Письма в ЖЭТФ, том 52, вып. 7, стр. 999 - 1002 10 октября 1990 г.

НОВОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ МОДЕЛИ ХАББАРДА

Г.Г.Халиуллин

Найдено представление $t-J$ гамильтониана через локализованные псевдоспины и бесспиновые фермионы, в рамках которого качественно исследованы спектр квазичастиц, сверхпроводимость и ядерная релаксация при малой плотности носителей тока.

1. В пределе $U \gg t$ модель Хаббарда описывается редуцированным, так называемым $t-J$ гамильтонианом [1]:

$$H_{t-J} = \frac{1}{2}J\sum_{ij}(\vec{\sigma}_i\vec{\sigma}_j) - t\sum_{ij\sigma}(1-n_{i-\sigma})a^+_{i\sigma}a_{j\sigma}(1-n_{j-\sigma}),\ \ J = 4t^2/U, \tag{1}$$

где $n_{i\sigma} = a^+_{i\sigma}a_{i\sigma}$, а $\vec{\sigma}_i$ - оператор спиновой плотности электронов. Идея разделения спиновых и зарядовых степеней свободы обычно реализуется представлением электронных операторов через фермион-бозонные (бозон-фермионные) псевдополя [2]. Однако при этом возникают проблемы технического характера, связанные с необходимостью соблюдения локального сохранения числа псевдочастиц для исключения нефизических состояний на каждом узле. Желательно иметь такое представление (1), когда операторы, описывающие спиновые и зарядовые степени свободы, не были бы связаны дополнительными уравнениями. При малой плотности носителей весьма привлекательным с этой точки зрения является следующее новое представление гамильтониана (1):

$$H = \frac{1}{2}J\sum_{ij}(\vec{S}_i\vec{S}_j)(1-n_i)(1-n_j) - 2t\sum_{ij}(\vec{S}_i\vec{S}_j + \frac{1}{4})c^+_i c_j. \tag{2}$$

Здесь $n_i = c^+_i c_i$, где c^+_i -бесспиновый фермионный оператор рождения дырки (двойки) с зарядом $+e(-e)$ в зависимости от заполнения $N_e/N = 1 \mp \delta$, а $\vec{S}_i$ - локальный псевдоспин 1/2. Фермионы в (2) описывают физическое движение заряда, а реальный спин в однократно занятых узлах выражаются через псевдоспин как $\vec{S}_i(1-n_i)$. (При движении фермиона происходит "превращение" псевдоспина в реальный и обратно). Нетрудно проверить, что при любой ориентации псевдоспинов перенос заряда в (2) осуществляется с сохранением проекции реального спина и с амплитудой t, как и в исходной модели. Это видно также из коммутативности (2) с полным спином системы $\Sigma\vec{S}_i(1-n_i)$. Что касается лишних псевдоспинов в малом количестве узлов, занятых фермионами, они не вносят лишнюю энергию, обеспечивая лишь сохранение реального спина при движении фермиона.

Гамильтониан (2) допускает вычисление физических величин стандартными методами, не усложненными уравнениями связи.

2. Предел малой концентрации $\delta < \delta^*$ (δ^* определена ниже). Исходя из неелевского состояния ($T=0$) и выражая $H(2)$ через подрешеточно-симметричные магноны в линейном приближении, находим

$$H = \omega^0_{\vec{p}} b^+_{\vec{p}} b_{\vec{p}} + \varsigma^0_{\vec{k}} c^+_{\vec{k}} c_{\vec{k}} + H_{int},$$

$$\omega^0_{\vec{p}} = \frac{z}{2}\tilde{J}(1-\gamma^2_{\vec{p}})^{1/2},\ \ \tilde{J} = J(1-\delta)^2, \tag{3}$$

$$\varsigma^0_{\vec{k}} = z\tilde{t}(1-\gamma_{\vec{k}}) - \mu,\ \ \tilde{t} = t < 2\vec{S}_i\vec{S}_j + \frac{1}{2} >\sim -0,16t.$$

Взаимодействие имеет структуру:

$$H_{int} = \{\Gamma_n(\vec{k},\vec{p},\vec{q})b^+_{\vec{p}}b_{\vec{p}+\vec{q}} + \frac{1}{2}\Gamma_a(\vec{k},\vec{p},\vec{q})(b^+_{\vec{p}}b^+_{-\vec{p}-\vec{q}} + b_{-\vec{p}}b_{\vec{p}+\vec{q}})\}c^+_{\vec{k}+\vec{q}}c_{\vec{k}}. \quad (4)$$

Матричные элементы $\Gamma_n, \Gamma_a \Rightarrow 0$ при $\vec{p} \Rightarrow 0, \vec{Q}$; $\vec{Q} = (\pm\pi, \pm\pi)$. z - число ближайших соседей, решетка либо квадратная, либо кубическая, постоянная решетки равна единице. Слабая затравочная дисперсия фермионов в (3) есть просто результат среднего поля; она затем компенсируется собственно-энергетической частью, и в результате $\epsilon_{\vec{k}} \simeq \epsilon_{\vec{k}+\vec{Q}}$. Когерентное движение фермиона обеспечивается квантовыми флуктуациями спинов с одновременным возбуждением двух магнонов. В низшем самосогласованном приближении фермионная собственная энергия

$$\Sigma_\omega(\vec{k}) = \frac{1}{2}\sum_{\vec{p}\vec{q}}\Gamma^2_a(\vec{k}\vec{p}\vec{q})\int dx\rho_x(\vec{k}+\vec{q})\left\{\frac{\theta(x)}{\omega - x - \omega_{pq} + i\gamma} + \frac{\theta(-x)}{\omega - x + \omega_{pq} + i\gamma}\right\}, \quad (5)$$

где $\omega_{pq} = \omega_{\vec{p}} + \omega_{\vec{p}+\vec{q}}$, $\rho_x(\vec{k})$ - спектральная плотность фермионной функции Грина $G_x(\vec{k}) = (x - \zeta^0_{\vec{k}} - \Sigma_x(\vec{k}))^{-1}$. Вблизи $p \sim 0$, $\vec{Q}$ - магнонная энергия $\omega_p \simeq vp$, где перенормированная зарядовыми флуктуациями скорость $v \simeq v_0(1-\beta)^{1/2}$,

$$\beta = (2z)^{3/2}(t^2/v)\sum_{kq}\int^{0} dx\int_{0} dy\rho_x(\vec{k})\rho_y(\vec{k}+\vec{q})/(y - x + \omega_{\vec{q}}). \quad (6)$$

Из (5) видно, что при $\omega \ll \omega_{max} \simeq v(z/2)^{1/2}$ затухание Σ''_ω стремится к нулю (быстрее, чем ω^2), а при $\omega > \omega_{max}$ оно велико и слабо зависит от ω. Исходя из этого, для качественного анализа можно положить:

$$\rho_\omega(\vec{k}) = Z_0\delta(\omega - \zeta_k)\theta(\omega_{max} - \omega) + \rho_{inc}\theta(\omega - \omega_{max}), \quad (7)$$

где некогерентная часть $\rho_{inc} \sim 1/2\Gamma$, $\Gamma = \Sigma''(\omega \gg \omega_{max})$. Тогда из (5)-(7) следует

$$v = v_0\tau^{1/2}, \quad Z_0 = (1 - \frac{\partial\Sigma\omega}{\partial\omega})^{-1}_0 \simeq (J/t)\tau^{1/2}, \quad (8)$$

$$\zeta_k = |\vec{k} - \vec{Q}/2|^2/2m - \mu, \quad m^{-1} \simeq Z_0\frac{\partial^2\Sigma_\omega(\vec{k})}{\partial k^2} \simeq J\tau^{1/2}, \quad \Gamma \simeq 2\sqrt{\pi}t,$$

$$\tau = 1 - \delta/\delta^*, \quad \delta^* = (J/4t)/[1 + \frac{1}{\sqrt{\pi}}\ln(2t/J)].$$

Наличие ферми-поверхности вблизи $\vec{Q}/2$, значения вычета функции Грина квазичастиц Z_0 и их массы m согласуются с известными результатами при $\delta \Rightarrow 0$, полученными ранее другими методами. Новым является результат для критической концентрации носителей δ^*, при которой неелевское состояние становится неустойчивым ($\delta^* \simeq 0,04$ при $t/J = 3$). Эффективное взаимодействие между квазичастицами оказывается наибольшим (и притягивающим) при больших передачах импульса $\sim \vec{Q}$. Так как при отсутствии у носителей спиновой структуры для куперовской неустойчивости требуется обратная ситуация (рассеяние вперед сильнее), то при $\delta < \delta^*$ сверхпроводимости нет.

3. При $\delta > \delta^*$ наше рассмотрение базируется на феноменологическом предположении, что во вращательно-инвариантной спин-жидкостной фазе с ближним антиферромагнитным порядком статический коррелятор при $R \gg 1$ имеет вид:

$$< \vec{S}_{\vec{i}}\vec{S}_{\vec{i}+\vec{R}} > \simeq (-1)^{\vec{R}} < \vec{S}_i\vec{S}_i > \exp(-p_0R)/\pi R, \quad p_0 \simeq (\delta - \delta^*)^{1/2}. \quad (9)$$

Соответствующую структуру спиновой функции Грина D можно найти, записав, например, для нее уравнения движения с гейзенберговским взаимодействием и проводя на втором этапе расцепление с использованием (9). Тогда

$$D_\omega(\vec{p}) = A\frac{1-\gamma_{\vec{p}}}{\omega^2-\omega^2_{\vec{p}}}\ ,\quad \omega_{\vec{p}} \simeq \begin{cases} vp, & p\sim 0;\\ v(p_0^2+p'^2)^{1/2}, & \vec{p}\sim\vec{Q}-\vec{p}\ '. \end{cases} \tag{10}$$

С учетом условия нормировки $A\simeq 2J, <\vec{S}_i\vec{S}_{i+1}>= -0,30$ при $p_0 \ll 1$. Подобный (10) вид пропагатора с щелевым при $p=Q$ спектром был постулирован в [3]. Разумеется, речь может идти лишь о псевдощели, наиболее выраженной, по-видимому, в СП фазе, где зарядовые флуктуации подавлены. Тем не менее представляет интерес провести качественный анализ при $\delta>\delta^*$, исходя из предположения (9).

Выделив из (2) среднеполевую часть, находим

$$H_{int} = -\Gamma(\vec{k},\vec{p},\vec{q})(\vec{S}_{-\vec{p}}\vec{S}_{\vec{p}+\vec{q}})c_{\vec{k}+\vec{q}}c_{\vec{k}},$$

$$\Gamma(\vec{k},\vec{p},\vec{q}) = zt\{\gamma_{\vec{p}-\vec{k}}+\gamma_{\vec{p}+\vec{q}+\vec{k}}+(J/2t)(1-\delta)(\gamma_{\vec{p}}+\gamma_{\vec{p}+\vec{q}})\}. \tag{11}$$

Главный вклад в фермионную энергию

$$\Sigma_\omega(k) = \frac{3}{4}\sum_{pq}\alpha_{\vec{p}}\alpha_{\vec{p}+\vec{q}}\Gamma^2(\vec{k},\vec{p},\vec{q})\int dx\rho_x(\vec{k}+\vec{q})\left(\frac{\theta(x)}{\omega-x-\omega_{pq}+i\gamma}+\frac{\theta(-x)}{\omega-x+\omega_{pq}+i\gamma}\right) \tag{12}$$

и во взаимодействие между носителями

$$V(\omega,q) = -\frac{3}{2}\sum_p\alpha_{\vec{p}}\alpha_{\vec{p}+\vec{q}}\Gamma^2(\vec{k}\vec{p}\vec{q})\omega_{pq}/(\omega^2_{pq}-\omega^2) \tag{13}$$

определяется областью $\vec{p}\sim\vec{Q}$, $q\sim 0$, так как $\alpha_p = 2\sqrt{2}(p_0^2+p'^2)^{-1/2}$ при $\vec{p}\sim\vec{Q}-\vec{p}\ '$, и $\alpha_p = p/2\sqrt{2}$ при $p\sim 0$, отражая аномально большую восприимчивость $\chi_s(q)\simeq \{J(p_0^2+z(1+\gamma_q))\}^{-1}$ почти антиферромагнитной жидкости вблизи $\vec{p}\sim\vec{Q} : \chi_s(\vec{Q})\sim 1/J\delta$. При этом матричный элемент $\Gamma(kpq)$ наибольший при $k\sim 0$, и при не очень малых J/t мы ожидаем, что ферми-поверхность будет вблизи центра зоны Бриллюэна. Используя аналогичную (7) аппроксимацию с $\omega_{max}\simeq 2\omega_g = 2vp_0$, имеем

$$Z_0 = (\pi\tilde{J}/4t)/|3\ln p_0|^{1/2},\quad \zeta_k = k^2/2m-\mu,\quad m^{-1}\simeq \tilde{J}/|\ln p_0|^{1/2}. \tag{14}$$

Таким образом, при $\delta>\delta^*$ квазичастичное описание ограничено более узкой областью $\omega<\omega_g\sim J(\delta-\delta^*)^{1/2}$ и имеется дополнительное логарифмическое "утяжеление" фермиона. Низкоэнергетический квазичастичный гамильтониан

$$H = \sum_k\zeta_{\vec{k}}c^+_{\vec{k}}c_{\vec{k}}+\sum_{kk'}V(\vec{k}\vec{k}')c^+_{\vec{k}'}c^+_{-\vec{k}'}c_{-\vec{k}}c_{\vec{k}}. \tag{15}$$

Здесь антисимметризованное и перенормированное на квазичастичный вес взаимодействие в куперовском канале

$$V(\vec{k},\vec{k}') = -\frac{(\pi zJ)^2}{2v|\ln p_0|}\{(1-\frac{k^2+k'^2}{4z})F_a-\frac{\vec{k}\vec{k}'}{2z}F_s\}, \tag{16}$$

где $F_{a,s}$ - антисимметричная и симметричная части функции

$$F^{(d=2)} = (2\pi)^{-1}\{(\vec{k}' - \vec{k})^2 + (2p_0)^2\}^{-1/2} \ , \quad F^{(3)} = (2\pi^2)^{-1}\ln\frac{24}{(\vec{k}' - \vec{k})^2 + (2p_0)^2}.$$

В двумерном случае квазикулоновский характер притяжения обеспечивает p-орбитальное спаривание фермионов при

$$T_c^{(2)} \simeq (4\gamma/\pi)(\delta - \delta^*)^{1/2} v \exp(-1/\lambda), \quad \lambda \simeq (a - b\delta)/|\delta \ln(\delta - \delta^*)|^{1/2}, \quad a \simeq 0,30, \quad b \simeq 1,26. \tag{17}$$

Если $J \sim 1200K$, $\delta \sim 0,1$, то $\lambda \simeq 1/3$, $T_c \simeq 40K$. Сверхпроводимость отсутствует при $\delta > 0,24$, так как при $\delta \simeq 0,24$ $\lambda(\delta)$ меняет знак. Ниже T_c реализуется либо а) бесщелевая A-фаза с параметром порядка $\Delta(k) = \Delta_0 \sin\theta_k$, $2\Delta_0/T_c = (2\Delta/T_c)_{БКШ}(2/\sqrt{e}) \sim 4,3$, либо б) B-фаза с $\Delta(k) = \Delta_0 \exp(i\theta_k)$ и изотропной щелью $2\Delta_0/T_c = (2\Delta/T_c)_{БКШ}$. Рассеяние на немагнитных примесях подавляет T_c в обеих фазах.

4. Сверхтонкое взаимодействие, определяющее ядерную релаксацию, в представлении (2) принимает вид $A_{hf}(\vec{I}_i\vec{S}_i(1 - n_i))$. Мнимая часть одноточечной спиновой восприимчивости $\sim (1 - \delta)^2\chi_s'' + (S(S+1)/3)\chi_e''$, где второе слагаемое имеет ферми-жидкостное поведение. Однако главный вклад в релаксацию дает псевдоспиновая часть $\chi_s''(\vec{p} \sim \vec{Q})$, для вычисления которой мы вводим в полюса функции (10) затухание $\gamma_\omega(p)$. Естественно думать, что последнее в основном определяется локальными зарядовыми флуктуациями: $\gamma(Q) \simeq \Gamma^2(0,Q,0)\ T\chi_e''(\omega)/\omega$. Тогда при $T > T_c$ $\gamma(Q) = \pi T/3$ и $T_1^{-1} \simeq (2A_{hf}^2/J)T^2/(\omega_g^2 + T^2)$. При $T < T_c$ в A-фазе, например, $T_1^{-1} = T_1^{-1}(T_c)\ f(T)$, где

$$f(T) \simeq (4/11)(T/T_c)^4, \quad T \ll T_c$$

$$f(T) \simeq 2(T/T_c)^2/(1 + \exp(\Delta/T)), \quad T \sim T_c \tag{18}$$

Эти зависимости аналогичны тем, что наблюдаются для ядер меди в ВТСП.

5. Смягчение магнонов (8) в области $\delta \sim \delta^*$ и логарифмическое инфракрасное поведение при $\delta > \delta^*$ несут черты сильной связи фермионов с бозонным полем в области $\delta \geq \delta^*$. Наш анализ при $\delta > \delta^*$ в рамках теории возмущений с низкочастотным обрезанием может быть рассмотрен как параметризация задачи. Возможно, что качественные результаты при $\delta > \delta^*$, в частности, статистика носителей тока и сценарий сверхпроводимости, сохраняется в более точной теории.

Работа поддерживается Научным советом по проблеме ВТСП и выполняется в рамках проекта N 344 Государственной программы "Высокотемпературная сверхпроводимость".

Литература

1. *Anderson P.W.* Science, 1987, 235, 1196.

2. *Barnes S.E.* J. Phys.F, 1976, 6, 1375; *Coleman P.* Phys.Rev.B, 1984, 29, 3035.

3. *Mata G.J., Arnold G.B.*Phys.Rev.B, 1989, 39, 9768.

Казанский физико-технический институт
им.Е.К.Завойского КНЦ Академии наук СССР

Поступила в редакцию
10 июля 1990 г.