

Квазичастичные операторы для купратных высокотемпературных сверхпроводников

М. В. Еремин¹⁾

Институт физики Казанского (Приволжского) федерального университета

Поступила в редакцию 16 января 2017 г.

После переработки 2 февраля 2017 г.

Получен полный набор квазичастичных операторов, диагонализующих операторы кулоновского и обменного взаимодействий дырок меди и кислорода в купратных высокотемпературных сверхпроводниках (ВТСП). Построена схема энергетических зон в режиме сильных электронных корреляций. На ее основе получен вид эффективного оператора для однозонного приближения. Найдено, что роль трехцентровых корреляций в дырочных ВТСП пренебрежимо мала. Это обстоятельство объясняет резкое увеличение критических температур у дырочных ВТСП по сравнению с электронно-допированными, а также асимметрию между спектрами коллективных спиновых возбуждений в этих соединениях.

DOI: 10.7868/S0370274X17050137

Введение. Для моделирования электронного строения зоны проводимости в купратных ВТСП предложен ряд моделей. В особенности их много для дырочно-допированных соединений. Носители тока в них распределены по позициям кислорода. Наряду со знаменитой t-J моделью [1] большую популярность завоевали модели Эмери [2] и Жанга-Райса [3]. В обзоре Чубукова, Пайнса и Шмалина [4] описана спин-флуктуационная модель. Ряд работ посвящен спин-фермионной модели [5] и модели спинового полярона [6]. Имеются также варианты их модификации, как например t-J* [7], J-t-t' и др. Понимание физической сути используемых моделей и их взаимосвязи затруднено, так как не всегда ясно, о каких квазичастичных операторах для описания зоны проводимости идет речь. Поэтому представляется актуальным обсудить эту проблему и подвести итоги исследований в рассматриваемом направлении. Конкретно, мы приведем полный набор квазичастичных операторов по отношению к обменному и кулоновскому взаимодействиям дырок меди и кислорода в плоскостях CuO₂, а затем опишем обобщение этих операторов для учета выпележащих состояний Cu³⁺ (S=0) и синглетных состояний двух дырок на позициях кислорода.

Начальное приближение. Энергетические зоны. Самые сильные электронные корреляции в купратах обусловлены кулоновским отталкиванием дырок на одном узле решетки. Параметр отталкива-

ния 3d-дырок на узлах меди $U_{dd} \cong 8-10$ эВ, а 2p-дырок на позиции кислорода $U_{pp} \cong 5-7$ эВ [2]. Диагонализация операторов этих взаимодействий осуществляется преобразованием Хаббарда и приводит к формированию четырех хаббардовских подзон с энергиями ε_d , $\varepsilon_d + U_{dd}$ и ε_p , $\varepsilon_p + U_{pp}$. Операторы рождения (уничтожения) квазичастиц, соответствующие этим зонам, хорошо известны [8]. В представлении хаббардовских операторов запишем их в виде $X^{\sigma,0}(X^{0,\sigma})$, $X^{dd,\sigma}(X^{\sigma,dd})$, $P^{\sigma,0}(P^{0,\sigma})$, $X^{pp,\sigma}(X^{\sigma,pp})$. Следующими по важности (величине) является обменное и кулоновское взаимодействия между дыркой меди (d), находящейся в состоянии $|x^2 - y^2\rangle$, и кислородной дырки в состоянии $|p\rangle = \{|x_1\rangle + |x_3\rangle - |y_1\rangle - |y_4\rangle\}/2$. Обменные взаимодействия бывают двух типов – прямое и кинетическое. Прямое обменное взаимодействие описывается эффективным спиновым гамильтонианом вида $H_{ex}^{(1)} = J_{pd}[(s_d s_p) + n_d n_p/4]$ и связано с эффектом перекрытия электронных орбит дырок меди и кислорода. Кинетическое обменное взаимодействие описывается оператором $H_{ex}^{(2)} = K_{pd}[(s_d s_p) - n_d n_p/4]$. Оно обусловлено виртуальными перескоками дырки с позиции меди на |p>-состояние кислородной дырки и наоборот. Величины J_{pd} и K_{pd} положительны и одного порядка величины. В модели спинового полярона [6] сделан акцент на прямое обменное взаимодействие, а в работах [3, 9–11] – на кинетическое.

Для определения вида квазичастичных операторов по отношению к оператору обменного взаимодействия дырок меди и кислорода удобно начать обсуждение со случая прямого обменного взаимодействия.

¹⁾e-mail: meremin@kpfu.ru

В представлении операторов Хаббарда оператор этого взаимодействия записывается в виде

$$H_{ex}^{(1)} = J_{pd}(X^{\uparrow,\downarrow}P^{\downarrow,\uparrow} + X^{\downarrow,\uparrow}P^{\uparrow,\downarrow} + X^{\uparrow,\uparrow}P^{\uparrow,\uparrow} + X^{\downarrow,\downarrow}P^{\downarrow,\downarrow})/2. \quad (1)$$

Квазичастичные операторы рождения, определенные нами подбором подходящих комбинаций для триплетного и синглетного состояний, приведены в табл. 1. В правильности представленных результатов можно убедиться, проверив справедливость соответствующих уравнений движения. Например, легко проверить, что

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} X^{pd,\uparrow a} = [X^{pd,\uparrow a}, H_{ex}^{(1)}] = \frac{J_{pd}}{2} X^{pd,\uparrow a}. \quad (2)$$

Как следует из табл. 1, одной и той же энергии соответствуют два типа квазичастичных операторов. Принимая во внимание физический смысл хаббардовских операторов $X^{dd,\uparrow a}$ и $X^{pp,\uparrow p}$, оператор $X^{pd,\uparrow a} = (X_i^{\downarrow,\uparrow}P_i^{\uparrow,0} - X_i^{\uparrow,\downarrow}P_i^{\downarrow,0})/\sqrt{2}$ логично интерпретировать как оператор рождения дырки на позициях кислорода с условием, что при этом состояния меди заняты. Именно такая ситуация соответствует дырочно-допированным купратам. Зону с такими квазичастичными операторами предложено называть синглетно-коррелированной [9] или для краткости просто синглетной [11]. Учитывая средние значения в отсутствии дальнего спинового порядка, равные $\langle X_i^{\uparrow,\uparrow} \rangle = \langle X_i^{\downarrow,\downarrow} \rangle = 1/2$ и $\langle P_i^{\uparrow,\uparrow} + P_i^{\downarrow,\downarrow} \rangle = \delta$, непосредственным расчетом можно убедиться, что

$$\langle X^{pd,\uparrow a} X^{\uparrow a,pd} \rangle = \langle n_d n_p / 4 - (\mathbf{s}_d \mathbf{s}_p) \rangle = \delta, \quad (3)$$

$$\langle \{X^{pd,\uparrow a}, X^{\uparrow a,pd}\} \rangle = \langle \delta + X_i^{\uparrow,\uparrow} P_i^{0,0} \rangle = (1 + \delta)/2, \quad (4)$$

$$\langle \{X^{pd,\uparrow p}, X^{\uparrow p,pd}\} \rangle = \langle \delta + P_i^{\uparrow,\uparrow} X_i^{0,0} \rangle = \delta. \quad (5)$$

В выражениях (3)–(5) считается, что $n_d = 1$, а $\langle n_p \rangle = \delta$. Оператор $X^{pd,\uparrow p}$ имеет смысл оператора рождения дырки меди на подложке в виде подрешетки из спинов кислорода. Такая ситуация мало вероятна для купратов с однородным распределением дырок. Легко проверить, что приведенные в табл. 1 операторы являются также квазичастичными и по отношению к оператору $H_{ex}^{(2)}$ (в работе [9] это было сделано несколько иначе, но смысл тот же). При этом собственные значения, конечно, меняются. Далее легко убедиться (путем составления уравнений аналогичных (1)), что вид квазичастичных операторов остается тем же, когда обменное взаимодействие представляется суммой $H_{ex}^{(1)} + H_{ex}^{(2)}$.

Обсудим далее, что происходит при учете смешивания основного и возбужденных синглетных состояний из-за перескоков дырки между позициями меди

и кислорода внутри элементарной ячейки, а также уточним формулу для оценки параметра K_{pd} . Базисные состояния в пределах одной элементарной ячейки задаем в виде [10]:

$$\begin{aligned} |\sigma_d\rangle &= d_\sigma^+ |0\rangle, \quad |\sigma_p\rangle = p_\sigma^+ |0\rangle, \\ |pd\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(p_\uparrow^+ d_\downarrow^+ - p_\downarrow^+ d_\uparrow^+) |0\rangle, \\ |dd\rangle &= d_\uparrow^+ d_\downarrow^+ |0\rangle, \quad |pp\rangle = p_\uparrow^+ p_\downarrow^+ |0\rangle. \end{aligned} \quad (6)$$

Оператор начального приближения записываем в виде

$$\begin{aligned} H_{0i} &= \varepsilon_d \sum_\sigma d_\sigma^+ d_\sigma + \varepsilon_p \sum_\sigma p_\sigma^+ p_\sigma + \\ &+ I_{dd} n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} + I_{pp} n_{p\uparrow} n_{p\downarrow} + V_{pd} n_d n_d + \\ &+ J_{pd} \left[(\mathbf{s}_d \mathbf{s}_p) + \frac{n_d n_d}{4} \right] + t_{pd} \sum_\sigma (d_\sigma^+ p_\sigma + p_\sigma^+ d_\sigma). \end{aligned} \quad (7)$$

Используя разложения [10],

$$\begin{aligned} d_\sigma^+ &= X^{\sigma d,0} + (-1)^{1/2-\sigma d} \left(X^{dd,-\sigma d} + \frac{1}{\sqrt{2}} X^{pd,-\sigma p} \right), \\ p_\sigma^+ &= P^{\sigma p,0} + (-1)^{1/2-\sigma p} \left(X^{pp,-\sigma p} + \frac{1}{\sqrt{2}} X^{pd,-\sigma d} \right), \end{aligned} \quad (8)$$

переходим к представлению проекционных операторов

$$\begin{aligned} H_i &= \varepsilon_d \sum_\sigma X^{\sigma\sigma} + \varepsilon_d \sum_\sigma P^{\sigma\sigma} + (I_{dd} + 2\varepsilon_d) X^{dd,dd} + \\ &+ (I_{pp} + 2\varepsilon_p) X^{pp,pp} + (V_{pd} + J_{pd}/4 + \varepsilon_p + \varepsilon_d) X^{pd,pd} + \\ &+ \frac{J_{pd}}{2} \left[X_i^{\uparrow,\downarrow} P_i^{\downarrow,\uparrow} + X_i^{\downarrow,\uparrow} P_i^{\uparrow,\downarrow} + \right. \\ &+ \left. \frac{1}{2} (X_i^{\uparrow,\uparrow} - X_i^{\downarrow,\downarrow}) (P_i^{\uparrow,\uparrow} - P_i^{\downarrow,\downarrow}) \right] + \\ &+ t_{pd} \sum_\sigma (X^{\sigma,0} P^{0,\sigma} + P^{\sigma,0} X^{0,\sigma}) + \\ &+ \sqrt{2} t_{pd} (X^{pd,pp} + X^{pd,dd} + X^{pp,pd} + X^{dd,pd}). \end{aligned} \quad (9)$$

Уравнения движения для операторов $X^{0,\sigma}$ и $P^{0,s}$ линеаризуем, исходя из условия равенства средних значений антикоммутаторов в левой и правой частях уравнений

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} X^{0,\sigma} &= [X^{\sigma,0} H_0] \cong \varepsilon_d X^{0,\sigma} + t_{pd} P'_d P^{0,\sigma}, \\ i \frac{\partial}{\partial t} P^{0,\sigma} &= [P^{\sigma,0} H_0] \cong \varepsilon_p P^{0,\sigma} + t_{pd} P'_p X^{0,\sigma}, \end{aligned} \quad (10)$$

где $P'_d = [P_d + \langle s_d s_p \rangle / P_p] = 0.5 - 1.5\delta / (2 - \delta)$ и $P'_p \cong [P_p + \langle s_d s_p \rangle / P_d] = 1 - 2\delta$. Для численных оценок

Таблица 1. Квазичастичные операторы для диагонализации обменного взаимодействия дырок меди и кислорода

Собственное значение $H_{ex}^{(1)}$	Вид оператора для спина вверх	Собственное значение $H_{ex}^{(2)}$
$-J_{pd}/2$	$X^{pd,\uparrow d} = (X^{\downarrow,\uparrow}P^{\uparrow,0} - X^{\uparrow,\uparrow}P^{\downarrow,0})/\sqrt{2}$	$-K_{pd}$
$-J_{pd}/2$	$X^{pd,\uparrow a} = (P^{\downarrow,\uparrow}X^{\uparrow,0} - P^{\uparrow,\uparrow}X^{\downarrow,0})/\sqrt{2}$	$-K_{pd}$
$J_{pd}/2$	$X_i^{\uparrow,\uparrow}P_i^{\uparrow,0}$	0
$J_{pd}/2$	$(X_i^{\downarrow,\uparrow}P_i^{\uparrow,0} + X_i^{\uparrow,\uparrow}P_i^{\downarrow,0})/\sqrt{2}$	0
$J_{pd}/2$	$X_i^{\uparrow,\downarrow}P_i^{\uparrow,0}$	0
$J_{pd}/2$	$P_i^{\uparrow,\uparrow}X^{\uparrow,0}$	0
$J_{pd}/2$	$(P_i^{\downarrow,\uparrow}X_i^{\uparrow,0} + P_i^{\uparrow,\uparrow}X_i^{\downarrow,0})/\sqrt{2}$	0
$J_{pd}/2$	$P_i^{\uparrow,\downarrow}X_i^{\uparrow,0}$	0

при индексе допирования $\delta = 0.1$ используем значения (в эВ) $U_{dd} = 8$, $U_{pp} = 6$, $V_{pd} = 1$, $t_{pd} = 1.2$, $J_{pd} = 1$, $\varepsilon_p - \varepsilon_d = 2$. Квазичастичный оператор рождения, соответствующий E_d -зоне, имеет вид (здесь $\sigma_d = \sigma_p = \sigma$)

$$\psi^{\sigma_a,0} = c_d X^{\sigma,0} - c_p P^{\sigma,0}. \quad (11)$$

Коэффициенты в (11) нормируются так, чтобы при $\delta = 0$ эта зона была полностью заполненной, что соответствует условию $\langle \{\psi^{\sigma_a,0}, \psi^{0,\sigma_a}\} \rangle_{\delta=0} = 1/2$. Отметим, что уровень E_d сдвигается вниз по отношению к ε_d на величину -0.33 эВ, а E_p – вверх.

Вид квазичастичного оператора рождения, соответствующего синглетно-коррелированной зоне, получается в результате решения системы уравнений

$$\begin{aligned} -i \frac{\partial}{\partial t} X^{pd,\sigma_a} &= (V_{pd} - J_{pd}/2 + \varepsilon_p) X^{pd,\sigma_a} + \\ &+ \sqrt{2} t_{pd} X^{dd,\sigma_a} + \sqrt{2} t_{pd} X^{pp,\sigma_a}, \\ i \frac{\partial}{\partial t} X^{dd,\sigma_a} &= \\ &= \sqrt{2} t_{pd} X^{pd,\sigma_a} + (I_{dd} + \varepsilon_d) X^{dd,\sigma_a} + \sqrt{2} t_{pd} X^{pp,\sigma_a}, \quad (12) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} X^{pp,\sigma_a} &= \\ &= \sqrt{2} t_{pd} X^{pd,\sigma_a} + \sqrt{2} t_{pd} X^{dd,\sigma_a} + (I_{pp} + 2\varepsilon_p - \varepsilon_d) X^{dd,\sigma_a}. \end{aligned}$$

В частности, оператор рождения со спином вверх оказывается равным

$$\begin{aligned} \psi^{pd,\uparrow a} &\cong 0.93(X^{\downarrow,\uparrow}P^{\uparrow,0} - X^{\uparrow,\uparrow}P^{\downarrow,0})\sqrt{2} - \\ &- 0.29X^{dd,\uparrow a} - 0.23X^{pp,\uparrow a}, \quad (13) \end{aligned}$$

а энергия, соответствующая таким возбуждениям, составляет $E_{pd,d} = 1.31$ эВ. Это на 1 эВ ниже состояний E_p -зоны. Выражение для E_{pd} , получающееся по теории возмущений, имеет вид

$$E_{pd} = V_{pd} - J_{pd}/2 + \varepsilon_p - K_{pd}, \quad (14)$$

где

$$\begin{aligned} K_{pd} &\cong \frac{2t_{pd}^2}{U_{dd} + \varepsilon_d - V_{pd} + 0.5J_{pd} - \varepsilon_p} + \\ &+ \frac{2t_{pd}^2}{U_{pp} + \varepsilon_p - V_{pd} + 0.5J_{pd} - \varepsilon_d} \quad (15) \end{aligned}$$

имеет смысл параметра кинетического обменного взаимодействия дырок меди и кислорода ($K_{pd} \cong 1.2$ эВ). Полный набор операторов и соответствующих им энергий приведен в табл. 2. Из-за гибридизации d - и p -состояний среднее значение антикоммутиатора становится равным $\langle \{\psi^{\sigma_a,0}, \psi^{0,\sigma_a}\} \rangle = C_d^2/2 + c_p^2(1 - \delta/2)$, т.е. “емкость” зоны уменьшается. При этом часть дырок “меди” переселяется в зону $E_{pd,p}$ так что обе нижние подзоны ($E_{pd,p}$ и E_d) оказываются полностью заполненными. Уровень Ферми располагается в зоне $E_{pd,d}$.

В заключение данного раздела отметим, что в области значений E_p имеются еще состояния p -дырок кислорода, так как в элементарной ячейке плоскости CuO имеются две позиции кислорода. На возможную важность их указывалось, например, в работах [2, 12]. Состояния дырки кислорода, ортогональные приведенному выше, мы не учитываем, так как они не смешиваются с состоянием дырки меди $|x^2 - y^2\rangle$. Наличие двух механизмов обменной связи, прямого и кинетического ($K_{pd} + J_{pd}/2 \cong 1.7$ эВ), в [2, 12] не учитывалось, поэтому значение сдвига синглетной зоны вниз по отношению к зоне кислородных дырок получалось заниженным.

Гамильтонианы для однозонных приближений. Нередко считается, что модель синглетной зоны, основанная на идее формирования медь-кислородных синглетных состояний (синглеты Жанга–Райса) [3], эквивалентна t-J модели, предложенной Андерсоном [1]. Такое заключение сделано

Таблица 2. Энергии квазичастиц и соответствующие им операторы рождения

Энергии (эВ)	Операторы рождения
$E_{dd,d}$ (10.69)	$\psi^{dd,\uparrow p} = 0.30X^{pd,\uparrow d} + 0.92X^{dd,\uparrow d} + 0.24X^{pp,\uparrow d}$
$E_{dd,p}$ (8.69)	$\psi^{dd,\uparrow p} = 0.30X^{pd,\uparrow p} + 0.92X^{dd,\uparrow p} + 0.24X^{pp,\uparrow p}$
$E_{pp,d}$ (8.50)	$\psi^{pp,\uparrow d} = 0.22X^{pd,\uparrow d} - 0.31X^{dd,\uparrow d} + 0.93X^{pp,\uparrow d}$
$E_{pp,p}$ (6.50)	$\psi^{pp,\uparrow p} = 0.22X^{pd,\uparrow p} - 0.31X^{dd,\uparrow p} + 0.93X^{pp,\uparrow p}$
E_p (2.33)	$\varphi^{\sigma,0} = 0.78P^{\sigma,0} + 0.21X^{\sigma,0}$
$E_{pd,d}$ (1.31)	$\psi^{pd,\uparrow d} = 0.93X^{pd,\uparrow d} - 0.23X^{dd,\uparrow d} - 0.29X^{pp,\uparrow d}$
E_d (-0.33)	$\psi^{\sigma,0} = 0.73X^{\sigma,0} - 0.38P^{\sigma,0}$
$E_{pd,p}$ (-0.69)	$\psi^{pd,\uparrow p} = 0.93X^{pd,\uparrow p} - 0.23X^{dd,\uparrow p} - 0.29X^{pp,\uparrow p}$

уже и в самой работе [3], однако оно требует пояснений. Дело в том, что при выводе гамильтониана t-J модели в [1] предполагалось, что носители тока распределены по позициям меди. Эта ситуация соответствует электронно-допированным купратам. Позднее также выяснилось, что оператор t-J модели при более внимательном его выводе, исходя из модели Хаббарда, содержит еще трехцентровые члены [7]. Так что полный гамильтониан для электронно-допированных купратов имеет вид

$$H_{t-J-T} = \sum_{i,l} t_{i,l} X_i^{\sigma,0} X_l^{0,\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{i,l} J_{il} \left[(s_i s_l) - \frac{n_i n_l}{4} \right] - \sum_{i \neq j, l} T_{i,j}^{(l)} (-1)^{1-\sigma-\sigma'} X_i^{\sigma,0} X_l^{-\sigma,-\sigma'} X_j^{0,\sigma'}. \quad (16)$$

В (16) второе и третье слагаемые получаются одновременно во втором порядке теории возмущений и поэтому имеют одинаковый порядок величины [7]. Если в последнем члене провести усреднение $\langle X_l^{-\sigma,-\sigma'} \rangle \cong 0.5\delta_{\sigma,\sigma'}$, то роль трехцентровых членов сведется к простой перенормировке интегралов перескока $t_{i,j}$. Однако, такое приближения является слишком грубым и, в частности, не оправдано при анализе куперовского спаривания носителей тока. В [7] показано, что трехцентровые корреляции практически полностью подавляют d-тип спаривания, обусловленного суперобменным механизмом (второе слагаемое в (16)). Кроме того, в [13] найдено, что трехцентровые члены важны для понимания причин асимметрии между коллективными спиновыми колебаниями в электронно- и дырочно-допированных купратах.

Из табл. 1 и 2 следует, что спектр элементарных возбуждений при распределении допированных дырок по позициям кислорода отличается от энергетического спектра модели Хаббарда. Поэтому вклады

в оператор энергии, связанные с эффектами второго порядка теории возмущений в гамильтониан синглетной зоны, будут иными. Пусть уровень Ферми располагается в $E_{pd,d}$ -зоне. Поправки второго порядка, обусловленные виртуальными возбуждениями $E_d \rightarrow E_{pd,d}$, $E_{pd,d} \rightarrow E_{dd,d}$ и $E_{pd,d} \rightarrow E_{pp,d}$ описываются оператором вида

$$-(t_{pd})^2 \sum_{i,l,j} C_{il} C_{lj} (-1)^{1-\sigma-\sigma'} \times$$

$$\left\{ \begin{aligned} & (c_{1d}c_{5p})^2 \frac{\psi_i^{\sigma_d,0} \psi_l^{-\sigma_d,-\sigma'_d} \psi_j^{0,\sigma'_d}}{E_{pd,d} - E_d} + \\ & + (c_{5d}c_{3p})^2 \frac{\psi_i^{pd,\sigma_d} \psi_l^{-\sigma_d,-\sigma'_d} \psi_j^{pd,\sigma'_d}}{E_{dd,d} - E_{pd,d}} + \\ & + (c_{5d}c_{4p})^2 \frac{\psi_i^{pd,\sigma_d} \psi_l^{-\sigma_d,-\sigma'_d} \psi_j^{pd,\sigma'_d}}{E_{pp,d} - E_{pd,d}} \end{aligned} \right\}, \quad (17)$$

где C_{ij} – коэффициенты преобразования от локализованных состояний к функциям Ванье в операторе перескоков $H_t = t_{pd} \sum_{i \neq j} C_{ij} (d_{i\sigma}^+ p_{j\sigma} + p_{i\sigma}^+ d_{j\sigma})$, таблицы их приведены в [10]. Коэффициенты c_{id} и c_{jp} определяются разложениями [10]:

$$\begin{aligned} d_{i\sigma}^+ &= c_{1d} \psi_i^{\sigma_d,0} + c_{2d} \psi_i^{\sigma_p,0} + (-1)^{1/2-\sigma} \times \\ & \times [c_{3d} \psi_i^{dd,-\sigma_d} + c_{4d} \psi_i^{pp,-\sigma_d} + c_{5d} \psi_i^{pd,-\sigma_d} + \\ & + c_{6d} \psi_i^{dd,-\sigma_p} + c_{7d} \psi_i^{pp,-\sigma_p} + c_{7d} \psi_i^{pd,-\sigma_p}], \quad (18) \\ p_{j\sigma} &= c_{1p} \psi_j^{0,\sigma_d} + c_{2p} \psi_j^{0,\sigma_p} + (-1)^{1/2-\sigma_p} \times \\ & \times [c_{3p} \psi_j^{-\sigma_d,dd} + c_{4p} \psi_j^{-\sigma_d,pp} + c_{5p} \psi_j^{-\sigma_d,pd} + \\ & + c_{6p} \psi_j^{-\sigma_p,dd} + c_{7p} \psi_j^{-\sigma_p,pp} + c_{8p} \psi_j^{-\sigma_p,pd}]. \quad (19) \end{aligned}$$

Численные значения c_{id} и c_{jp} получают на основе (9) и данных табл. 2. Видно, что первое слагаемое в (17)

при $i = j$ сводится к оператору обменного взаимодействия спинов меди, но не приводит к появлению трехцентровых членов, так как перескоки по заполненной зоне E_d запрещены принципом Паули. Используя приведенные в Таблице 2 значения энергий, для параметра суперобменного взаимодействия между ближайшими *спинами меди* находим $J_{il} = 0.12$ эВ, т.е. этот параметр примерно такой же, как в (16). Далее, из общего выражения (17) видно, что трехцентровые члены, представленные вторым и третьим слагаемыми, малы по сравнению с $J_{il} = 0.12$ эВ. Им сопутствуют большие энергетические знаменатели, а значения коэффициентов разложения уменьшились по сравнению со случаем электронного допирования. Численный расчет параметров типа $T_{i,j}^{(l)}$, фигурирующих в (16), показал, что в данном случае они составляют величины порядка 10^{-3} эВ. Таким образом, приходим к выводу, что вид эффективного оператора для синглетно-коррелированной зоны ограничен двумя членами:

$$H_{sc} = \sum_{i,l} t_{i,l} \psi_i^{pd,\sigma} \psi_l^{\sigma,pd} + \frac{1}{2} \sum_{i,l} J_{il} \left[(s_i s_l) - \frac{n_i n_l}{4} \right]. \quad (20)$$

Отсюда вытекает важное следствие, поясняющее различие критических температур у электронно- и дырочно-допированных купратов. По оценкам работ [14, 15], при выборе исходного гамильтониана в форме (20), основными механизмами, ответственными за d -спаривания являются суперобменный и спин-флуктуационный, причем они дополняют друг друга и одного порядка величины. В электронно допированных купратах трехцентровые члены, как это впервые отмечено в [7], подавляют суперобменный вклад, поэтому становится понятным, почему критическая температура T_c у них, грубо говоря, в два-три раза меньше по сравнению с дырочно-допированными.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ.

1. P. W. Anderson, *Science* **235**, 1196 (1987).
2. V. J. Emery, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2794 (1987); V. J. Emery and G. Reiter, *Phys. Rev. B* **38**, 4547 (1988).
3. F. C. Zhang and T. M. Rice, *Phys. Rev. B* **37**, 3759 (1988).
4. A. V. Chubukov, D. Pines, and J. Schmalian, *A Spin-Fluctuation Model for d-Wave Superconductivity*; in book *Superconductivity V. 2: Novel Superconductors*, ed. by K. H. Bennemann, J. B. Katterson, Springer (2008), p. 1349.
5. Ar. Abanov and A. V. Chubukov, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 5608 (2000); Ar. Abanov, A. V. Chubukov, and J. Schmalian, *Advances in Physics* **52**(3), 119 (2003).
6. А. Ф. Барабанов, Л. А. Максимов, Г. В. Уймин, *Письма в ЖЭТФ* **47**, 532 (1988) [*JETP Lett.* **47**, 622 (1988)]; *ЖЭТФ* **69**, 371 (1989) [*JETP* **96**, 655 (1989)]; A. F. Barabanov, R. O. Kuzian, and L. A. Maksimov, *J. Phys. Condens. Matter.* **3**, 9129 (1991).
7. В. В. Вальков, Т. А. Валькова, Д. М. Дзедзисашвили, С. Г. Овчинников, *Письма в ЖЭТФ* **75**, 450 (2002).
8. N. M. Plakida, *High-Temperature Cuprate Superconductors. Experiment, Theory, and Applications*, Springer, Berlin, Heidelberg, N.Y., Hong Kong, London, Milan, Paris, Tokyo (2011).
9. M. V. Eremin, R. Markendorf, and S. V. Varlamov, *Solid State Comm.* **88**, 15 (1993); M. V. Eremin, R. Markendorf, S. V. Varlamov, D. Brinkman, M. Mali, R. Markendorf, and J. Roos, *JETP Lett.* **60**, 125 (1994).
10. M. Eremin, S. Solovjanov, and S. Varlamov, *J. Phys. Chem. Solids.* **56**, 1713 (1995); М. В. Еремин, С. Г. Соловьянов, С. В. Варламов, *ЖЭТФ* **112**, 1763 (1997); [*JETP* **85**, 963 (1997)].
11. N. M. Plakida, R. Hayn, and J.-L. Richard, *Phys. Rev. B* **51**, 16599 (1995).
12. C. M. Varma, S. Schmitt-Rank, and E. Abrahams, *Solid State Comm.* **62**, 681 (1987).
13. М. В. Еремин, М. А. Малахов, *Письма в ЖЭТФ* **104**, 13 (2016) [*JETP Lett.* **104**, 15 (2016)].
14. N. M. Plakida and V. S. Oudovenko, *Phys. Rev. B* **59**, 11949 (1999).
15. N. M. Plakida, L. Anton, S. Adam, and Gh. Adam, *ЖЭТФ* **124**, 367 (2003) [*JETP* **97**, 331 (2003)].