

СТРУКТУРА ЛОКАЛЬНОГО ПОЛЯРОНА В МОДЕЛИ ЭМЕРИ

Козлов П. А.¹, Макаров И. А.², Шнейдер Е.И.^{2,3}

научный руководитель д-р физ.-мат. наук Овчинников С. Г.^{1,2}

¹*Сибирский федеральный университет*

²*Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения
Российской академии наук*

³*Сибирский государственный аэрокосмический университет*

Несмотря на ряд очевидных успехов в исследовании высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) в семействе слоистых купратов, основной вопрос о механизме ВТСП остаётся открытым до нынешнего времени. Как следствие, отсутствует единая теория, адекватно описывающая в целом данный класс веществ, а не только их отдельные свойства. Характерными особенностями купратов, которые выделили их в отдельный класс сверхпроводников и подвигли к поиску новых механизмов куперовского спаривания, стали: высокая температура сверхпроводящего перехода, d – тип симметрии параметра порядка и аномальные свойства нормального состояния.

В настоящее время в литературе существуют две крайние и игнорирующие друг друга точки зрения на природу ВТСП в купратах. Согласно первой, сильные электронные корреляции (СЭК) определяют электронные свойства и механизм спаривания. Согласно второй, сильно электрон-фононное взаимодействие (ЭФВ) и поляронные (биполяронные) эффекты могут объяснить основные свойства ВТСП купратов. Очевидно, что в ВТСП купратах присутствуют как эффекты СЭК, так и сильного ЭФВ. Проблема их одновременного учёта является актуальной нерешенной задачей.

Учёт ЭФВ в рамках обобщенного метода сильной связи (ГТВ), включающего СЭК, в работах [1,2] привел к выводу о том, что вклады в T_c магнитного и фононного механизмов спаривания – величины одного порядка. В этих работах ЭФВ учитывалось по теории возмущений в духе теории Бардина – Купера – Шриффера (БКШ), что неприменимо для сильного ЭФВ. Другая попытка объединить СЭК и сильное ЭФВ была предложена в работе [3], где модель Эмери с сильным ЭФВ рассматривается в рамках кластерной теории возмущений. Полученный гамильтониан разбивался на сумму внутрикластерных H_c и межкластерных H_{cc} слагаемых, проводилась точная диагонализация внутрикластерного гамильтониана H_c . В этом подходе многоэлектронные собственные состояния H_c являются состояниями локальных поляронов (с учётом смещений ионов кислорода внутри CuO_4 кластера). Учёт межкластерных перескоков и исследование зонной структуры поляронов не был сделан в работе [3].

В настоящей работе мы строим X -операторы Хаббарда на локальных поляронных состояниях CuO_4 кластера, что даёт возможность записать гамильтониан H_{cc} в виде эффективных перескоков в обобщённой многозонной модели Хаббарда. Тем самым, сильное ЭФВ включено в схему ГТВ. Мы начинаем построение нашей модели, используя трёхзонную p - d модель для описания электронной структуры, а так же включаем фононную часть, описывающую две наиболее важные кислородные моды колебаний, а именно – дыхательную и изгибную, а так же локальное и нелокальное ЭФВ. Мы выполняем каноническое преобразование для электронной и фононной частей, что позволяет решить проблему неортогональности молекулярных орбиталей соседних ячеек с общим анионом и в дальнейшем рассматривать ячейки с

ортогональными волновыми функциями. Далее мы строим на полученных собственных поляронных состояниях X-операторы Хаббарда, и переписываем межъядерную часть гамильтониана в терминах X-операторов Хаббарда. В результате полный гамильтониан взаимодействующих электронов и фононов в поляроном представлении точно записывается как гамильтониан многоорбитальной модели Хаббарда. Мы начинаем с записи гамильтониана модели взаимодействующих электронов и фононов для для двумерной квадратной решетки

$$H = \sum_i \left\{ \varepsilon_d + \sum_l [(-1)^{S_l} \lambda_d u_l + \lambda_a z_l] \right\} n_i^d + \sum_j \varepsilon_p n_j^p + \sum_i U_d n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} + \quad (1)$$

$$+ \sum_{i,l,\sigma} (-1)^{M_l} [t_{pd} - (-1)^{S_l} \lambda_{dp} u_l] (d_{i,\sigma}^{\dagger} p_{l,\sigma} + H.c) + \sum_{j,k,\sigma} (-1)^{N_{jk}} t_{pp} (p_{j,\sigma}^{\dagger} p_{k,\sigma} + H.c)$$

$$+ \frac{m}{2} \sum_j (\dot{u}_j^2 + \omega_b^2 u_j^2 + \dot{z}_j^2 + \omega_a^2 z_j^2)$$

Здесь индекс i пробегает по всем атомам Cu \mathbf{r}_i тетрагональной решётки CuO₂ плоскости с примитивными векторами \mathbf{a} и \mathbf{b} , индексы j и k пробегают по всем атомам кислорода, а индекс l нумерует совокупность четырёх атомов кислорода вокруг \mathbf{r}_i , находящихся в положениях $\mathbf{r}_i \pm \mathbf{a}/2$ и $\mathbf{r}_i \pm \mathbf{b}/2$. Операторы $d_{i,\sigma}^{\dagger}$ и $p_{i,\sigma}^{\dagger}$ ($d_{i,\sigma}$ и $p_{i,\sigma}$) рождения (уничтожения) дырок на $3d_{x^2-y^2}$ орбиталях на Cu и p_{σ} орбиталях на O, соответственно, $n_i^d = d_{i,\sigma}^{\dagger} d_{i,\sigma}$ и $n_j^p = p_{i,\sigma}^{\dagger} p_{i,\sigma}$ операторы числа частиц со спинами $\sigma = \uparrow$ или \downarrow . Параметры ε_d и ε_p - собственные внутри ионные энергии на Cu и O, t_{pp} и t_{pd} - интегралы перескока между ближайшими соседними атомами O-O и Cu-O соответственно, U_d - внутриатомная энергия кулоновского отталкивания на меди. Числа M_l и $N_{jk} = 0$ или 1, согласно выбранным фазовым условиям. Введём бозонное представление для фононной части гамильтониана следующей стандартной подстановкой

$$u_l = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_b}} (e_l^{\dagger} + e_l) = \xi_d (e_l^{\dagger} + e_l), \quad (2a)$$

$$z_l = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_a}} (f_l^{\dagger} + f_l) = \xi_a (f_l^{\dagger} + f_l), \quad (2b)$$

где e и f линейные операторы Бозе типа. Тот вид, в котором мы записали наш гамильтониан, неудобен для описания решётки состоящей из кластеров, потому что каждый ион кислорода принадлежит сразу двум кластерам и возникает проблема неортогональности состояний в соседних ячейках. Для устранения этой проблемы необходимо явно построить функции Ванье вместо молекулярных орбиталей. Данная процедура была предложена для трёхзонной $p-d$ модели в работах [4,5] В результате Гамильтониан может быть записан в форме $H = H_c + H_{cc}$, где $H_c = \sum_i h_{i0}$ представляет из себя Гамильтониан невзаимодействующих кластеров, h_{i0} Гамильтониан i -ого кластера, а H_{cc} описывает межкластерное взаимодействие. В таком представлении большая часть ЭФВ и СЭК уже включена в H_c . Более того, внутрикластерные кулоновское и электрон-фононное взаимодействия рассматриваются на равных и точно, в отличие от более привычных адиабатического или антиадиабатического приближений.

Для базовой $p-d$ модели электронной подсистемы, мы взяли «стандартный набор» параметров, т. е. $t_{pd} = 1,3$ эВ, $t_{pp} = 0,65$ эВ, $\varepsilon_p - \varepsilon_d = 3,5$ эВ, $U = U_d = 9$ эВ. Фононные энергии принимают значения $\hbar\omega_a = 0,1$ эВ и $\hbar\omega_b = 0,05$ эВ для дыхательной

и изгибной мод, соответственно. Коэффициенты ЭФВ λ_d и λ_{dp} точно не известны, мы рассматриваем их в качестве эмпирических параметров. Расчетная сила связи, связанная с дыхательной модой имеет значения порядка $\lambda_d \cong 3$ эВ/Å

При анализе локальных состояний кластера поляронный характер системы проявляется в распределении веса фоновых состояний в основном состоянии. Вероятность N -фоонного состояния рассчитывается путем прямого суммирования

$$P(N) = \sum_{\mu} |\phi_{\mu,N}|^2. \quad (3)$$

Здесь $\phi_{\mu,N}$ есть коэффициент полученный в ходе точной диагонализации. Для наглядности построим графики распределения статистического веса для основных состояний гильбертовых подпространств с одной и двумя дырками. На рис 1. приведён случай для однодырочного сектора. Как видно, с ростом параметра ЭФВ состояние меняет свой характер чисто электронного к ярко выраженному полярному (максимум распределения приходится на состояние с 2-мя фононами при $\lambda=3$ эВ.Å).

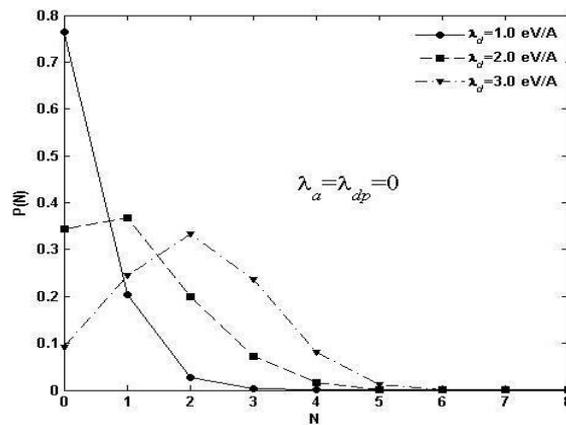


Рис. 1. Графики распределения плотности вероятности фононов для основного состояния (однодырочный сектор)

В случае двухдырочного сектора рис 2. в общем картина повторяется, но нужно заметить что при аналогичных значениях параметра λ_d поляронный характер состояния выражен несколько слабее (максимум распределения при максимальном значении параметра ЭФВ приходится на состояние с 1 фононом).

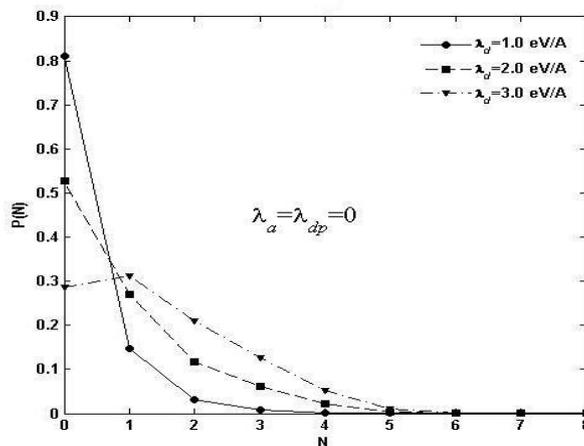


Рис.2 . Графики распределения плотности вероятности фононов для основного состояния (двухдырочный сектор)

На основе полученных собственных поляронных состояний мы строим X – операторы Хаббарда. В общем виде выражение для фермиевских операторов уничтожения дырок для нашей модели можно записать в следующем виде

$$a_{f\sigma} = \sum_{ik} \gamma_{ik}^{1,a} X_f^{(0,k)(1\sigma,i)} + \sum_{ij} \gamma_{ij}^{2,a} X_f^{(1\bar{\sigma},i)(2,j)}, \quad (4)$$

где оператор $a_{f\sigma}$ принимает значение $d_{f\sigma}$ или $b_{f\sigma}$. Всю совокупность возбуждений с изменением числа фермионов можно разбить на две части, что видно из (4). Здесь первое слагаемое описывает все возможные переходы из однодырочного сектора в вакуумный, а второе, соответственно, из двухдырочного в однодырочный.

Далее выполняем такую же операцию для бозе – операторов. Общее выражение перехода от бозе к X -операторам записывается в следующем виде

$$A_f = \sum_{kk'} \gamma_{kk'}^{0,A} Z_f^{(0,k)(0,k')} + \sum_{ii'} \gamma_{ii'}^{1,A} Z_f^{(1\sigma,i)(1\sigma,i')} + \sum_{jj'} \gamma_{jj'}^{2,A} Z_f^{(2,j)(2,j')} \quad (5)$$

Из-за конечного числа фононов, включаемых в рассмотрение, мы должны ввести следующее правило, при $k, i, j = N + 1$, $\gamma = 0$, которое исключит из рассмотрения состояния с большим числом фононов.

Операторам рождения/уничтожения бозе типа соответствуют возбуждения внутри секторов гильбертова пространства не меняющие числа фермионов. Каждое слагаемое в (5) отвечает соответствующим переходам внутри вакуумного, однодырочного и двухдырочного секторов.

Перепишем гамильтониан полной модели электронов и фононов с сильными взаимодействиями в поляронном представлении. А именно

$$H = \sum_n \varepsilon_n X_i^{nn} + \sum_{\alpha\beta} V_{ij}^{\alpha\beta} X_i^{+\alpha} X_j^{\beta}, \quad (6)$$

где ε_n – собственная энергия n -ого кластера, α и β – корневые вектора построенные на собственных внутри ячеечных поляронных состояниях, X^+ , X – операторы Хаббарда, рождения и уничтожения соответственно.

Матрица $V_{ij}^{\alpha\beta}$ включает в себя межячеечное взаимодействие. Явное построение X – операторов Хаббарда, а также вычисление матрицы V , позволяют сделать в дальнейшем следующий шаг, на пути построения данной модели, а именно запись и решение уравнения движения и построение дисперсионных зависимостей электронной структуры.

1. С.Г Овчинников, Е.И. Шнейдер. ЖЭТФ **128**, 974 (2005).
2. Е.И. Шнейдер, С.Г. Овчинников. ЖЭТФ **136**, 1177 (2009).
3. P.Piekarz, J.Konior, J.H.Jefferson. Phys.Rev. **B 59**, 14697 (1999).
4. B.S. Shastry, Phys. Rev. Lett. **63**, 1288 (1989).
5. J.H. Jefferson, Physica **B 165-166**, 1013 (1990).