменяется несущественно (штриховые линии на рис. 3).

Нижние ветви спектра проявляют сильную зависимость от  $C_1$ . Это продемонстрировано на рис. 4. На

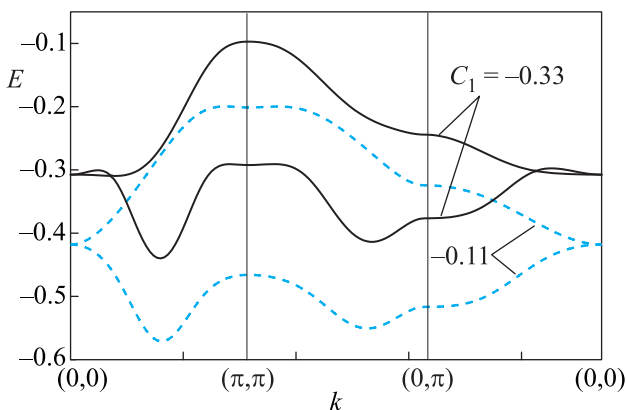


Рис. 4. Влияние коррелятора  $C_1$  на спектр нижней ветви возбуждений НТСП. Параметры модели такие же, как и на рис. 3

нем показаны нижние ветви спектра для двух значений  $|C_1|$  (все остальные корреляторы считаются равными нулю). Видно, что уменьшение  $|C_1|$  приводит к понижению минимальной энергии возбуждения НТСП. Это означает, что при допировании энергия системы будет понижаться при разрушении ближних АФМ-корреляций.

**6. Заключение.** Полученное решение задачи о спектре коллективных возбуждений НТСП основано на использовании четырех ключевых факторов:

1) построение операторов  $P_{jl\sigma}$ , удовлетворяющих уравнениям движения с гамильтонианом  $H_{p-d}$  и позволяющих точно учесть сильную  $p-d$ -обменную связь между спиновыми моментами ионов меди и дыркой на кислороде;

2) использование в качестве вакуума синглетной функции основного состояния  $|G\rangle$  гейзенберговского гамильтониана со взаимодействием антиферромагнитного типа;

3) введение базисных состояний НТСП, получаемых посредством действия на  $|G\rangle$  операторов, эрмитово сопряженных введенным;

4) доказательство ортонормированности полученного базиса НТСП и его применение при решении задачи об энергетическом спектре коллективных возбуждений.

Заметим, что точный учет обменной связи кислородной дырки с двумя ионами меди определяет первое существенное отличие развитого метода построения коллективного спектра фермиевских возбуждений от метода Жанга–Райса, в котором кислородная дырка обменно связана только с одним ионом меди.

Вторая важная особенность нашего подхода связана с явным учетом зависимости обменной связи спиновых моментов ионов меди от наличия дырки на промежуточном ионе кислорода. Это существенно сказывается на гибридизации поляронов, поскольку наряду с ренормировкой одноузельного параметра смешивания происходит изменение их локальных энергий.

В итоге развитый метод позволил не только впервые получить коллективный спектр НТСП для  $\text{CuO}_2$ -плоскости, но и описать зонную структуру ВТСП при учете важных эффектов, которые не включаются в подходе Жанга–Райса. Это проявляется, например, в значительном выигрыше по энергии затравочной квазичастицы, обусловленном более корректным учетом  $H_{p-d}$ , определяющим обменную связь дырки с двумя ионами меди.

Работа выполнена при поддержке Программы Президиума РАН “Квантовая физика мезоскопических и неупорядоченных систем”, РФФИ (грант # 10-02-00251), РФФИ р-сибирь (грант # 11-02-98007) и ФЦП “Научные и научно-педагогические кадры инновационной России” на 2009–2013 годы.

1. A. F. Barabanov, L. A. Maksimov, and A. V. Mikhienkov, *Theory of the Spin-Polaron for 2D Antiferromagnets*, in *Lectures on the Physics of Highly Correlated Electron Systems IV* (ed. by F. Mancini), AIP CP, 2000, v. 527, p. 1.
2. А. Ф. Барабанов, А. М. Белемук, Письма в ЖЭТФ **87**, 725 (2008).
3. А. Ф. Барабанов, А. М. Белемук, ЖЭТФ **138**, 289 (2010).
4. В. В. Вальков, М. М. Коровушкин, А. Ф. Барабанов, Письма в ЖЭТФ **88**, 426 (2008).
5. V. J. Emery and G. Reiter, *Phys. Rev. B* **38**, 4547 (1988).
6. B. I. Kochelaev, J. Sichelschmidt, B. Elschner et al., *PRL* **79**, 4274 (1997).
7. D. M. Frenkel, R. J. Gooding, B. I. Shraiman, and E. D. Siggia, *PRB* **41**, 350 (1990).
8. H. Q. Ding, G. H. Lang, and W. A. Goddard III, *PRB* **46**, 14317 (1992).
9. Y. Petrov and T. Egami, *PRB* **58**, 9485 (1998).
10. B. Lau, M. Berciu, and G. A. Sawatzky, *PRL* **106**, 036401 (2011).
11. B. Lau, M. Berciu, and G. A. Sawatzky, *PRB* **84**, 165102 (2011).
12. A. F. Barabanov and O. A. Starykh, *J. Phys. Soc. Jpn.* **61**, 704 (1992); A. F. Barabanov, V. M. Berezovsky, ЖЭТФ **106**, 1156 (1994); *J. Phys. Soc. Jpn.* **63**, 3974 (1994); *Phys. Lett. A* **186**, 175 (1994).