Письма в ЖЭТФ, том 104, вып. 10, с. 745 – 757

Спин-поляронная природа фермиевских квазичастиц и их d-волновое спаривание в купратных сверхпроводниках

В. В. Вальков[+)1)], *Д. М. Дзебисашвили*[+)], *А. Ф. Барабанов*[*)]

[+]*Институт физики им. Киренского СО РАН, 660036 Красноярск, Россия*

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

Поступила в редакцию 11 октября 2016 г.

В рамках спин-фермионной модели, к которой в режиме сильных электронных корреляций сводится модель Эмери, показано, что фермиевские квазичастицы в купратных высокотемпературных сверхпроводниках (ВТСП) формируются при сильном влиянии обменной связи между кислородной дыркой и спинами ионов меди. Это определяет спин-поляронную природу фермиевских квазичастиц в купратных ВТСП. Установлена куперовская неустойчивость ансамбля таких квазичастиц по отношению к сверхпроводящей фазе с d-типом симметрии параметра порядка. Для нормальной фазы спин-поляронная концепция позволила воспроизвести тонкие особенности эволюции ферми-поверхности, экспериментально наблюдаемые в $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ при изменении уровня допирования x. Рассчитанная фазовая $T{-}x$-диаграмма хорошо коррелирует с экспериментальными данными по купратным ВТСП.

DOI: 10.7868/S0370274X16220148

1. Введение Результаты исследований свойств высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) привели к выводу о реализации в этих материалах режима сильных корреляций между зарядовыми и спиновыми степенями свободы. С такими корреляциями связывают, например, псевдощелевое состояние недодопированных оксидов меди [1, 2], а также $d_{x^2-y^2}$- тип симметрии сверхпроводящего параметра порядка [3, 4].

Теоретические представления о природе куперовской неустойчивости ВТСП и, в частности, о роли спин-зарядовых флуктуаций в интегральном механизме сверхпроводящего спаривания развивались в основном в рамках модели Хаббарда [5–7], $t{-}J$- и $t{-}J^*$-моделей [8–11]. Их специфическая особенность определяется тем, что одна и та же система фермионов является носителем зарядовых и спиновых степеней свободы.

Между тем реальная структура CuO_2-плоскости купратных ВТСП характеризуется пространственной разнесенностью спиновых моментов ионов меди и кислородных дырок. Кроме того, истинная элементарная ячейка содержит два иона кислорода. Эти факторы не просто усложняют описание энергетической структуры фермиевских возбуждений, но, и как выяснилось в последнее время, существенно сказываются на величинах вкладов кулоновского взаимодействия в сверхпроводящее спаривание различной симметрии. Практическое значение данного утверждения связано с установлением соответствия между экспериментально наблюдаемым типом симметрии сверхпроводящего параметра порядка и теоретически рассчитанным [12].

Отмеченные особенности строения CuO_2-плоскости, как известно, адекватно описываются трехзонной p–d-моделью [13, 14, 15]. Сопоставление теоретических результатов, полученных в рамках такой модели, с экспериментальными данными привело к заключению о существенной роли эффектов гибридизации между d-состояниями каждого иона меди и p-состояниями четырех ближайших к нему ионов кислорода. Поэтому появление при допировании дырок в кислородной подсистеме сопровождается формированием сильно связанного спин-фермионного состояния: синглета Жанга–Райса [16]. Следовательно, теория нормального и сверхпроводящего состояния купратов должна строиться при учете этой спин-фермионной связи.

Предпринятые в этом направлении исследования основывались, например, на методе проектирования, с помощью которого пытались свести динамику кислородных дырок к динамике фермионов в подпространстве отмеченных синглетных состояний. При этом в качестве эффективной модели электронного строения CuO_2-плоскости стремились получить модель Хаббарда, или однозонную $t{-}J$-модель [17].

Следует, однако, отметить, что в рамках такого сценария индуцируется существенный недоста-

[1)]e-mail: vvv@iph.krasn.ru

ток, обусловленный отсутствием в $t-J$-модели спин-коррелированных перескоков, тогда как более корректное рассмотрение приводит к таким перескокам [18], играющим существенную роль в формировании спектральных свойств фермиевских квазичастиц.

Отмеченное затруднение устраняется, если учесть, что реальные соотношения между параметрами трехзонной p–d-модели соответствуют режиму сильных электронных корреляций. Тогда применение, например, операторной формы теории возмущений [19] позволяет построить эффективный гамильтониан $\mathcal{H}_{\rm eff}$, гильбертово пространство которого содержит только гомеополярные состояния ионов меди. При этом гибридизационные эффекты трансформируются в дополнительные эффективные взаимодействия. Среди них наиболее существенным является сильная спин-фермионная связь между спинами ионов меди и кислородных дырок. Полученный таким образом $\mathcal{H}_{\rm eff}$ соответствует спин-фермионной модели [20–22]. Существенно, что в ней сохраняется, как две подсистемы дырок, так и пространственная разнесенность спинов ионов меди с отмеченными подсистемами кислородных дырок.

В рамках спин-фермионной модели был развит спин-поляронный сценарий формирования зарядовых возбуждений в нормальной фазе купратных ВТСП [23–25]. В этих работах концепция спинового полярона была реализована на основе проекционной техники Цванцига–Мори [26, 27]. Ключевым моментом теории явилось введение в базисный набор оператора, который корректно учитывает сильную спин-зарядовую связь. В таком подходе был рассчитан спектр спин-поляронных дырочных возбуждений и выявлена важная роль прямых кислород-кислородных перескоков дырок [23]. В самосогласованном борновском приближении была рассчитана спектральная интенсивность спиновых поляронов и обнаружен квазичастичный пик в окрестности дна дисперсии затравочных дырок в точке $(\pi/2,\pi/2)$ [24]. Кроме того, были проанализированы изменения спин-поляронной зоны при учете связи локального полярона с антиферромагнитной спиновой волной с $Q=(\pi,\pi)$ [28].

В настоящем обзоре представлены результаты исследований свойств купратных ВТСП на основе концепции спинового полярона, полученные в последние годы при выполнении проекта РФФИ.

Первый блок результатов относится к дальнейшему развитию спин-поляронного подхода в нормальной фазе. В частности, впервые получены аналитические выражения, описывающие энергетический спектр спин-поляронных квазичастиц. На основе анализа спектральных кривых продемонстрирован спин-поляронный генезис этих квазичастиц. Описана эволюция поверхности Ферми (ПФ) в реальном соединении $\mathrm{La_{2-x}Sr_xCuO_4}$ в широком интервале легирования x. При этом единственным подгоночным параметром теории являлся интеграл туннелирования дырок между ближайшими ионами кислорода.

Второй блок результатов относится к построению теории сверхпроводимости купратов в рамках спин-поляронного подхода. Впервые установлена куперовская неустойчивость с $\mathrm{d}_{x^2-y^2}$-волновым параметром порядка в ансамбле спин-поляронных квазичастиц. Показано, что в качестве константы связи выступает обменное взаимодействие между спинами на ионах меди. Построена фазовая диаграмма, которая хорошо коррелирует с имеющимися экспериментальными данным.

2. Гамильтониан спин-фермионной модели $\mathrm{CuO_2}$ плоскости. Известно, что SU(2)-инвариантная спин-фермионная модель возникает из трехзонной модели Эмери в режиме сильных электронных корреляций. Этот режим определяется условием малости параметра смешивания t_{pd} между p-состояниями ионов кислорода и d-состояниями ионов меди по сравнению с: 1) энергетической разностью $\Delta_{pd}=\varepsilon_p-\varepsilon_d$ энергий отмеченных состояний; 2) энергией кулоновского отталкивания U_d двух дырок на одном ионе меди. Гамильтониан спин-фермионной модели может быть записан в виде [20, 21]:

$$\hat{\mathcal{H}}=\varepsilon_p\sum_l c_l^+c_l+t\sum_{l\rho}\varrho(\rho)\ c_l^+c_{l+\rho}+ \\ +\tau\sum_{f\delta\delta'}u_{\delta\delta'}\ c_{f+\delta}^+c_{f+\delta'}+\frac{J}{4}\sum_{f\delta\delta'}u_{\delta\delta'}\ c_{f+\delta}^+\tilde{S}_f c_{f+\delta'}+ \\ +\hat{\mathcal{H}}_{\rm exch}, \qquad (1)$$

где

$$\tau=\frac{(t_{pd})^2}{2}\left[\frac{1}{\Delta_{pd}}-\frac{1}{U_d-\Delta_{pd}}\right],$$
$$J=4(t_{pd})^2\left[\frac{1}{\Delta_{pd}}+\frac{1}{U_d-\Delta_{pd}}\right].$$

Первое слагаемое в (1) описывает энергию связи легированной дырки с ионом кислорода. Предполагается, что энергия ε_p отсчитывается от химпотенциала μ. Оператор $c_l^+=(c_{l\uparrow}^+,c_{l\downarrow}^+)$ в спинорном представлении описывает процесс рождения дырки на ионе кислорода с номером l.

Второе слагаемое $\hat{\mathcal{H}}$ отвечает прямым перескокам дырок между ближайшими ионами кислорода, связанными векторами $\boldsymbol{\rho}$. Интенсивность перескоков определяется интегралом туннелирования $t\varrho(\rho)$. Его знак определяется функцией $\varrho(\rho)$, зависящей от ориентации линии, на которой находятся ионы кислорода и между которыми осуществляется перескок. Вектор $\boldsymbol{\rho}$ пробегает четыре значения: $\pm(g_x + g_y)/2$ и $\pm(g_x - g_y)/2$ (где $\{\pm g_x, \pm g_y\}$ – вектора четырех ближайших соседей решетки меди), и соединяет ион кислорода в узле l с ближайшим к нему ионом кислорода с номером $l+\rho$. Для выбранных фаз кислородных орбиталей $\varrho(\rho) = 1$, если $\rho = \pm(g_x + g_y)/2$. Если же $\rho = \pm(g_x - g_y)/2$, то $\varrho(\rho) = -1$.

Третье и четвертое слагаемые в (1) обусловлены учетом процессов второго порядка по параметру гибридизации t_{pd}. Возникающие при этом операторы описывают перескоки дырки между ионами кислорода, непосредственно примыкающими к иону меди. Векторы δ и δ' независимо принимают четыре значения $\{\pm g_x/2, \pm g_y/2\}$, и соединяют ион меди на узле f с четырьмя ближайшими к нему узлами кислорода в позициях $f+\delta$. Функция $u_{\delta\delta'} = \vartheta(\delta)\vartheta(\delta')$, а $\vartheta(\delta)$ учитывает влияние соотношений между фазами медных и кислородных орбиталей на процессы гибридизации. Для обычно используемых орбиталей функция $\vartheta(\delta)$ при изменении δ принимает следующие значения: $\vartheta(\delta) = \mp 1$ при $\delta = \pm g_x/2$ или $\delta = \pm g_y/2$.

В четвертом слагаемом имеется оператор $\tilde{S}_f$, определенный в виде скалярного произведения векторного оператора спинового момента $\mathbf{S}_f$ на ионе меди в узле с индексом f и вектора $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z)$, составленного из матриц Паули: $\tilde{S}_f = \mathbf{S}_f\boldsymbol{\sigma}$. Поэтому в отличие от второго и третьего слагаемых, описывающих обычные перескоки дырок, четвертое слагаемое гамильтониана (1) учитывает такие перескоки, которые сопровождаются спин-флип процессами. При таких перескоках происходит коррелированное изменение проекции спина не только у дырки, но и у иона меди. Учет таких вкладов существенно сказывается на формировании структуры спин-поляронного спектра элементарных возбуждений.

Последнее слагаемое в (1) описывает обменное взаимодействие между спинами ионов меди. Интенсивность обменной связи между спинами, находящимися в узлах f и m определяется параметром I_{fm}. В дальнейшем мы ограничимся учетом взаимодействий спинов, находящихся в пределах двух координационных сфер:

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{exch}} = \frac{I_1}{2}\sum_{fg}\mathbf{S}_f\mathbf{S}_{f+g} + \frac{I_2}{2}\sum_{fd}\mathbf{S}_f\mathbf{S}_{f+d}. \qquad (2)$$

В этом выражении I_1 обозначает обменный интеграл для ближайших спинов, а I_2 $(d = \pm g_x \pm g_y)$ обменный интеграл между следующими за ближайшими спинами. Обменные константы удобно выразить через параметр фрустрации p и эффективный обмен I:

$$I_1 = (1-p)I, \quad I_2 = pI, \quad 0 \le p \le 1, \quad I > 0. \qquad (3)$$

Величина p может быть связана с концентрацией дырок на один атом меди x [25].

Подсистема локализованных на ионах меди спинов рассматривается в состоянии квантовой спиновой жидкости, которое обладает сферической симметрией в спиновом пространстве [29–31]. Это означает, что спиновые корреляционные функции $C_j = \langle\mathbf{S}_f\mathbf{S}_{f+r_j}\rangle$ удовлетворяют соотношениям:

$$C_j = 3\langle S_f^x S_{f+r_j}^x\rangle = 3\langle S_f^y S_{f+r_j}^y\rangle = 3\langle S_f^z S_{f+r_j}^z\rangle, \qquad (4)$$

где r_j – радиус j-й координационной сферы. Кроме того, $\langle S_f^\alpha\rangle = 0$, $(\alpha = x, y, z)$.

Для упрощения записи гамильтониана (1) и, соответственно, дальнейших расчетов, проведем унитарные преобразования фермиевских операторов: $c_l \to e^{-iQl}c_l$, где $Q = (\pi, \pi)$. В результате этого преобразования в выражении (1) в слагаемых, содержащих c-операторы возникают факторы $\exp\{iQ(l-l')\}$. Эти факторы компенсируют знаки, задаваемые функциями $\varrho(\rho)$ и $u_{\delta\delta'}$, и поэтому в дальнейшем отмеченные знаковые функции в выражении (1) можно опустить. Гамильтониан спин-фермионной модели после унитарного преобразования $c_l \to e^{-iQl}c_l$ принимает вид:

$$\hat{\mathcal{H}} = \varepsilon_p\sum_l c_l^+ c_l - t\sum_{l\rho} c_l^+ c_{l+\rho} + \\ + \tau\sum_{f\delta\delta'} c_{f+\delta}^+ c_{f+\delta'} + \frac{J}{4}\sum_{f\delta\delta'} c_{f+\delta}^+ \tilde{S}_f c_{f+\delta'} + \\ + \hat{\mathcal{H}}_{\text{exch}}. \qquad (5)$$

Для получения выражений, описывающих спектр и спектральную интенсивность как функций волнового вектора k для непреобразованного гамильтониана, достаточно в конце вычислений провести сдвижку: $k \to k + Q$.

Ниже используются следующие общепринятые значения параметров: $t_{pd} = 1.3$ эВ, $\Delta_{pd} = 3.6$ эВ, $U_d = 10.5$ эВ, $I = 0.13$ эВ [32–34]. При этом $\tau = 0.11$ эВ, а $J = 2.86$ эВ. Величина интеграла туннелирования t является в данной теории подгоночным параметром и будет подбирается из сравнения с экспериментом [35] в $La_{2-x}Sr_xCuO_4$.

3. Фермионные состояния в режиме сильной связи. Для обоснования спин-поляронной природы фермиевских квазичастиц, возникающих в CuO_2-плоскости при слабом допировании, рассмотрим на основе вариационного метода решение уравнения Шредингера для одной дырки. Учтем, что в соответствие с теоремой Мермина–Вагнера [36] без легирования при сколь угодно малой температуре 2D-подсистема локализованных спиновых моментов находится в состоянии $|G\rangle$ без дальнего магнитного порядка. При антиферромагнитном типе обменного взаимодействия это состояние характеризуется свойствами [37]:

$$\mathbf{S}_{\rm tot}^2|G\rangle = 0|G\rangle,\ \langle G|S_f^{x,y,z}|G\rangle = 0,\ \mathbf{S}_{\rm tot} = \sum_f \mathbf{S}_f. \quad (6)$$

Предположение о синглетном характере состояния рассматриваемой 2D-системы при конечной температуре связано с результатом работы [38], в которой математически строго показывается, что основное состояние системы сколь угодно большого, но конечного числа локализованных спинов, находящихся в узлах квадратной решетки и антиферромагнитным образом взаимодействующих между собой, является синглетным (теорема Маршалла).

Принимая во внимание симметрийные свойства гамильтониана, получим, что для каждого неприводимого представления группы трансляций k состояние с одной дыркой $|\psi_{k\sigma}\rangle$ с проекцией спинового момента σ может быть записано в виде:

$$|\psi_{k\sigma}\rangle = \sum_j \alpha_{jk} A_{jk\sigma}^+ |G\rangle, \quad (7)$$

где операторы $A_{jk\sigma}^+$ представляют собой как обычные операторы рождения дырки в кислородной подсистеме, так и комбинации произведений оператора рождения дырки на операторы, относящиеся к локализованной подсистеме (см. ниже).

Из условия стационарности функционала энергии при дополнительном условии $\langle\psi_{k\sigma}|\psi_{k\sigma}\rangle = 1$, применяя метод Лагранжа, получим, что энергии возбуждений $\varepsilon_k = E_k - E_G$ (E_k и E_G – энергии состояний $|\psi_{k\sigma}\rangle$ и $|G\rangle$, соответственно) и коэффициенты α_{jk} определяются системой линейных однородных уравнений:

$$\sum_j \left[D_{ij}(k) - \varepsilon_k K_{ij}(k)\right]\alpha_{jk} = 0, \quad (8)$$

где

$$D_{ij}(k) = \langle G|\{[A_{ik\sigma}, \hat{\mathcal{H}}]_-, A_{jk\sigma}^+\}|G\rangle, \quad (9)$$

$$K_{ij}(k) = \langle G|\{A_{ik\sigma}, A_{jk\sigma}^+\}|G\rangle. \quad (10)$$

Численные расчеты показывают, что оптимальное (с точки зрения достижения наименьшей энергии при минимальном наборе базисных операторов) описание состояний однодырочного сектора достигается, если ограничиться тремя семействами операторов:

$$A_{1(2)f\sigma} \equiv c_{f+\frac{g_{x(y)}}{2},\sigma},\ A_{3f\sigma} = \frac{1}{2}\sum_\delta \left(\tilde{S}_f c_{f+\delta}\right)_\sigma, \quad (11)$$

используемых для построения операторов в квазиимпульсном представлении

$$A_{jk\sigma} = N^{-1/2}\sum_f e^{-ikf} A_{jf\sigma},\ (j = 1,2,3). \quad (12)$$

Операторы (12) для каждого k и σ определяют три состояния: $A_{jk\sigma}^+|G\rangle$ ($j = 1,2,3$). Ортогональность этих состояний легко установить, учитывая условия (6): $\langle G|A_{ik\sigma}A_{jq\sigma'}^+|G\rangle = \delta_{ij}\delta_{kq}\delta_{\sigma\sigma'}K_{jj}(k)$.

Вычисляя матричные элементы (9) и (10), получаем ($K_{ij} = \delta_{ij}K_{ii}$):

$$K_{11}(k) = K_{22}(k) = 1,\ K_{33}(k) = \frac{3}{4} + C_1\gamma_1(k), \quad (13)$$

$$\begin{gathered} D_{11(22)} = \varepsilon_p + 2\tau\left(1 + \cos k_{x(y)}\right), \\ D_{12} = D_{21}^* = (\tau - t)\left(1 + e^{ik_x}\right)\left(1 + e^{-ik_y}\right), \\ D_{1(2),3} = D_{3,1(2)}^* = \frac{J}{2}K_{33}\left(1 + e^{ik_{x(y)}}\right), \\ D_{33} = (\varepsilon_p - 2t + 5\tau - J)K_{33} + \\ + 2(\tau - t)(C_1\gamma_{1k} + C_2\gamma_{2k}) + \\ + \tau(C_1\gamma_{1k} + C_3\gamma_{3k}) + JC_1(1/4 - \gamma_{1k}) + \\ + I_1C_1(\gamma_{1k} - 4) - 4I_2C_2. \end{gathered} \quad (14)$$

В этих выражениях γ_{jk} ($j = 1,2,3$) – инварианты квадратной решетки: $\gamma_{1k} = (\cos k_x + \cos k_y)/2$, $\gamma_{2k} = \cos k_x \cos k_y$, $\gamma_{3k} = (\cos 2k_x + \cos 2k_y)/2$.

Спиновые корреляторы C_1, C_2 и C_3 в формулах (13) и (14) определены аналогично (4), с той лишь разницей, что усреднение спиновых операторов, производится не по термодинамическому ансамблю, а по состоянию $|G\rangle$: $C_j = \langle G|\mathbf{S}_f\mathbf{S}_{f+r_j}|G\rangle$. Выбор значений корреляторов C_j обсуждается подробно в разделе 4.

Представленные на рис. 1, 2 результаты численных расчетов демонстрируют важность учета взаимодействия между спиновыми и зарядовыми степенями свободы, а также спин-поляронный характер нижней ветви спектра однодырочных состояний. На рис. 1a для значений квазиимпульсов, находящихся на главной диагонали зоны Бриллюэна, показан энергетический спектр однодырочных состояний, получающийся при использовании только двух операторов $A_{1k\sigma}$ и $A_{2k\sigma}$. Фактически эти ветви описывают спектр дырок, не взаимодействующих с подсистемой спиновых моментов ионов меди.

Добавление в вариационную процедуру третьего оператора $A_{3k\sigma}$ приводит к важным качественным

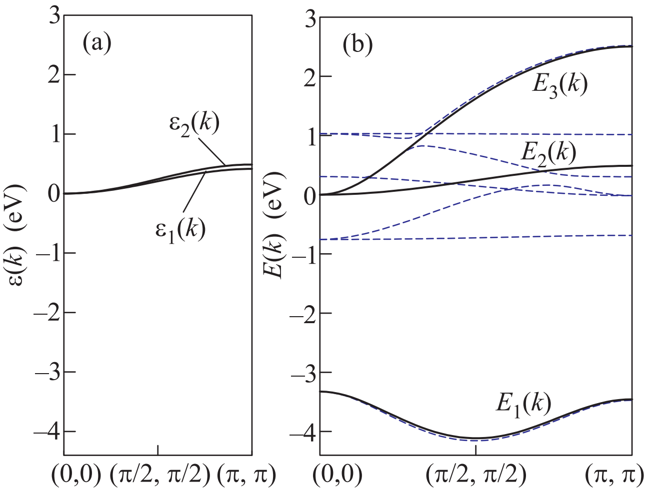

Рис. 1. (Цветной онлайн) Зависимости энергий однодырочных состояний от значений квазиимпульса вдоль главной диагонали зоны Бриллюэна для параметров: $\tau = 0.11$ эВ, $J = 2.86$ эВ, $t = 0.1$ эВ, $I = 0.2\tau$. Спиновые корреляторы равны: $C_1 = -0.255$, $C_2 = 0.075$, $C_3 = 0.064$. (a) – Энергетический спектр $\varepsilon_j(k)$, полученный при учете двух операторов $A_{1k\sigma}$, $A_{2k\sigma}$. (b) – Энергии однодырочных состояний $E_j(k)$, рассчитанные в базисе трех операторов (11) — сплошные линии, и в базисе восьми операторов (15) — штриховые линии. Нижние ветви спектра, совпадающие для обоих базисов (11) и (15), соответствуют спин-поляронным состояниям

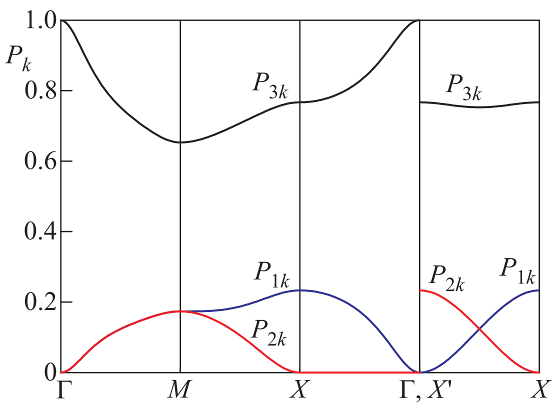

Рис. 2. (Цветной онлайн) Парциальные вклады базисных состояний в однодырочное состояние, соответствующее нижней ветви спектра рис. 1b. Значения параметров модели, использованные при расчетах данных графиков, выбирались такими же, как и при построении кривых на рис. 1. При этом: $\Gamma = (0,0)$, $M = (\pi,\pi)$, $X = (0,\pi)$, $X' = (\pi,0)$

изменениям. Это видно из спектра однодырочных состояний, полученного в базисе трех операторов и показанного на рис. 1b сплошными линиями. Главное отличие связано с появлением отщепленной ветви с минимумом в точке, близкой к $(\pi/2,\pi/2)$. Понижение энергии таких однодырочных состояний обусловлено слагаемым гамильтониана $\sim J$, описывающим как обменное взаимодействие между дыркой и ближайшими ионами меди, так и спин-коррелированные перескоки. Включение в базис операторов, явно учитывающих эту сильную спин-фермионную корреляцию и обеспечивает значительный выигрыш в энергии. При этом происходит также и ренормировка двух затравочных ветвей спектра.

Физическая причина появления спин-поляронных состояний аналогична возникновению состояний спинового полярона в точно решаемой задаче об одном электроне с перевернутым спином в ферромагнитной матрице при антиферромагнитном типе s–d-обменной связи между спином электрона и локализованным спиновым моментом [39].

При изменении квазиимпульса в других направлениях зоны Бриллюэна отмеченные качественные модификации энергетического спектра однодырочных состояний сохраняются.

Важно отметить, что эффект отщепления нижней спин-поляронной зоны сохраняется при увеличении числа базисных операторов. Для демонстрации данного утверждения на рис. 1b приведены результаты вариационного вычисления фермиевского спектра в рамках базиса, состоящего из восьми операторов:

$$\tilde{A}_{jk} = N^{-1/2}\sum_f e^{-ikf}\tilde{A}_{jf}, \qquad (j = 1,\dots,8), \qquad (15)$$

где:

$$\tilde{A}_{1(2)f} = c_{f+\frac{g_{x(y)}}{2}}, \quad \tilde{A}_{3(4)f} = \tilde{S}_f c_{f+\frac{g_{x(y)}}{2}},$$
$$\tilde{A}_{5(6)f} = \tilde{S}_f c_{f-\frac{g_{x(y)}}{2}}, \quad \tilde{A}_{7(8)f} = \mathbf{S}_f\mathbf{S}_{f+g_{x(y)}} c_{f+\frac{g_{x(y)}}{2}}.$$

Первые два оператора этого базиса совпадают с соответствующими операторами базиса (11). Каждый из четырех операторов $\tilde{A}_{jk}$ с $j = 3,\dots,6$ описывает корреляцию локализованного спина с дыркой, локализованной на одном из четырех ближайших к этому спину ионе кислорода. Последние два оператора $\tilde{A}_{7k}$ и $\tilde{A}_{8k}$ описывают корреляцию дырки на ионе кислорода сразу с двумя спинами на ближайших к ней ионах меди. Результаты вычисления восьми ветвей фермиевского спектра представлены на рис. 1b посредством штриховых линий. Существенно, что дисперсионная зависимость нижней ветви спин-поляронного спектра практически не изменилась. Следовательно, базис из трех операторов (11) достаточен для описания низкоэнергетической части спектра фермиевских квазичастиц с высокой точностью.

Поскольку в актуальном для купратных ВТСП режиме слабого легирования химпотенциал всегда лежит в нижней спин-поляронной зоне, то задача о получении аналитического выражения для закона дисперсии $E_1(k)$ этой зоны имеет важное значение. Для решения данной задачи воспользуемся дисперсионным уравнением

$$\det_k(\omega) = |D(k) - \omega K(k)| = 0, \tag{16}$$

корни которого определяют такие значения частоты ω, при которых решения α_{jk} системы уравнений (8) являются нетривиальными. Раскрывая детерминант в (16), приходим к выражению:

$$\det_k(\omega) = (\omega - \varepsilon_p)^3 - Q_k\,(\omega - \varepsilon_p)^2 + \\ + B_k\,(\omega - \varepsilon_p) + R_k = 0, \tag{17}$$

в котором введены следующие обозначения:

$$Q_k = 4\tau(1+\gamma_{1k}) + \Lambda_k,$$
$$B_k = \left(4\tau\Lambda_k - J^2K_{33}\right)(1+\gamma_{1k}) + 4t\,(2\tau - t)\,\chi_k,$$
$$R_k = 4t\chi_k\left[J^2K_{33}/2 - \Lambda_k(2\tau - t)\right],$$
$$\Lambda_k = \frac{D_{33}}{K_{33}} - \varepsilon_p, \quad \chi_k = 1 + 2\gamma_{1k} + \gamma_{2k}. \tag{18}$$

Для используемого набора параметров нетрудно получить приближенные решения дисперсионного уравнения (17), описывающие спектральные зависимости $E_j(k)$ $(j = 1,2,3)$ однодырочных состояний с высокой точностью. При этом спин-поляронный спектр определяется выражением:

$$E_1(k) = \varepsilon_p + x_k,\ x_k = \frac{Q_k}{2} - \sqrt{\frac{Q_k^2}{4} - B_k - \frac{R_k}{x_{k0}}}, \tag{19}$$

где $x_{k0} = Q_k/2 - \sqrt{Q_k^2/4 - B_k}$. Для двух верхних ветвей $E_2(k)$ и $E_3(k)$ на рис. 1b получаем:

$$E_{\substack{2\\3}}(k) = \varepsilon_p + \frac{Q_k - x_k}{2} \mp \sqrt{(Q_k - x_k)^2/4 + R_k/x_k}. \tag{20}$$

Остановимся на структуре однодырочного состояния, которому соответствует нижняя ветвь спектра $E_1(k)$ на рис. 1b. Весовые вклады P_{1k} и P_{2k} затравочных дырочных состояний $A^+_{1k\sigma}|G\rangle$ и $A^+_{2k\sigma}|G\rangle$ определяются выражениями $P_{1k} = |\alpha_{1k}|^2$, $P_{2k} = |\alpha_{2k}|^2$. Для весового вклада P_{3k} спин-поляронного базисного состояния получаем: $P_{3k} = K_{33}|\alpha_{3k}|^2$.

На рис. 2 показаны значения введенных парциальных вкладов для квазиимпульсов, лежащих на четырех направлениях зоны Бриллюэна. Видно, что значения P_{3k} (верхние кривые) в несколько раз превышают значения P_{1k} и P_{2k}. Это доказывает спин-поляронную природу однодырочного состояния, соответствующего нижней отщепленной ветви спектра.

4. Эволюция ферми-поверхности в LSCO при легировании. В предыдущем разделе построение спектра фермиевской квазичастицы, при учете сильной связи между подсистемой локализованных спинов ионов меди и спином кислородной дырки, было проведено на основе вариационного метода. При этом фактически рассматривалась только одна дырка. В случае конечного числа дырок спектр фермиевских возбуждений удобно вычислять, используя проекционный метод Цванцига–Мори [26, 27], который в комбинации с формализмом запаздывающих функций Грина дает возможность также рассчитывать необходимые термодинамические средние и, как будет показано ниже, позволит описать куперовскую неустойчивость в ансамбле спиновых поляронов.

В рамках проекционного метода выбирается минимальный базис из n операторов A_{jf} $(j = 1,\ldots,n)$, который, как предполагается, достаточен для адекватного описания квазичастичного возбуждения в системе. Далее вводятся двухвременные запаздывающие функции Грина $(i,j = 1,\ldots,n)$:

$$G_{ij}(k,t) = \langle\langle A_{ik}(t)|A^+_{jk}(0)\rangle\rangle = -i\theta(t)\langle[A_{ik}(t), A^+_{jk}(0)]\rangle,$$

где оператор A_{jk} связан с оператором A_{jf} посредством соотношения (12). Уравнения движения для фурье-образов введенных функций Грина имеют вид:

$$\omega\langle\langle A_{ik}|A^+_{jk}\rangle\rangle_\omega = K_{ij}(k) + \langle\langle[A_{ik}, \hat{\mathcal{H}}\,]|A^+_{jk}\rangle\rangle_\omega, \tag{21}$$

где

$$K_{ij}(k) = \langle\{A_{ik}, A^+_{jk}\}\rangle. \tag{22}$$

Проектируя коммутатор $[A_{ik}, \hat{\mathcal{H}}]$ на выбранный базис операторов, получаем:

$$[A_{ik}, \hat{\mathcal{H}}] = \sum_l L_{i,l}(k)A_{lk}, \tag{23}$$

где $L(k) = D(k)K(k)^{-1}$ и

$$D_{ij}(k) = \langle\{[A_{ik}, \hat{\mathcal{H}}], A^+_{jk}\}\rangle. \tag{24}$$

Заметим, что в определениях (22) и (24) элементов матриц $D(k)$ и $K(k)$ угловые скобки означают термодинамическое усреднение по ансамблю Гиббса, тогда как в определениях (9) и (10) аналогичных матриц усреднение производится по основному состоянию системы $|G\rangle$. Оказывается, однако, что в режиме малой плотности результаты расчетов матричных элементов $D(k)$ и $K(k)$ при обоих способах определения совпадают и даются выражениями (13) и (14). В дальнейшем мы будем считать, что элементы матриц $D(k)$ и $K(k)$ определены согласно формулам (22) и (24).

Подставляя (23) в уравнения движения (21), получаем замкнутую систему уравнений для нахождения функций Грина. В матричной форме эта система имеет вид:

$$\left(\omega \cdot \hat{I} - D(k)K(k)^{-1}\right) G(k,\omega) = K(k), \qquad (25)$$

где $\hat{I}$ – единичная матрица.

Спектр квазичастиц определяется полюсами функции Грина $G(k)$ и может быть вычислен из дисперсионного уравнения:

$$\det |\omega \cdot K(k) - D(k)| = 0. \qquad (26)$$

В частности, если в качестве базисных операторов выбрать операторы (11), то уравнение (26) совпадет с дисперсионным уравнением (17).

В данном разделе, используя проекционный метод, мы продемонстрируем эффективность спин-поляронного подхода, описав на его основе экспериментальные результаты работы [35]. В этой работе представлены ARPES-исследования и детальный анализ трансформации ПФ при легировании в $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ (LSCO). Исследовалась область концентраций от $x = 0.03$, при которой LSCO является недодопированным изолятором, до $x = 0.3$, когда LSCO переходит в состояние нормального металла. Для характеристики ПФ авторы [35] ввели импульс Ферми k_F, равный расстоянию от точки $\Gamma = (0,0)$ зоны Бриллюэна до точки пересечения ПФ с нодальной линией. Авторы определили x-зависимость для k_F и продемонстрировали трансформацию топологии ПФ с электронной на дырочную при переходе через критическое значение уровня допирования.

В данном параграфе для простоты будем считать, что величина кулоновского отталкивания $U_d = \infty$. При этом условии в гамильтониане спин-фермионной модели (5): $\tau = 0.23$ эВ, а $J = 1.88$ эВ. В качестве базисных выберем три оператора (11). Функции Грина, получаемые в результате решения системы (25), можно представить в виде:

$$G_{ij}(k,\omega) = \sum_{n=1}^{3} \frac{z^n_{(i,j)}(k)}{\omega - E_n(k)}, \quad i,j = 1,2,3. \qquad (27)$$

Как отмечалось выше, для купратных ВТСП актуальной является только нижняя поляронная зона с дисперсией $E_{n=1}(k)$, изображенной на рис. 1b нижний кривой. Две другие зоны с $n = 2$ и $n = 3$ отделены от $E_1(k)$ значительной энергетической щелью.

Существенный момент используемого подхода состоит в том, что корреляционные функции C_1, C_2 и C_3 (определяющие матричные элементы K_{ij} и D_{ij}, согласно формулам (13) и (14)), а также щель $\Delta_Q(p)$ в спектре магнитных возбуждений в окрестности точки Q зоны Бриллюэна находятся совместно в рамках сферически симметричного самосогласованного подхода для фрустрированного антиферромагнетика [29–31, 37]. При этом Δ_Q линейно связана с обратной магнитной корреляционной длиной ξ^{-1}. С другой стороны, согласно данным по нейтронному рассеянию и ядерному магнитному резонансу (см., например, [40, 41]), ξ^{-1} определяется допированием x и для LSCO растет в несколько раз с увеличением x в интервале $0.03 \div 0.3$. В соответствии с этим принятые нами значения фрустраций (см. табл. 1) отвечают случаю, когда спиновая щель увеличивается в 2.5 раза при увеличении $p = 0.15$ до $p = 0.3$.

В табл. 1 представлены рассчитанные, согласно упомянутой методике, спиновые корреляторы для пяти параметров фрустрации p, которые мы соотносим пяти значениям допирования x.

Таблица 1. Значения допирования x и соответствующие им значения параметра фрустрации p и спиновых корреляционных функций

x	p	C_1	C_2	C_3
0.03	0.15	−0.287	0.124	0.0950
0.07	0.21	−0.255	0.075	0.0640
0.15	0.25	−0.231	0.036	0.0510
0.22	0.275	−0.214	0.009	0.0450
0.30	0.30	−0.194	−0.0222	0.0457

Для LSCO энергию Ферми можно определить из условия равенства числа голых дырок n_h уровню легирования x. Число n_h при интересующих нас малых значениях x равно проинтегрированной по зоне Бриллюэна и просуммированной по σ спектральной плотности: $n_{h,\sigma}(k) = z^1_{(1,1)}(k) + z^1_{(2,2)}(k)$.

Рис. 3 дает представление о распределении значений спектральной плотности по зоне Бриллюэна. В Г-точке $n_{h,\sigma}(k) = 0$, но при отходе от этой точки, спектральный вес быстро нарастает и при приближении к антинодальной $X - X$-линии выходит на насыщение.

Для демонстрации формирования области плоской зоны в окрестности X-точек k-пространства на рис. 4 приводится нижняя спин-поляронная зона с помощью линий уровня $E_1(k) = \text{const}$, рассчитанных при значении $x = 0.15$. Факт существования плоской зоны в этой области установлен во многих работах [42–48] и, в частности, наблюдался в

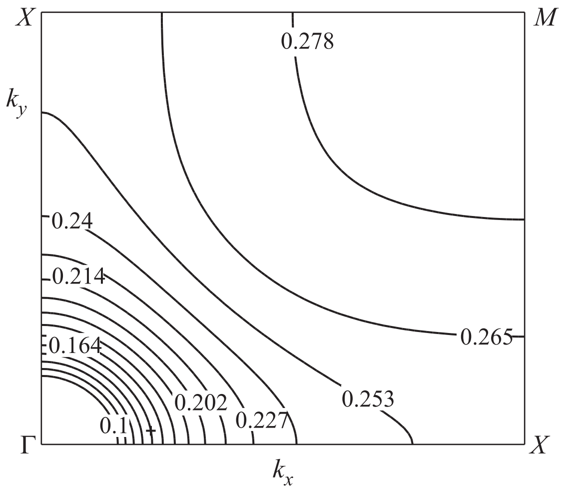

Рис. 3. Линии постоянных значений спектральной плотности голой дырки $n_{h,\sigma}(k)$ для нижней поляронной зоны в первой четверти k-пространства при величине допирования $x = 0.15$. Числами указаны значения $n_{h,\sigma}(k)$

работе [35] при $x \leq 0.15$. Данные, представленные на рис. 4, позволяют оценить значение эффективной массы спин-поляронных квазичастиц, которая, как легко видеть, сильно анизотропна. Так, в нодальном направлении ($\Gamma{-}M$) вычисления приводят к значению массы $m_{\Gamma-M} = 1.25m_e$, где m_e – масса свободного электрона. В тоже время в антинодальном ($X{-}X$)-направлении: $m_{X-X} = 9.4m_e$.

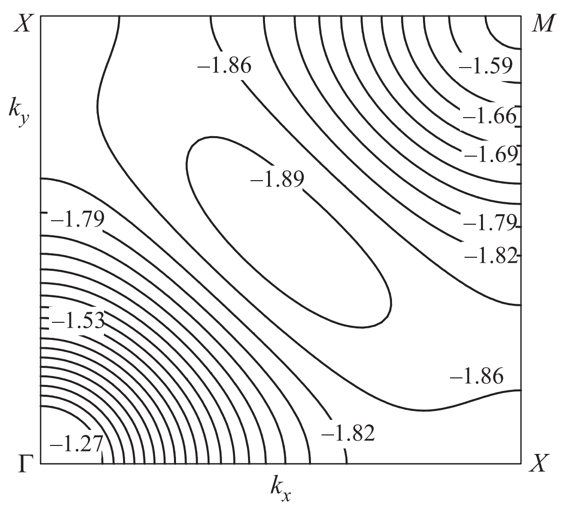

Рис. 4. Линии постоянных значений энергии в нижней поляронной зоне $E_1(k) = \text{const}$ в первой четверти k-пространства при величине допирования $x = 0.15$. Числами на рисунке указаны значения $E_1(k)$ в эВ

Представленные на рис. 3, 4 контуры $n_{h,\sigma}(k) = \text{const}$ и $E_1(k) = \text{const}$ рассчитывалась при значении параметра прямых кислород-кислородных перескоков $t = 0.094$ эВ. Этот единственный подгоночный параметр подбирался из требования согласования топологии ПФ с экспериментальными данными ARPES-измерений в [35]. При этом, важно отметить, что одно и тоже значение t использовалось для описания ПФ при всех пяти, приведенных в табл. 1, уровнях допирования x.

Рассчитанные, совместно со спиновыми корреляторами, ПФ для указанных пяти значений x, представлены на рис. 5. Видно, что, как и в эксперименте, наблюдается смена топологии ПФ с электронного типа на дырочный при увеличении x.

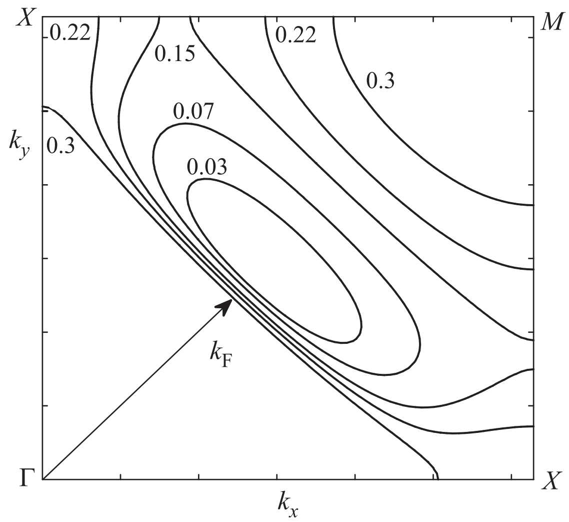

Рис. 5. Поверхности Ферми в первом квадранте зоны Бриллюэна для пяти значений допирования. Степень допирования x указана рядом с соответствующим Ферми контуром

Сравнение концентрационных зависимостей k_F, рассчитанных теоретически и измеренных экспериментально в [35], приводится на рис. 6. Видно, что слабая экспериментальная зависимость k_F от x хорошо воспроизводится в рамках предложенной спин-поляронной теории: максимальное расхождение между экспериментальными и теоретическими значениями k_F не превышает четырех процентов.

5. Уравнения самосогласования для сверхпроводящей фазы. Построение теории сверхпроводящего состояния в системе кислородных дырок, сильно связанных с подсистемой локализованных спиновых моментов ионов меди, в рамках спин-поляронного подхода впервые было проведено в работе [49]. Для этого потребовалось выполнить такое расширение базисного набора операторов, которое позволило ввести аномальные средние.

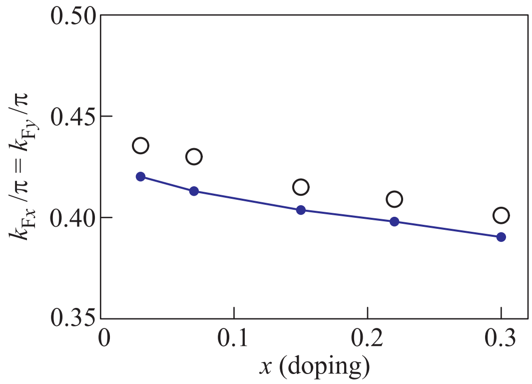

Рис. 6. (Цветной онлайн) Зависимость импульса Ферми k_F от степени легирования x. Сплошная линия соединяет рассчитанные в рамках спин-поляронного подхода значения k_F. Светлыми кружками обозначены, представленные в [35] экспериментальные значения k_F

Принимая во внимание результаты, представленные в предыдущих разделах, нетрудно видеть, что для получения уравнений самосогласования на аномальные средние необходимо к, использованным ранее трем операторам $A_{1k\sigma}$, $A_{2k\sigma}$ и $A_{3k\sigma}$ базиса (12) добавить три оператора:

$$A_{4k\sigma} = A^{+}_{1,-k,\bar{\sigma}},\ A_{5k\sigma} = A^{+}_{2,-k,\bar{\sigma}},\ A_{6k\sigma} = A^{+}_{3,-k,\bar{\sigma}}. \quad (28)$$

При использовании базиса шести операторов (12) и (28) в рамках проекционного метода, система уравнений движения для функций Грина (25) и дисперсионное уравнение (26) теперь имеют шестой порядок ($n = 6$).

В отличие от предыдущего раздела здесь мы откажемся от упрощающего условия $U_d = \infty$ и проведем рассмотрение при $U_d = 10.5$ эВ [32]. Очевидно, что матричные элементы $K_{ij}(k)$ и $D_{ij}(k)$ с индексами $i, j = 1, \ldots, 3$ совпадают с вычисленными ранее (см. выражения (13) и (14)). Матрица $K(k)$ по прежнему диагональна, а ее диагональные элементы связаны условием: $K_{j+3,j+3}(k) = K_{jj}(k)$ ($j = 1, \ldots, 3$). Матрицу $D(k)$ удобно описывать в блочном представлении. Левый верхний блок размером 3×3 составляется только из нормальных средних $D_{ij}(k)$ ($i, j = 1, 2, 3$). Правый нижний блок формируется из величин $D_{ij}(k)$ с $i, j = 4, 5, 6$. При этом $D_{i+3,j+3}(k) = -D_{ij}(k)$ для всех $i, j = 1, 2, 3$.

Матричные элементы правого верхнего блока $D(k)$ формируются в результате учета аномальных спариваний. В рассматриваемом случае в этом блоке не равен нулю только один элемент $D_{36}(k)$. Из условия эрмитовости следует, что в левом нижнем блоке $D(k)$ отличен от нуля только элемент $D_{63}(k)$, совпадающий с $D_{36}(k)$.

С учетом сказанного дисперсионное уравнение (26) в сверхпроводящей фазе можно записать в виде:

$$\det_k(\omega)\det_k(-\omega) + \varphi_k(\omega)\varphi_k(-\omega)\left|\frac{D_{36}(k)}{K_{33}(k)}\right|^2 = 0, \quad (29)$$

где

$$\varphi_k(\omega) = (\omega + \varepsilon_p)^2 + 4\tau(1 + \gamma_{1k})(\omega + \varepsilon_p) + \\ + 4t(2\tau - t)\chi(k). \quad (30)$$

В нормальной фазе $D_{36}(k) = 0$ и уравнение (29) переходит в уравнение (17).

Аномальное среднее $D_{36}(k)$ выражается через сумму большого числа слагаемых, которые могут давать решения интегрального уравнения самосогласования с различным типом симметрии сверхпроводящего параметра порядка (СПП). В частности, слагаемые, пропорциональные параметру J, приводят к s-волновому спариванию. Имея ввиду экспериментальные данные, ограничимся рассмотрением только d-типа СПП. В этом случае для $D_{36}(k)$ можно использовать усеченное выражение:

$$D_{36}(k) = I_1 \sum_{\delta} e^{ik2\delta}\Big[-\langle A^{+}_{6f\sigma}A_{3,f+2\delta,\sigma}\rangle + \\ + \frac{C_1}{4}\sum_{\delta'\delta_1}\langle c_{f+2\delta+\delta_1,\bar{\sigma}}\ c_{f+\delta',\sigma}\rangle\Big]. \quad (31)$$

При получении выражения (31) для средних от произведений операторов, не сводящихся к базисным, было применено соотношение

$$\langle\left(\tilde{S}_f c_l\right)_{\bar{\sigma}}\left(\tilde{S}_g c_{l'}\right)_{\sigma}\rangle = 2\langle(\mathbf{S}_f\mathbf{S}_g)\, c_{l\sigma}c_{l'\bar{\sigma}}\rangle - \\ - \langle\left(\tilde{S}_f c_{l'}\right)_{\bar{\sigma}}\left(\tilde{S}_g c_l\right)_{\sigma}\rangle, \quad (32)$$

справедливое в SU(2) – инвариантной фазе, и позволяющее выразить данное среднее через среднее от базисных операторов. Только при использовании этого соотношения в выражении (31) возникает аномальное среднее $\langle A^{+}_{6f\sigma}A_{3,f+2\delta,\sigma}\rangle$, играющее, как показывают численные расчеты, решающую роль в реализации d-волновой сверхпроводимости в ансамбле спин-поляронных квазичастиц. Для термодинамических средних, содержащих скалярное произведение, спиновых операторов была применена процедура расцепления. Этим объясняется появление магнитного коррелятора C_1 перед вторым слагаемым в правой части выражения (31).

Из уравнения (31) получаем, что $D_{36}(k)$ может быть представлено в виде

$$D_{36}(k) = \Delta_0(\cos k_x - \cos k_y). \quad (33)$$

Амплитуда сверхпроводящего параметра порядка Δ_0 находится из уравнения:

$$1 = \frac{I_1}{N}\sum_k \frac{(\cos k_x - \cos k_y)^2 \tanh\left(\frac{E_k}{2T}\right)}{2E_k\left(E_k^2 - E_2^2(k)\right)\left(E_k^2 - E_3^2(k)\right)} \times \\ \times \left[\varphi_k(E_k)\varphi_k(-E_k) - C_1 J^2 \Psi_k(E_k)\Psi_k(-E_k)\right], \quad (34)$$

где

$$\Psi_k(\omega) = (\omega - \varepsilon_p)(1 + \gamma_{1k}) - 2t\chi_k, \quad (35)$$

а E_k – спектр фермиевских возбуждений в сверхпроводящей фазе:

$$E_k = \sqrt{E_1^2(k) + b_k^2 D_{36}^2(k)}. \quad (36)$$

Функция b_k^2 в формуле для спектра E_k определена выражением:

$$b_k^2 = \frac{1}{K_{33}^2} \cdot \frac{\varphi_k(E_1(k))\varphi_k(-E_1(k))}{\left(E_1^2(k) - E_2^2(k)\right)\left(E_1^2(k) - E_3^2(k)\right)}. \quad (37)$$

Самосогласованные расчеты показывают, что b_k^2 мало отличается от единицы практически во всей зоне Бриллюэна.

Из (36) следует, что в сверхпроводящей фазе спектр фермиевских возбуждений формируется на основе спектра спин-поляронных состояний. Соответственно этому, можно утверждать, что исследуемая куперовская неустойчивость отвечает неустойчивости именно спин-поляронного ансамбля.

Уравнение для определения химпотенциала μ в сверхпроводящей фазе, согласно спектральной теореме получаем в виде:

$$\frac{x}{4} = \frac{1}{N}\sum_k \frac{\mathcal{J}_k(E_k) f(E_k/T) - \mathcal{J}_k(-E_k) f(-E_k/T)}{2E_k\left(E_k^2 - E_2^2(k)\right)\left(E_k^2 - E_3^2(k)\right)}, \quad (38)$$

где функция $\mathcal{J}_k(\omega)$ определяется выражением

$$\mathcal{J}_k(\omega) = \left(-\omega + \varepsilon_p + 2\tau(1 + \gamma_{1k})\right)\varphi_k(\omega)\frac{|D_{36}(k)|^2}{K_{33}(k)} - \\ - \left[\left(\omega - \varepsilon_p - 2\tau(1 + \gamma_{1k})\right)\left(\omega - D_{33}(k)/K_{33}(k)\right) - \\ - (J^2/2)K_{33}(k)(1 + \gamma_{1k})\right]\mathrm{det}_k(-\omega), \quad (39)$$

а $f(z) = 1/(\exp(z) + 1)$ – функция Ферми–Дирака.

6. Влияние легирования на куперовскую неустойчивость спин-поляронного ансамбля. Расчет концентрационной зависимости критической температуры перехода в сверхпроводящую фазу с d-типом симметрии параметра порядка осуществлялся на основе решения уравнения (34) совместно с уравнением на химпотенциал (38).

При проведении численных расчетов, как и ранее учитывалось, что K_{ij} и D_{ij} зависят от спиновых корреляционных функций C_j (4) для первых трех координационных сфер: $j = 1, 2, 3$. Эти корреляционные функции определялись самосогласованно в соответствии с методикой, изложенной в разделе 4. Изменение концентрации дырок x учитывалось через модификацию спиновых корреляторов C_j, через движение химического потенциала μ, а также через ренормировку параметра $I_1 = I(1 - p)$, выступающего в качестве константы связи (см. формулу (34)).

Величина обменного интеграла I определялась по формуле $T_N = \pi I/(\log(I/\sqrt{KK'}) + 3.5)$, полученной в работе [50] при изучении двухслойной системы $YBa_2Cu_3O_{6+x}$. K – обменный интеграл между ионами из ближайших плоскостей, K' – между ионами из плоскостей в примыкающих ячейках. Учитывая слабую зависимость I от стоящих под логарифмом констант K и K', являющихся величинами порядка $10^{-2} \div 10^{-3}$ эВ, для температуры Нееля $T_N = 400\,K$ [51] получаем: $I \approx 0.1$ эВ (или $I = 0.2\tau$), что хорошо согласуется с имеющимися экспериментальными данными. Рассчитанная для данного значения I, зависимость критической температуры от допирования представлена на рис. 7. Видно, что знаменитый сверхпроводящий купол хорошо воспроизводится как по величине T_c, так и по интервалу допирования x.

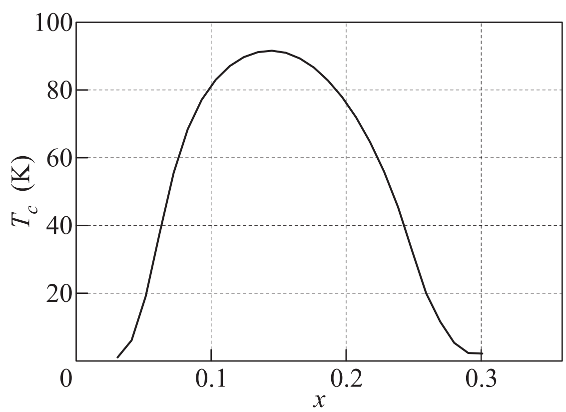

Рис. 7. Концентрационная зависимость температуры перехода в сверхпроводящую фазу с d-типом симметрии СПП. Параметры модели, использованные при расчете данной кривой, выбирались такими же, как и при построении дисперсионных кривых на рис. 1

Заметим, что при построении фазовой диаграммы на рис. 7 значение интеграла туннелирования между ближайшими ионами кислорода t было выбрано, равным 0.1 эВ, т.е. таким же, как и при описании эволюции ПФ в разделе 4. В разделе 4 выбор значения t диктовался подгонкой экспериментальных и теоретических ПФ и зависимостей $k_F(x)$. Здесь же, как показывают самосогласованные расчеты, величина интеграла t существенно влияет на положение левой границы сверхпроводящего купола, отвечающей малым уровням легирования x_c. Оказалось, что экспериментальное значение $x_c \simeq 0.05$ достигается как раз при $t = 0.1$ эВ. Таким образом, сравнение экспериментальных данных с результатами расчетов в спин-поляронном подходе, как в нормальной, так и в сверхпроводящей фазе, приводит к одному и тому же значению $t = 0.1$ эВ. Это существенно отличается от часто используемых значений $t = 0.4 - 0.6$ эВ [32–34, 52].

Рисунок 8 демонстрирует изменение щели в спектре элементарных возбуждений спин-поляронных квазичастиц на контуре Ферми в сверхпроводящей фазе. Видно, что зависимость щели от квазиимпульса в первой зоне Бриллюэна характеризуется d-симметрией.

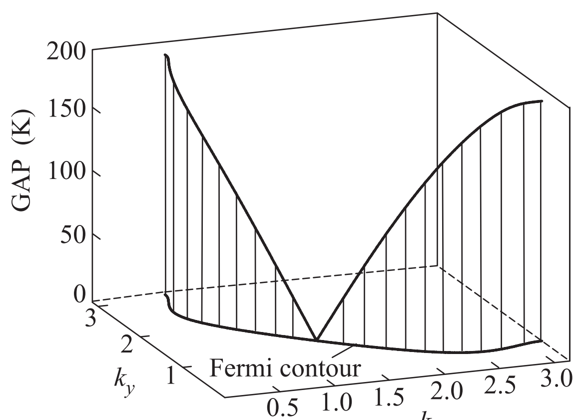

Рис. 8. Зависимость сверхпроводящей щели от квазиимпульса на контуре Ферми. Контур Ферми изображен сплошной линией в горизонтальной плоскости. Расчет выполнен при $x = 0.125$ и $T = 0$. Остальные параметры модели выбирались такими же, как и на рис. 1

На рис. 9 для установления взаимосвязи представлены концентрационные зависимости параметра порядка $|D_{36}(k)|$ и критической температуры T_c. Обращение в ноль амплитуды параметра порядка при стремлении температуры к T_c, как следует из этого рисунка, происходит посредством фазового перехода второго рода.

7. Заключение. Основные результаты, полученные при реализации проекта РФФИ # 13-02-00523, сводятся к следующему:

1. В рамках спин-фермионной модели, учитывающей сильную взаимосвязь между зарядовыми и

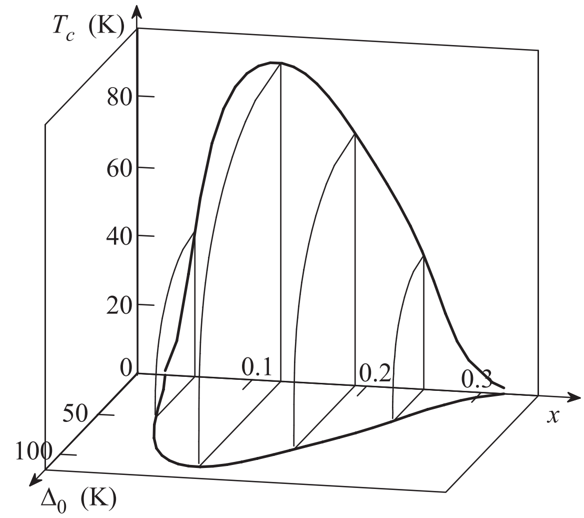

Рис. 9. Изменение амплитуды сверхпроводящего параметра порядка и температуры перехода в сверхпроводящую фазу при легировании. Использованные при расчете данных кривых, параметры модели выбирались такими же, как и на рис. 1

спиновыми степенями свободы, а также реальную структуру решетки CuO_2-плоскости с двумя ионами кислорода на одну элементарную ячейку, показано, что спин-поляронные квазичастицы определяют особенности низкотемпературных свойств купратных сверхпроводников. При развитии спин-поляронной концепции существенную роль играет базисный оператор, отражающий сильную корреляцию между локализованной подсистемой спиновых моментов ионов меди и подсистемой дырок, движущихся по ионам кислорода.

2. Показано, что энергетическая полоса спин-поляронных состояний находится значительно ниже (примерно на 3 эВ), чем несвязанные фермиевские состояния. Это определяет устойчивость спиновых поляронов.

3. На основе самосогласованных расчетов установлено, что тонкие детали эволюции ферми-поверхности в $La_{2-x}Sr_xCuO_4$, наблюдаемой в ARPES-экспериментах при допировании, хорошо воспроизводятся в развитой спин-поляронной концепции. При этом определяющими факторами оказались:

а) включение слагаемых эффективного гамильтониана, описывающих спин-коррелированные перескоки;

б) учет изменения обратной магнитной корреляционной длины ξ^{-1} при допировании;

в) принятие во внимание k-зависимости и малого значения функции вычетов "голых" дырок $n_{h,\sigma}(k)$ в нижней поляронной зоне при определении ПФ. Важной является и принятая трактовка спиновой подсистемы в рамках сферически-симметричной теории [29–31].

4. Впервые в рамках спин-фермионной модели показано, что ансамбль спин-поляронных квазичастиц при понижении температуры переходит в сверхпроводящее состояние с d-типом симметрии параметра порядка. При этом в качестве механизма, обуславливающего куперовское спаривание спиновых поляронов, выступает обменное взаимодействие, которое в результате сильной спин-зарядовой связи трансформируется в эффективное притяжение между спиновыми поляронами.

5. Получены простые аналитические выражения как для спин-поляронного спектра в нормальной фазе, так и для спектра фермиевских возбуждений в сверхпроводящей фазе.

6. На основе сравнения экспериментальных данных и самосогласованных численных расчетов как в нормальной, так и в сверхпроводящей фазе показано, что величина интеграла туннелирования t между ближайшими ионами кислорода отличается от часто используемых значений и равна 0.1 эВ. Именно при таком значении t полученная в рамках спин-поляронной концепции фазовая $T{-}x$-диаграмма и зависимость k_F от степени легирования x хорошо коррелируют с экспериментальными данными для оксидов меди.

Работа выполнена в рамках проектов Российского фонда фундаментальных исследований (# 13-02-00523, 16-42-240435 и 16-02-00304), а также комплексной программы СО РАН # II.2П (грант # 0358-2015-0005).

1. M. V. Sadovskii, Physics Uspekhi **44**, 515 (2001).
2. E. Z. Kuchinskii and M. V. Sadovskii, Pis'ma v ZhETF **88**, 224 (2008).
3. Y. A. Izyumov, Physics Uspekhi **40**, 445 (1997).
4. N. Plakida, *High-Temperature Cuprate Supercoductors Experiment, Theory, and Applications*, Springer, Berlin (2010).
5. Р. Зайцев, ЖЭТФ **125**, 891 (2004).
6. Н. Плакида, Л. Антон, С. Адам, Г. Адам, ЖЭТФ **124**, 367 (2003).
7. А. А. Владимиров, Д. Иле, Н. М. Плакида, Теоретическая и Математическая Физика **152**, 538 (2007).
8. M. Y. Kagan and T. M. Rice, J.f Physics: Condensed Matter **6**, 3771 (1994).
9. В. В. Вальков, Т. А. Валькова, Д. М. Дзебисашвили, С. Г. Овчинников, Письма в ЖЭТФ **75**, 450 (2002).
10. В. Вальков, Д. Дзебисашвили, ЖЭТФ **127**, 686 (2005).
11. С. Овчинников, М. М. Коршунов, Е. И. Шнейдер, ЖЭТФ **136**, 898 (2009).
12. В. В. Вальков, Д. М. Дзебисашвили, М. М. Коровушкин, А. Ф. Барабанов, Письма в ЖЭТФ **103**, 433 (2016).
13. V. J. Emery, Phys. Rev. Lett. **58**, 2794 (1987).
14. C. M. Varma, S. Schmitt-Rink, and E. Abrahams, Solid State Comm. **62**, 681 (1987).
15. J. E. Hirsch, Phys. Rev. Lett. **59**, 228 (1987).
16. F. C. Zhang and T. M. Rice, Phys. Rev. B **37**, 3759 (1988).
17. P. W. Anderson, Science **235**, 1196 (1987).
18. A. Ramsak and P. Prelovsek, Phys. Rev. B **40**, 2239 (1989).
19. Н. Н. Боголюбов, *Лекции по квантовой статистике*, Наукова думка, Киев (1949).
20. А. Барабанов, Л. Максимов, Г. Уймин, Письма в ЖЭТФ **47**, 532 (1988).
21. J. Zaanen and A. M. Oles, Phys. Rev. B **37**, 9423 (1988).
22. P. Prelovsek, Phys. Lett. A **126**, 287 (1988).
23. А. Барабанов, В. Березовский, Э. Жасинас, Л. А. Максимов, ЖЭТФ **110**, 1480 (1996).
24. R. O. Kuzian, R. Hayn, A. F. Barabanov, and L. A. Maksimov, Phys. Rev. B **58**, 6194 (1998).
25. А. Барабанов, Р. Хайн, А. Ковалев, О. В. Уразаев, А. М. Белемук, ЖЭТФ **119**, 777 (2001).
26. R. Zwanzig, Phys. Rev. **124**, 983 (1961).
27. H. Mori, Progress of Theoretical Physics **33**, 423 (1965).
28. A. Barabanov, L. Maksimov, E. Zhasinas, and O.V. Urazaev, JETP Let. **66**, 173 (1997).
29. J. Kondo and K. Yamaji, Progress of Theoretical Physics **47**, 807 (1972).
30. H. Shimahara and S. Takada, J. Phys. Society of Japan **60**, 2394 (1991).
31. A. Barabanov and V. Berezovskii, JETP **79**, 627 (1994), russian original - ZhETF **106**(4), 1156 (1994).
32. M. Ogata and H. Fukuyama, Rep. on Progress in Physics **71**, 036501 (2008).
33. B. Lau, M. Berciu, and G. A. Sawatzky, Phys. Rev. Lett. **106**, 036401(2011).
34. O. A. Starykh, O. F. de Alcantara Bonfim, and G. F. Reiter, Phys. Rev. B **52**, 12534 (1995).
35. T. Yoshida, X. J. Zhou, D. H. Lu, S. Komiya, Y. Ando, H. Eisaki, T. Kakeshita, S. Uchida, Z. Hussain, Z.-X. Shen, and A. Fujimori, J. of Physics: Cond. Matt. **19**, 125209 (2007).
36. N. D. Mermin and H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966).
37. А. Ф. Барабанов, А. В. Михеенков, А. В. Шварцберг, Теоретическая и Математическая Физика **168**, 389 (2011).

38. W. Marshall, Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences **232**, 48 (1955).
39. Y. A. Izyumov and M. Medvedev, JETP **32**, 302 (1971).
40. B. Keimer, N. Belk, R. J. Birgeneau, A. Cassanho, C. Y. Chen, M. Greven, M. A. Kastner, A. Aharony, Y. Endoh, R. W. Erwin, and G. Shirane, Phys. Rev. B **46**, 14034 (1992).
41. V. Barzykin and D. Pines, Phys. Rev. B **52**, 13585 (1995).
42. J. G. Tobin, C. G. Olson, C. Gu, J. Z. Liu, F. R. Solal, M. J. Fluss, R. H. Howell, J. C. O'Brien, H. B. Radousky, and P. Å. Sterne, Phys. Rev. B **45**, 5563 (1992).
43. K. Gofron, J. C. Campuzano, H. Ding, C. Gu, R. Liu, B. Dabrowski, B. W. Veal, W. Cramer, and G. Jennings, J. Phys. Chem. Sol. **54**, 1193 (1993).
44. A. A. Abrikosov, J. C. Campuzano, and K. Gofron, Physica C: Superconductivity **214**, 73 (1993).
45. D. S. Dessau, Z.-X. Shen, D. M. King, D. S. Marshall, L. W. Lombardo, P. H. Dickinson, A. G. Loeser, J. DiCarlo, C.-H. Park, A. Kapitulnik, and W. E. Spicer, Phys. Rev. Lett. **71**, 2781(1993).
46. D. M. King, Z. X. Shen, D. S. Dessau, D. S. Marshall, C. H. Park, W. E. Spicer, J. L. Peng, Z. Y. Li, and R. L. Greene, Phys. Rev. Lett. **73**, 3298 (1994).
47. P. Aebi, J. Osterwalder, P. Schwaller, L. Schlapbach, M. Shimoda, T. Mochiku, and K. Kadowaki, Phys. Rev. Lett. **72**, 2757 (1994).
48. S. V. Borisenko, M. S. Golden, S. Legner, T. Pichler, C. Dürr, M. Knupfer, J. Fink, G. Yang, S. Abell, H. Berger, Phys. Rev. Lett. **84**, 4453 (2000).
49. V. V. Val'kov, D. M. Dzebisashvili, and A. F. Barabanov, Phys. Lett. A **379**, 421 (2015).
50. В. Вальков, Ф. Федосеев, Теоретическая и Математическая Физика **168**, 417 (2011).
51. J. M. Tranquada, A. H. Moudden, A. I. Goldman, P. Zolliker, D. E. Cox, G. Shirane, S. K. Sinha, D. Vaknin, D. C. Johnston, M. S. Alvarez, A. J. Jacobson, J. T. Lewandowski, and J. M. Newsam, Phys. Rev. B **38**, 2477 (1988).
52. M. S. Hybertsen, M. Schlüter, and N. E. Christensen, Phys. Rev. B **39**, 9028 (1989).