

О РАСЩЕПЛЕНИИ НИЖНЕЙ ЗОНЫ ЗАРЯДОВЫХ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ ДВУМЕРНОГО АНТИФЕРРОМАГНЕТИКА

А.Ф.Барабанов, О.В.Уразаев, А.А.Ковалев, Л.А.Максимов[†]

Институт физики высоких давлений РАН
142092 Троицк, Московская обл., Россия

[†]Российский научный центр "Курчатовский институт",
Институт сверхпроводимости и физики твердого тела
123182 Москва, Россия

Поступила в редакцию 27 июля 1998 г.

В рамках обобщенной модели Кондо решетки для двумерного антиферромагнетика (модель плоскости CuO_2) развит подход спинового полярона, который позволяет описать расщепление поляронных зон носителей как при наличии дальнего магнитного порядка ($T = 0$), так и при конечной длине спиновых корреляций ($T \neq 0$), а также сильное отклонение от теоремы Латтинжера и эффект "shadow bands" как при нулевой, так и конечной температурах.

PACS: 71.10.Fd, 71.27.+a, 75.30.Mb

Хорошо известно, что в высокотемпературных сверхпроводниках движение дырки в плоскости CuO_2 происходит на фоне антиферромагнитной (AFM) спиновой подложки и должно трактоваться как коррелированное движение дырки спаренной со спиновыми возбуждениями (спиновый полярон) [1, 2]. Обычно спиновый полярон исследуется в рамках $t - J$ -модели [1] и трехзонной модели Хаббарда [3–5]. Недавно было явно показано, что для того, чтобы правильно описать спектральную функцию дырки, важно трактовать элементарные возбуждения в рамках концепции спинового полярона малого радиуса [6]. В упомянутой статье спектральная функция дырки была вычислена в самосогласованном борновском приближении с использованием феноменологического экранирования вершины в области, близкой к антиферромагнитному вектору $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$, которая описывает рассеяние спинового полярона спиновыми волнами бозе-конденсата. Как было показано Шриффером [7], важно, в нулевом приближении, учесть спаривание фермионов со спиновым бозе-конденсатом. Такая процедура требует конструировать суперпозицию локального полярона и полярона бесконечного радиуса при $T = 0$. Это конструирование нетривиально в случае, когда мы трактуем спиновую AFM подложку в сферически симметричном состоянии (состоянии RVB типа), и для $T = 0$ оно было развито для модели двумерной Кондо решетки и для модели Эмери [8, 9].

В настоящей работе в рамках обобщенного гамильтониана Кондо решетки с перекоками на первые, вторые и третьи ближайшие соседи (такой гамильтониан адекватно моделирует модель Эмери [10]) рассматривается спиновый полярон, представляющий собой суперпозицию локального полярона, полярона промежуточного радиуса и полярона бесконечного радиуса. Это позволяет описать как при $T = 0$, так и

при $T \neq 0$ свойства спектра элементарных возбуждений, связанные с расщеплением нижней зоны: сильное нарушение теоремы Латтинжера, эффект "shadow bands" [11, 12], описать непрерывное изменение спектральной плотности носителей заряда при потере дальнего порядка.

Гамильтониан Кондо решетки имеет вид

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{J} + \hat{T} + \hat{I}, \\ \hat{J} &= J \sum_{\mathbf{r}} \mathbf{a}_{\mathbf{r}}^+ \tilde{S}_{\mathbf{r}} \mathbf{a}_{\mathbf{r}}, \\ \hat{T} &= \tau_g \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{g}} \mathbf{a}_{\mathbf{r}+\mathbf{g}}^+ \mathbf{a}_{\mathbf{r}} + \tau_d \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{d}} \mathbf{a}_{\mathbf{r}+\mathbf{d}}^+ \mathbf{a}_{\mathbf{r}} + \tau_{2g} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{g}} \mathbf{a}_{\mathbf{r}+2\mathbf{g}}^+ \mathbf{a}_{\mathbf{r}}, \\ \hat{I} &= \frac{I}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{g}} \hat{S}_{\mathbf{r}} \hat{S}_{\mathbf{r}+\mathbf{g}}. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь приняты следующие обозначения: \mathbf{g} – вектор ближайших соседей, $\mathbf{g} = \pm \mathbf{g}_x \pm \mathbf{g}_y$; \mathbf{d} и $2\mathbf{g} = 2\mathbf{g}$ – векторы вторых и третьих ближайших соседей. Фермиевский оператор $\mathbf{a}_{\mathbf{r}, \sigma}^+$ отвечает рождению дырки со спином $S = 1/2$ и проекцией спина $\sigma/2$ ($\sigma = \pm 1$). В гамильтониане Кондо-взаимодействия \hat{J} используется обозначение $\tilde{S}_{\mathbf{r}} = S_{\mathbf{r}}^{\alpha} \sigma^{\alpha}$.

Для рассмотрения элементарных возбуждений в рамках подхода спинового полярона вводим следующий базис узельных операторов:

$$A_{\mathbf{r}, 1} = a_{\mathbf{r}}, \quad A_{\mathbf{r}, 2} = \tilde{S}_{\mathbf{r}} a_{\mathbf{r}}. \quad (2)$$

Для учета полярона бесконечного радиуса при $T = 0$ учтем также операторы

$$\begin{aligned} A_{\mathbf{r}, j} &= \tilde{Q}_{\mathbf{r}} A_{\mathbf{r}, i}, \\ \tilde{Q}_{\mathbf{r}} &= N^{-1} \sum_{\rho} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}+\rho)} \tilde{S}_{\mathbf{r}+\rho}, \quad j = i + 2, \quad i = (1 \div 2), \end{aligned} \quad (3)$$

которые описывают спаривание локальных поляронов со спиновыми возбуждениями с дальним порядком. Отметим, что при $M = 0$ вклад от этих операторов исчезает. И, наконец, введем операторы

$$\begin{aligned} A_{\mathbf{r}, j} &= \tilde{Q}_{\mathbf{r}}^{(1)} A_{\mathbf{r}, i}, \\ \tilde{Q}_{\mathbf{r}}^{(1)} &= N^{-1} \sum_{\rho, \mathbf{q} \in \Omega} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}+\rho)} \tilde{S}_{\mathbf{r}+\rho}, \quad j = i + 4, \quad i = (1 \div 2). \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь Ω – малая область зоны Бриллюэна около точки (π, π) , представленная ниже на рис.3. Суммирование не включает $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$.

Операторы $A_{\mathbf{r}, 5}, A_{\mathbf{r}, 6}$ описывают полярон промежуточного радиуса, то есть связь локального полярона со спиновыми волнами, импульс которых принадлежит квадратным областям около \mathbf{Q} с линейными размерами L .

Для определения спектра спинового полярона $\varepsilon_i(\mathbf{k})$ (здесь i – номер зоны) используем матрицу двухвременных запаздывающих функций Грина $G_{i,j}(t, \mathbf{k})$ для операторов $A_{\mathbf{k}, \sigma, i}$.

Мы решаем систему уравнений движения $G_{i,j}(\omega, \mathbf{k})$, используя стандартный проекционный метод Мори-Цванцига [13] и ограничиваемся ранее выбранным базисом операторов $\{A_{\mathbf{k},\sigma,i}\}$. При этом при $T = 0$ мы рассматриваем базис из шести операторов $i = 1 - 6$ (случай 1). А при конечной температуре (случай 2) в наборе операторов отсутствуют $A_{\mathbf{k},\sigma,3}, A_{\mathbf{k},\sigma,4}$, так как они описывают полярон бесконечного радиуса, существующий только при наличии дальнего порядка.

В результате функция Грина имеет форму

$$G_{i,j}(\omega, \mathbf{k}) = \sum_{l=1}^6 \frac{Z_{(i,j)}^{(l)}(\mathbf{k})}{\omega - \epsilon_l(\mathbf{k})}. \quad (5)$$

В частности, величина $Z_{(1,1)}^{(l)}(\mathbf{k})$ относится к числу голых дырок с фиксированным спином σ и импульсом \mathbf{k} в состоянии $|\mathbf{k}, \sigma\rangle$ квазичастичной зоны $\epsilon_l(\mathbf{k})$. Отметим, что спектральные веса (вычеты) $Z_{(i,j)}^{(l)}(\mathbf{k})$ удовлетворяют правилу сумм $\sum_s Z_{(1,1)}^{(s)}(\mathbf{k}) = 1$.

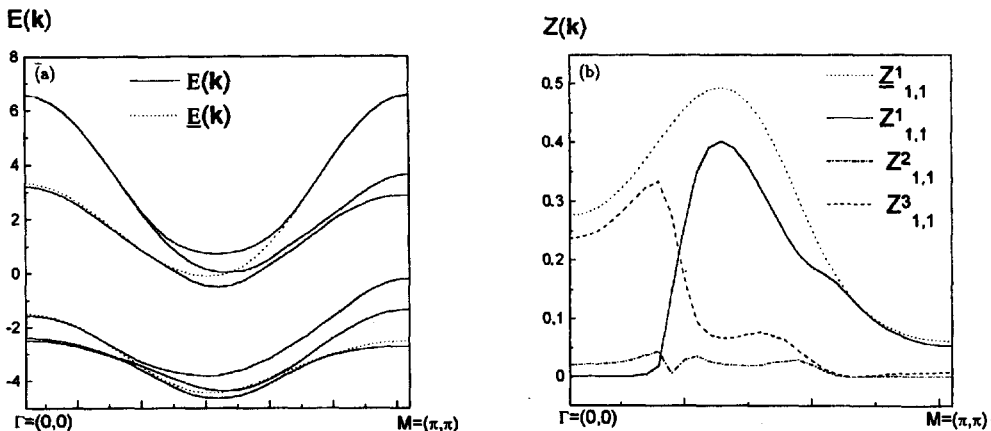


Рис.1. а) Спектр квазичастичных возбуждений $E^i(\mathbf{k})$ при $T = 0$ вдоль симметричного направления $\mathbf{k} = k_x = k_y$. $\underline{E}^{(i)}(\mathbf{k})$ - приближение локального полярона. б) Вычеты $Z_{1,1}^{(i)}(\mathbf{k})$ электронной функции Грина $\langle\langle a_{\mathbf{k}\sigma} | a_{\mathbf{k}\sigma}^+ \rangle\rangle$, соответствующие полюсам $E^i(\mathbf{k})$. Вычет функции Грина $\underline{Z}_{1,1}^{(1)}(\mathbf{k})$, соответствует полюсу $\underline{E}^{(1)}(\mathbf{k})$ приближения локального полярона

Отметим, что зависимость спектра возбуждений спинового полярона ϵ_l от корреляционной функции $M = \langle \mathbf{S}_{\mathbf{Q}} \mathbf{S}_{\mathbf{Q}} \rangle$ проявляется только при учете Q-поляронных состояний $A_{\mathbf{T},3}, A_{\mathbf{T},4}$. Для определения спектра $\epsilon(\mathbf{k})$ необходимо знать спиновые корреляционные функции $\langle \mathbf{S}_{\mathbf{R}_1} \mathbf{S}_{\mathbf{R}_2} \rangle$. Они вычислены нами, как в [14]. В частности, при $T = 0$ были получены следующие численные величины спиновой корреляционной функции: $\langle \mathbf{S}_{\mathbf{R}} \mathbf{S}_{\mathbf{R}+\mathbf{g}} \rangle = -0.332$, $\langle \mathbf{S}_{\mathbf{R}} \mathbf{S}_{\mathbf{R}+\mathbf{g}} \rangle = -0.145 + M$, $\langle \mathbf{S}_{\mathbf{R}} \mathbf{S}_{\mathbf{R}+\mathbf{g}} \rangle = -0.144 + M$, $M = 0.0577$. При этом использовались следующие значения параметров модели: $\tau = 1$, $\tau_{2g} = 0.5\tau$, $\tau_d = \tau_{2g}$, $\tau_g = -\tau_{2g}$, $J = 5\tau_{2g}$, $I = 0.5\tau_{2g}$, которые выбраны таким образом, чтобы минимум нижней зоны находился около точки $(\pi/2, \pi/2)$. Значение параметра L , задающего для операторов $A_{\mathbf{q},5(6)}$ область Ω выбиралась вариационным

образом для каждого \mathbf{k} в зоне Бриллюэна. Оказалось, что область Ω сильно зависит от \mathbf{k} , например $L(0,0) = 0.05\pi$ и $L(\pi, \pi) = 0.35\pi$. Вычисления проводились в пределе малого допирования, $n \ll 1$, n – полное число носителей на одну ячейку. Случай 2 представлен температурой $T = 0.1I$, что отвечает корреляционной длине $\xi = 40$ постоянных решетки.

Результаты для наиболее интересных нижних зон $\epsilon_l(\mathbf{k})$ для \mathbf{k} вдоль симметричного направления $\Gamma(=0,0) - M(=\pi, \pi)$ представлены на рис.1,2 соответственно для случаев 1,2. На рис.3 изображены эквизнергетические поверхности первой зоны. Как видно из рис.1а и рис.2а, минимум нижней зоны в обоих случаях находится около точки $(\pi/2, \pi/2)$, что характерно для модели Эмери, и соответствует экспериментально наблюдаемому спектру [15]. Как видно из этих рисунков, случаи $T = 0$ и $T \neq 0$ похожи, за исключением исчезновения второй зоны в случае 2, когда нет дальнего порядка.

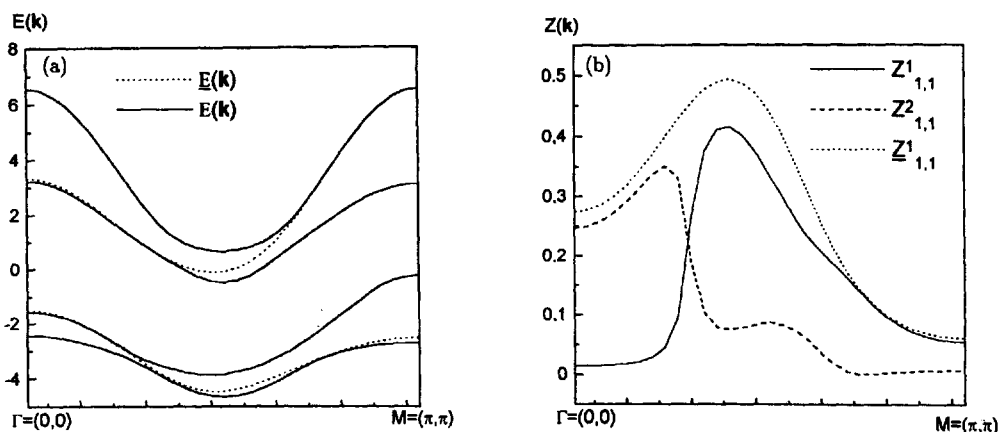


Рис.2. а) Спектр квазичастичных возбуждений $E^{(i)}(k)$ при $T = 0.1I$ вдоль симметричного направления $k = k_x = k_y$; $\underline{E}^{(i)}(k)$ – приближение локального полярона. б) Вычеты $Z_{1,1}^{(i)}(k)$ электронной функции Грина $\ll a_{k\sigma}^+ | a_{k\sigma}^+ \gg$, соответствующие полюсам $E^{(i)}(k)$. Вычет функции Грина $\underline{Z}_{1,1}^{(1)}(k)$, соответствует полюсу $\underline{E}^{(1)}(k)$ приближения локального полярона

На рис.1б и рис.2б представлены числа заполнения голыми носителями в зависимости от \mathbf{k} для случаев $T = 0$ и $T \neq 0$, соответственно. Вторая зона для случая $T = 0$ имеет несущественные вычеты, и с точностью до ее наличия рисунки схожи. Следовательно набор операторов $A_{1,2,3,4}$ при $T = 0$ адекватно заменяется на набор операторов $A_{1,2,5,6}$ при исчезновении дальнего порядка.

Обратим внимание, что результаты наших вычислений в рамках метода Мори – Цванцига для нижней зоны качественно совпадают с результатами вычисления когерентной части спектральной функции $A(\mathbf{q}, \omega) = -(1/\pi)\text{Im}G_{11}$ методом самосогласованного борновского приближения [16], в частности, оба метода описывают эффект "shadow band" [11, 12], согласно которому каждому когерентному пику спектральной функции соответствует пик с той же энергией, но с волновым вектором, равным $\mathbf{q} + \mathbf{Q}$, если движение электрона происходит на фоне неэлевского состояния с удвоенным периодом решетки. В случае сферически симметричного спинового состояния

расстояние между обоими пиками только приблизительно равно Q , и, главное, высоты пиков (то есть соответствующие вычеты) различаются по величине (на рис.3 вычет в точке $P_1 = 0.4$, а в точке $P_2 = 0.2$). Важно, что эффект "shadow band" не исчезает при $T \neq 0$.

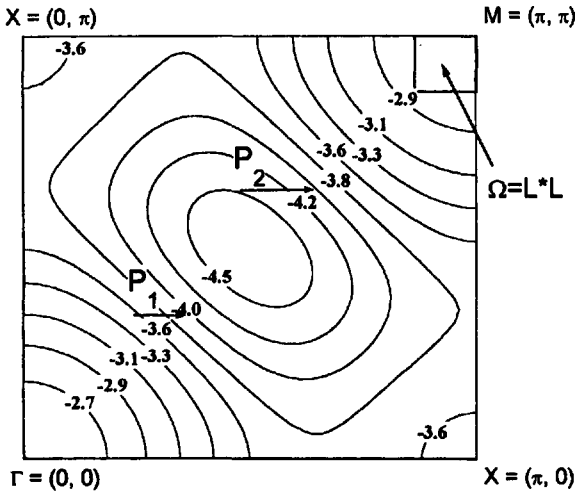


Рис.3. Эквиэнергетические поверхности нижней зоны $E^{(1)}(\mathbf{k})$ при $T = 0.1I$

Заметим также, что отличия вычетов нижней зоны на рисунках 1b и 2b от единицы приводит к резкому нарушению теоремы Латтинжера. Например, если в нашей модели под уровнем Ферми $\epsilon = -4.0$ (см. рис.3) число состояний равно 0.16, то для случая такого же одноэлектронного спектра в модели сильной связи это число состояний было бы равным 0.50.

Интересно, что качественно вид зон, как показывают наши вычисления, сохраняется вплоть до температур, при которых спиновая корреляционная длина ξ уменьшается до 3–6 постоянных решетки.

Эта работа была поддержана Международной ассоциацией содействия сотрудничества с учеными государств бывшего Советского Союза и Российским фондом фундаментальных исследований (гранты INTAS-RFBR 95-0591; РФФИ 98-02-1787, 96-15-906708 и 98-02-16730) и Российской национальной программой сверхпроводимости (грант 93080).

1. E.Dagotto, Rev. Mod. Phys. **66**, 763 (1994).
2. W.Brenig, Physics Reports **251**, 4 (1995).
3. V.J.Emery, Phys. Rev. Lett. **58**, 2794 (1987).
4. F.C.Zhang and T.M.Rice, Phys. Rev. **B37**, 3759 (1988).
5. A.F.Barabanov, L.A.Maksimov, and G.V.Uimin, Pisma v Zh.ETF **47**, 532 (1988) [JETP Lett. **47**, 622 (1988)]; ZhETF **96**, 655 (1989) [JETP **69**, 371 (1989)]; A.F.Barabanov, R.O.Kuzian, and L.A.Maksimov, J. Phys. Cond. Matter **3**, 9129 (1991).
6. A.F.Barabanov, R.O.Kuzian, and L.A.Maksimov, ЖЭТФ **111**, 1758 (1988); Phys. Rev. **B55**, 1015 (1977).
7. J.R.Schrieffer, J. Low. Temp. Phys. **99**, 397 (1995).
8. A.F.Barabanov, E.Zasinas, O.V.Urazaev, and L.A.Maksimov, Pisma v ZhETF **66**, 173 (1997) [JETP Lett. **66**, 182 (1997)].

9. L.A.Maksimov, A.F.Barabanov, and R.O.Kuzian, Phys. Lett. **A232**, 286 (1997); L.A.Maksimov, R.Hain, and A.F.Barabanov, Phys. Lett. **A238**, 288 (1998).
10. P.Prelovshek, Phys. Lett. **A126**, 287 (1988); A.Ramsak and P.Prelovshek, Phys. Rev. **B42**, 10415 (1990).
11. A.P.Kampf and J.R.Schrieffer, Phys. Rev. **B42**, 7967 (1990).
12. P.Aebi, J.Osterwalder, P.Schwaller et al., Phys. Rev. Lett. **74**, 1885 (1995).
13. H.Mori, Prog. Theor. Phys. **33**, 423 (1965).
14. A.F.Barabanov and O.A.Starykh, J. Phys. Soc. Jpn. **61**, 704 (1992); A.Barabanov and V.M.Berezovsky, Zh.ETF **106**, 1156 (1994) [JETP **79**, 627 (1994)]; J. Phys. Soc. Jpn. **63**, 3974 (1994); Phys. Lett. **A186**, 175 (1994).
15. B.O.Wells, Z.-X.Shen, A.Matsuura et al., Phys. Rev. Lett. **74**, 964 (1995).
16. R.O.Kuzian, A.F.Barabanov, and L.A.Maksimov, Phys. Rev. B, 1998, to be published.