

На правах рукописи

Шнейдер Елена Игоревна

ФОНОННЫЙ И ОБМЕННЫЙ МЕХАНИЗМЫ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ В
КУПРАТАХ В РЕЖИМЕ СИЛЬНЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ.

01.04.07 – физика конденсированного состояния

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Красноярск-2006

Работа выполнена в Институте физики им. Л.В. Киренского СО РАН

Научный руководитель: профессор, доктор физико-математических наук
Овчинников С.Г.

Официальные оппоненты: профессор, доктор физико-математических наук
Зиненко В.И.,
доцент, кандидат физико-математических наук
Валькова Т.А.

Ведущая организация: Институт физики металлов УрО РАН
Г. Екатеринбург

Защита состоится «_____» _____ 2006 г. в _____ час. на
заседании диссертационного совета Д 003.055.02 при Институте физики им.
Л.В. Киренского СО РАН по адресу: 660036, г. Красноярск, Академгородок,
Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке Института физики
им. Л.В. Киренского СО РАН.

Автореферат разослан «_____» _____ 2006 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,
доктор физико-математических наук

Аплеснин С.С.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Несмотря на то, что изучение высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) в купратах продолжается уже третье десятилетие, основной вопрос о механизме СП спаривания является открытым. Как следствие, до сих пор не существует адекватной модели, которая позволила бы описать совокупность разнообразных физических свойств ВТСП материалов, а не их отдельные характеристики. Как правило, рассматриваются магнитный и фононный механизмы спаривания [1]. На первый указывают высокие критические температуры СП перехода, сильные электронные корреляции (СЭК) и d -тип симметрии параметра порядка. Существенную роль электрон-фононного взаимодействия (ЭФВ) подтверждают особенности кристаллохимического строения и целый ряд экспериментальных исследований (изотоп-эффект, комбинационное рассеяние и инфракрасное поглощение света, рассеяние нейтронов, туннельная спектроскопия, фотоэмиссионная спектроскопия с угловым разрешением). Как известно, теории, в основе которых лежит магнитный механизм сверхпроводимости, дают слишком высокие значения критической температуры перехода. В то же время, традиционный подход, основанный на уравнениях Элиашберга с изотропным электрон-фононным спариванием, не может объяснить большую часть сверхпроводящих свойств рассматриваемых материалов, например, сильную анизотропию энергетической щели [1]. Трудности теоретического описания ВТСП купратов связаны не только с разнообразием их физических свойств, но также с особенностями электронной структуры. В режиме сильных электронных корреляций, то есть для составов с концентрацией носителей вплоть до оптимальной, методы стандартной зонной теории возмущений оказываются неприменимыми.

Очевидно, что для прояснения природы ВТСП систем необходимо исследовать сверхпроводящее состояние в пределе СЭК, учитывая как взаимодействие электронов с магнитными возбуждениями, так и нелокальное ЭФВ. К сожалению, в настоящее время имеется немного работ, посвященных

данной проблеме. И сказанное выше, объясняет, почему. Как правило, рассматривается $t-J$ модель с локальным взаимодействием электронов с некой оптической модой. Между тем, для обсуждения многих свойств нормального и сверхпроводящего состояний, например, симметрии параметра порядка, важно учитывать анизотропию ЭФВ. Исходя из этого, были сформулированы следующие цели и задачи.

Цель работы: исследовать фононный и обменный механизмы сверхпроводимости в купратах в режиме сильных электронных корреляций.

Задачи:

1. Поскольку все вычисления в дальнейшем ведутся в приближении Хаббард-I, необходимо сравнить результаты описания электронной структуры в системах с СЭК в рамках данного приближения с результатами численного метода.
2. Последовательно вывести гамильтониан ЭФВ, исходя из многозонной $p-d$ модели купратов в режиме сильных корреляций с реалистичным описанием фононов, наиболее сильно взаимодействующих с электронами.
3. Получить эффективный низкоэнергетический гамильтониан, содержащий магнитный и фононный механизмы спаривания.
4. В приближении среднего поля построить теорию сверхпроводимости с учетом магнитного и фононного механизмов спаривания.

Научная новизна:

1. Электронная структура двумерной модели Хаббарда с половинным заполнением, рассчитанная в рамках приближения Хаббард-I, сопоставлена с данными численного метода квантового Монте-Карло (КМК).

2. Показано, что квазичастичный спектр в модели Хаббарда с антиферромагнитным упорядочением может быть переписан через решение для парамагнитной фазы. При этом оказывается, что дисперсия антиферромагнитного состояния имеет вид, аналогичный закону дисперсии электронов в состоянии волны спиновой плотности.
3. Рассмотрен последовательный вывод гамильтониана ЭФВ в ВТСП купратах в режиме сильных корреляций на основе реалистичной многозонной $p-d$ модели купратов. Получена низкоэнергетическая $t-J^*$ модель с фононами, содержащая, наряду с электрон-фононным, и спин-фононное взаимодействие.
4. Сформулирован эффективный гамильтониан электрон-электронного взаимодействия, обусловленного обменом виртуальными фононами. Показано, что в отличие от аналогичного взаимодействия слабо коррелированных электронов эффективное ЭФВ в режиме СЭК зависит от чисел заполнения и через них от концентрации, температуры и магнитного поля.
5. Для систем с СЭК в приближении среднего поля получены уравнения, описывающие сверхпроводящее состояние типа БКШ с учетом как обменного, так и электрон-фононного механизмов спаривания.
6. Показано, что в системах с СЭК константа связи, помимо слагаемых, описывающих обменный и фононный механизмы спаривания, содержит также спин-жидкостный вклад. Происхождение последнего обусловлено интерференцией магнитного и фононного механизмов сверхпроводимости.
7. Показано, что в системе $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ ЭФВ может подавлять критическую температуру СП перехода, обусловленную магнитным механизмом спаривания.

Научная и практическая ценность. На основе реалистичной многозонной $p-d$ модели купратов сформулирована эффективная низкоэнергетическая

модель сильно коррелированных электронов, взаимодействующих с фононами. В пределе СЭК получен гамильтониан типа Фрелиха, описывающий эффективное ЭФВ. В приближении среднего поля получены основные уравнения теории сверхпроводимости типа БКШ с учетом магнитного и фононного механизмов спаривания. Показано, что константа связи СП параметра порядка содержит спин-жидкостный вклад, обусловленный ближним магнитным порядком в системе. Рассмотрена конкуренция обменного и электрон-фононного механизмов сверхпроводимости в ВТСП системах.

Достоверность результатов достигнута применением реалистичной $p-d$ модели купратов, использованием адекватного для систем с СЭК метода обобщенной сильной связи [2], а также применением физически обоснованного приближения, учитывающего ближний магнитный порядок за пределами расщепления Хаббард-I. Совпадение матричных элементов ЭФВ для отдельных мод с результатами, полученными в работах [3, 4], также подтверждает достоверность результатов.

Положения, выносимые на защиту.

1. Сравнение с результатами численного квантового метода Монте-Карло показывает, что приближение Хаббард-I в антиферромагнитной фазе качественно верно воспроизводит особенности квазичастичного спектра и плотности состояний для систем с половинным заполнением в пределе СЭК. Найдено, что закон дисперсии электронов в антиферромагнитном состоянии может быть выражен через спектр немагнитной фазы в виде аналогичном закону дисперсии для электрона в состоянии волны спиновой плотности.
2. В рамках обобщенного метода сильной связи построен гамильтониан ЭФВ с учетом СЭК. Найдена зависимость от волновых векторов диагональных и недиагональных по узлам решетки матричных элементов

электрон-фононного взаимодействия для трех мод фононов: дыхательной, апиической дыхательной и изгибной.

3. Построен эффективный низкоэнергетический гамильтониан купратов, описывающий магнитные и электрон-фононные возбуждения в системе в пределе СЭК.
4. В обобщенном приближении Хартри-Фока исследовано сверхпроводящее состояние типа БКШ с учетом обменного и электрон-фононного механизмов спаривания в купратах.

Апробация работы. Основные результаты данной работы обсуждались на международных конференциях: «Международная конференция по магнетизму» ICM-2005 и ICM-2006 (Австрия, Вена – 2005, Япония, Киото - 2006), XXX и XXXI Международные зимние школы физиков-теоретиков «Коуровка-2004» и «Коуровка-2006» (Россия, Кыштым – 2004, 2006), Евро-Азиатский симпозиум «Прогресс в магнетизме» (Россия, Красноярск - 2004), «Фундаментальные проблемы сверхпроводимости» ФПС'06 (Россия, Звенигород); на всероссийских конференциях: «33-е Всероссийское Совещание по Физике Низких Температур» НТ-33 (Екатеринбург - 2003), «Всероссийская научная конференция студентов-физиков и молодых ученых» ВНКСФ-9 (Красноярск - 2003), на Сибирских семинарах по высокотемпературной сверхпроводимости ОКНО (Новосибирск, 2003, 2006; Красноярск, 2004; Омск, 2005), на конференции молодых ученых КНЦ СО РАН (Красноярск 2005), а также докладывались на научных семинарах Института физики им. Л.В. Киренского СО РАН.

Публикации: Основные результаты диссертации изложены в 14 печатных трудах, из них 6 статей в центральных рецензируемых журналах и 7 работ в трудах международных конференций.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы, изложена на 95 страницах, включая 31 рисунок. Список цитируемой литературы содержит 120 наименований.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ.

В первой главе содержится краткое введение в основные проблемы современной теории ВТСП, здесь же показана актуальность представленной работы. Обзор приведенных экспериментальных фактов можно разделить на два класса: первые указывают на особенности электронной структуры ВТСП купратов, как систем с СЭК. Вторые отражают эффекты сильного ЭФВ как в свойствах нормального, так и сверхпроводящего состояний. Далее рассмотрены возможности первопринципных подходов при исследовании ВТСП материалов, а также базовые модели в теории сильно коррелированных систем. Показано, что для адекватного описания купратов необходимо использовать реалистичную многозонную $p-d$ модель с учетом нелокального ЭФВ. В конце первой главы изложены основные положения и преимущества обобщенного метода сильной связи, позволяющего рассчитывать зонную структуру с явным учетом сильных электронных корреляций. Последний параграф первой главы содержит постановку задачи.

Поскольку в дальнейшем все расчеты ведутся в приближении Хаббард-I, то **во второй главе** сопоставляются свойства квазичастиц модели Хаббарда, полученные в данном приближении и в численном методе КМК [5]. Выбор модели объясняется тем, что в рамках ГТВ метода многозонная $p-d$ модель купратов в низкоэнергетическом пределе тождественна модели Хаббарда. Сравнение результатов показывает, что для систем с половинным заполнением приближение Хаббард-I в антиферромагнитной фазе качественно верно воспроизводит особенности электронной структуры сильно коррелированных систем. А именно, в магнитно-упорядоченной фазе каждая хаббардовская зона

парамагнитного состояния расщепляется на две подзоны $E_{\pm}^{l,u}$. При этом одна из подзон имеет наибольший спектральный вес, другая выглядит как слабый сателлит. Нетривиальным

результатом, полученным как в методе КМК, так и в приближении Хаббард-I,

является перераспределение спектрального веса между сильными и слабыми пиками. Тенденции перераспределения спектрального веса в наших и КМК расчетах совпадают (рис. 1), при этом в некоторых областях зоны Бриллюэна (вблизи $k=(0,0)$ и $k=(\pi,\pi)$) наблюдается разумное согласие в форме и расположении пиков $A(\mathbf{k},\omega)$, в других же точках k -пространства ($k=(\pi/2,\pi/2)$ и $k=(\pi,0)$) имеется существенное отличие. Сопоставление одноэлектронной

плотности $N(E)$ состояний показывает, что функция $N(E)$ в приближении Хаббард-I, так же как и рассчитанная в методе КМК [6], имеет два пика, соответствующих занятой (l) и незаполненной (u) хаббардовским зонам (рис. 2). При этом слабые сателлиты, наблюдаемые в спектральной плотности состояний, приводят к образованию плечей у обоих пиков.

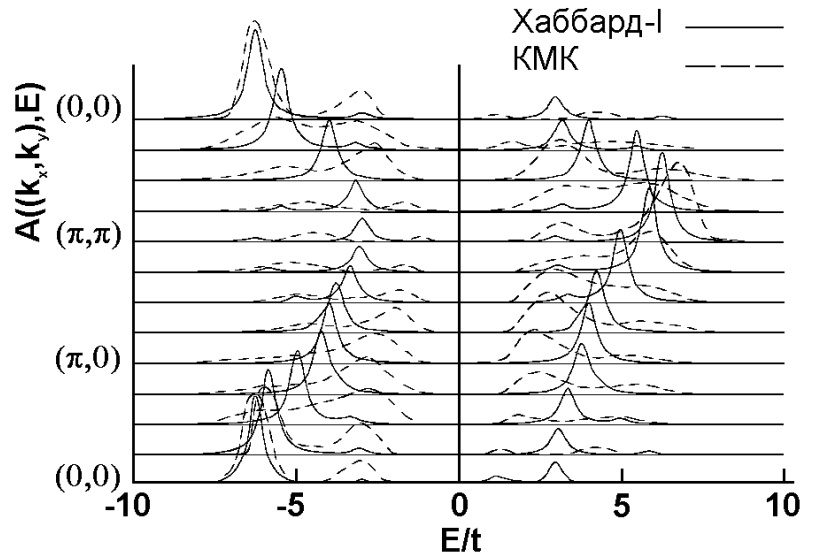


Рис. 1. Спектральные функции модели Хаббарда с антиферромагнитным упорядочением, $m=0.3$.

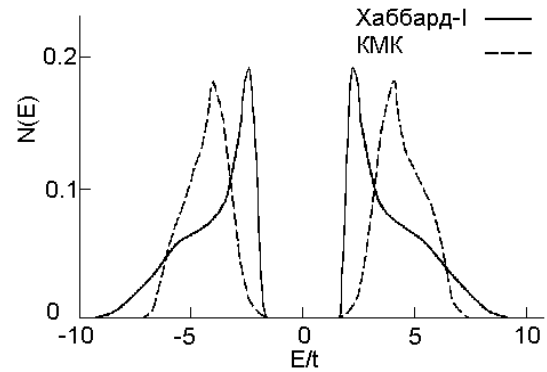


Рис. 2. Плотность состояний в модели Хаббарда с половинным заполнением.

Далее рассмотрено влияние t' -перескока на формирование электронной структуры в модели Хаббарда. Показано, что учет перескока во вторую координационную сферу приводит к появлению дополнительных квазичастичных пиков спектральных функций в направлении $(\pi, 0) \rightarrow (\pi/2, \pi/2)$ зоны Бриллюэна.

Во второй главе также продемонстрировано, что в случае половинного заполнения квазичастичный спектр модели Хаббарда с антиферромагнитным упорядочением может быть переписан через хорошо известное решение для парамагнитной фазы. При этом оказывается, что дисперсия антиферромагнитного состояния $E_{\pm}^{l,u}$ имеет вид, аналогичный закону дисперсии для электрона в состоянии волны спиновой плотности:

$$E_{\pm}^{l,u}(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{(\xi_{\mathbf{k}}^{l,u})^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2},$$

где $\Delta_{\mathbf{k}} = Um$ - параметр щели; $\xi_{\mathbf{k}}^{l,u}$ - дисперсия верхней и нижней хаббардовских зон в парамагнитной фазе с перенормированной величиной параметра кулоновского отталкивания $\tilde{U} = U\sqrt{1-4m^2}$, m - намагниченность подрешеток.

В третьей главе показано, что в рамках обобщенного метода сильной связи гамильтониан ЭФВ в купратах, полученный на основе реалистичной $p-d$ модели в пределе СЭК, имеет вид:

$$H_{el-ph} = \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}\nu} \sum_{mm'} V_{mm'}^{(\nu)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) X_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^m X_{\mathbf{k}}^{m'} (b_{\mathbf{q},\nu} + b_{-\mathbf{q},\nu}^+), \quad (1)$$

$$V_{mm'}^{(\nu)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \delta_{mm'} V_{dia,m}^{(\nu)}(\mathbf{q}) + V_{off,mm'}^{(\nu)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}).$$

Где $X_{\mathbf{k}}^m$ - оператор Хаббарда, соответствующий квазичастичному возбуждению $m \rightarrow (p, q)$ с импульсом \mathbf{k} ; $|p\rangle$ и $|q\rangle$ - собственные состояния гамильтониана для CuO_6 -кластера; $b_{\mathbf{q},\nu}^+$ ($b_{\mathbf{q},\nu}$) - оператор рождения (уничтожения) фонона с импульсом \mathbf{q} и номером моды ν ; $V_{mm'}^{(\nu)}(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ - матричный элемент ЭФВ, состоящий из диагонального (в узельном представлении) $V_{dia,m}^{(\nu)}(\mathbf{q})$ и

недиагонального $V_{off,mm'}^{(\nu)}(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ вкладов. Полный гамильтониан H_{tot} , описывающий электронную структуру купратов в режиме СЭК с учетом ЭФВ, дается суммой H_{el-ph} и H_{el} , где H_{el} - многозонная модель Хаббарда.

Для анализа анизотропии СП параметра порядка и потенциала спаривания, обусловленного ЭФВ, необходимо принимать во внимание анизотропию ЭФВ. Поэтому, учитывая представленные в обзорной главе экспериментальные и теоретические исследования ЭФВ в купратах, были отобраны три моды

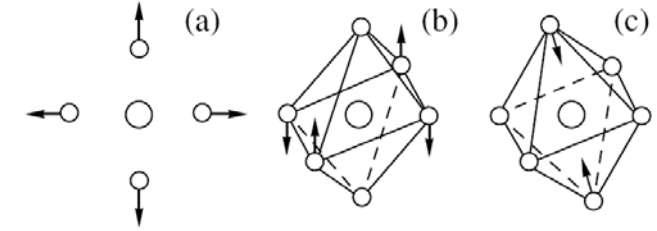


Рис. 3. Смещения атомов кислорода в CuO_6 -октаэдре для дыхательной (a), изгибной (b) и асимметричной дыхательной мод (c).

фононов, наиболее сильно взаимодействующих с электронами (рис. 3); и на основе анализа смещений атомов в каждой моде, получены явные зависимости матричных элементов ЭФВ от входящего и переданного импульсов.

Для удобства исследования ЭФВ в системах с СЭК далее, исходя из гамильтониана H_{tot} , сформулирована низкоэнергетическая $t-J^*$ модель с фононами H_{eff}^* . Показано, что H_{eff}^* содержит, помимо электрон-фононного, также и спин-фононное взаимодействия:

$$H_{eff} = H_{t-J^*} + H_{ph}^0 + H_{el-ph} + H_{sp-ph} + H_{el-ph}^{(3)}. \quad (2)$$

Где H_{t-J^*} - гамильтониан $t-J$ модели с учетом трехцентровых перескоков, (последние существенно ренормируют квазичастичный спектр [7]); H_{ph}^0 - описывает свободные фононы $H_{ph}^0 = \sum_{\mathbf{q}, \nu} \omega_{\mathbf{q}, \nu} b_{\mathbf{q}, \nu}^+ b_{\mathbf{q}, \nu}$; H_{el-ph} имеет вид, аналогичный уравнению (1) и диагонально по зонному индексу m . Наконец, выражение, описывающее спин-фононное взаимодействие, можно представить следующим образом:

$$H_{sp-ph} = \sum_{fg, \mathbf{q}, \nu} A_{fg}(\mathbf{q}, \nu) \left(\mathbf{S}_f \cdot \mathbf{S}_g - \frac{1}{4} n_f n_g \right) (b_{\mathbf{q}, \nu} + b_{-\mathbf{q}, \nu}^+),$$

$$A_{fg}(\mathbf{q}, \nu) = \frac{2t_{fg}^{01}/E_{ct}}{\sqrt{2M_0\omega_{q,\nu}}} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}_f + \mathbf{R}_g)} \left(\mathbf{V}_{off,01}^{(\nu)} \delta_{f,g\pm x} + \mathbf{V}_{off,01}^{(\nu)} \delta_{f,g\pm y} \right).$$

Здесь \mathbf{S}_f и n_f - операторы спина и числа частиц на узле f , E_{ct} - щель с переносом заряда, \mathbf{R}_f - радиус-вектор узла f , M_0 - масса колеблющегося иона, $\omega_{q,\nu}$ - частота колебаний моды ν , $\mathbf{V}_{off,mm}^{(\nu)}$ - недиагональная часть матричного элемента ЭФВ. Аналогичные поправки $H_{el-ph}^{(3)}$ возникают и в трехцентровых слагаемых.

В четвертой главе строится теория сверхпроводимости типа БКШ с учетом обменного и фононного механизмов спаривания в купратах. Показано, что исключение ЭФВ в уравнении (2) в духе преобразования Фрелиха [8] позволяет записать эффективный гамильтониан сильно коррелированных электронов, взаимодействующих с фононами, в следующем виде:

$$H_{eff} = H_{t-J^*} + H_{el-ph-el}, \quad H_{el-ph-el} = \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} \sum_m V_m^{eff}(\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}) X_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^m X_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^m X_{\mathbf{k}'}^m X_{\mathbf{k}}^m,$$

$$V_m^{eff}(\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}) = \sum_{\nu} \frac{V_{m\nu}^{(\nu)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) V_{m\nu}^{(\nu)}(\mathbf{k}', -\mathbf{q}) \omega_{q,\nu}}{(t_m(\mathbf{k}) - t_m(\mathbf{k} + \mathbf{q}))^2 F_m^2 - \omega_{q,\nu}^2}.$$

Таким образом, в отличие от аналогичного эффективного взаимодействия слабо коррелированных электронов в режиме СЭК эффективное взаимодействие зависит от чисел заполнения зоны F_m и через них от концентрации, температуры и магнитного поля.

Влияние ЭФВ на сверхпроводящий параметр порядка (ПП) рассматривается в обобщенном приближении Хартри-Фока с учетом статических спиновых корреляторов $c_{\mathbf{q}} = \langle S_{\mathbf{q}}^+ S_{\mathbf{q}}^- \rangle$. Полученное выражение для ПП в случае синглетного спаривания может быть представлено в виде:

$$\Delta_{\mathbf{k}}^{tot} = \Delta_{\mathbf{k}}^{tJ^*} + \Delta_{\mathbf{k}}^{el-ph}, \quad \Delta_{\mathbf{k}}^{tJ^*} \text{ имеет стандартный вид для щели в } t - J^* \text{ модели [4], и:}$$

$$\Delta_{\mathbf{k}}^{el-ph} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1+x}{4} \{V_{-\mathbf{q},\mathbf{q},\mathbf{q}+\mathbf{k}} + V_{-\mathbf{q},\mathbf{q},\mathbf{q}-\mathbf{k}}\} B_{\mathbf{q}} - \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{q},\mathbf{p}} \frac{3}{2(1+x)} \{V_{-\mathbf{q},\mathbf{q},\mathbf{p}+\mathbf{k}} + V_{-\mathbf{q},\mathbf{q},\mathbf{p}-\mathbf{k}}\} B_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{q}-\mathbf{p}}. \quad (3)$$

Здесь $B_{\mathbf{q}} = \langle X_{-\mathbf{q}}^{0,-\sigma} X_{\mathbf{q}}^{0,\sigma} \rangle$ - аномальные средние и x - концентрация допированных носителей. Нетривиальным результатом является то, что помимо фононного механизма спаривания в теории среднего поля, получен также спин-жидкостный вклад, обусловленный интерференцией магнитного и фононного механизмов. То есть, учет ближнего магнитного порядка приводит к тому, что в уравнении (3) появляется слагаемое, пропорциональное произведению константы ЭФВ $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}}^{mm}$ и спиновой корреляционной функции $c_{\mathbf{q}}$. Выражение для константы связи показывает, что с ростом числа носителей x обменный и спин-жидкостный вклады уменьшаются, в то время как фононный растет. Конкуренция спин-жидкостного и фононного механизмов приводит к увеличению полного ЭФВ вклада (по абсолютной величине) в области малого допирования (рис. 4).

Далее, учитывая анизотропию ЭФВ, было исследовано сверхпроводящее состояние с $d_{x^2-y^2}$ - симметрией. Проанализирована зависимость потенциала спаривания, обусловленного ЭФВ, от исходного импульса фонона для дыхательной, изгибной и апической дыхательной мод. Показано, что в d - канале фононный вклад может как увеличивать, так и уменьшать λ_{tot} , в то время как в s - канале фононный и магнитный вклады суммируются.

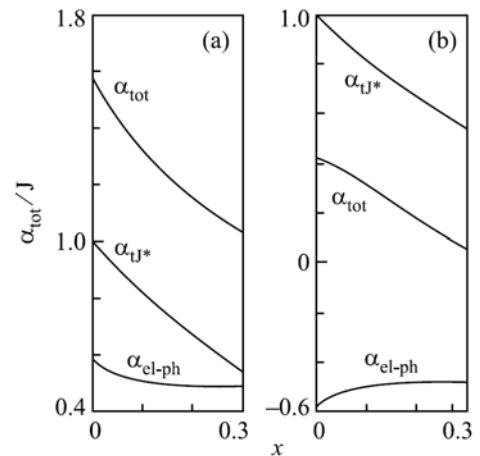


Рис. 4. Эффективная константа связи сверхпроводящего спаривания α_{tot} , обусловленного суммой магнитного α_{MJ^*} и полного фононного α_{ph} вкладов; (a) - ЭФВ увеличивает полную константу связи, (b) - ЭФВ подавляет магнитный механизм спаривания.

В конце третьей главы рассматривается конкуренция обменного и ЭФВ механизмов спаривания в системе $La_{2-x}Sr_xCuO_4$. Показано, что обменное взаимодействие дает слишком высокие значения T_c по сравнению с экспериментальными. При этом ЭФВ подавляет критическую температуру, обусловленную магнитным механизмом спаривания (рис. 5).

В заключении сформулированы основные результаты и выводы.

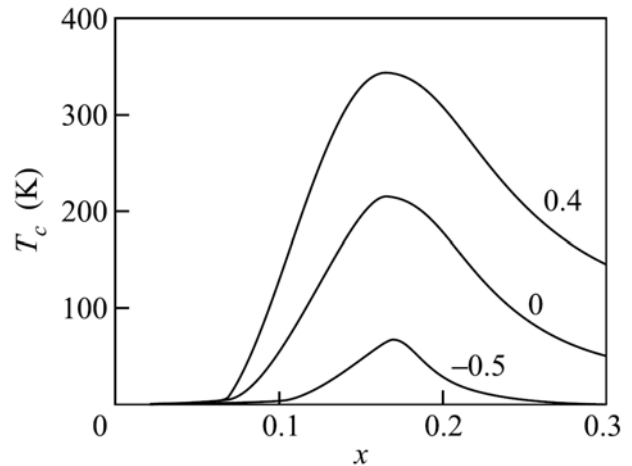


Рис. 5. Концентрационная зависимость критической температуры при различных значениях эффективного параметра ЭФВ G . Около кривых указано значение параметра G/J .

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Электронная структура двумерной модели Хаббарда с половинным заполнением, рассчитанная в рамках приближения Хаббард-I, сопоставлена с данными численного метода квантового Монте-Карло. Показано, что приближение Хаббард-I в антиферромагнитной фазе качественно верно воспроизводит особенности квазичастичного спектра и плотности состояний в системах с СЭК. Нетривиальным результатом, полученным в приближении Хаббард-I, является перераспределение спектрального веса квазичастиц между подзонами верхней и нижней хаббардовских зон. Также показано, что квазичастичный спектр в модели Хаббарда с антиферромагнитным упорядочением в случае половинного заполнения может быть переписан через решения для немагнитной фазы. При этом оказывается, что дисперсия антиферромагнитного состояния имеет вид, аналогичный закону дисперсии для волны спиновой плотности. Кроме того, рассмотрено влияние

следующих за ближайшими соседями на формирование электронной структуры. Существенным эффектом является возникновение дополнительных квазичастичных состояний в определенных точках зоны Бриллюэна.

2. Рассмотрен последовательный вывод гамильтониана ЭФВ в ВТСП купратах в режиме сильных корреляций на основе реалистичной многозонной $p-d$ модели. Найдена зависимость от волновых векторов диагональных и недиагональных по узлам решетки матричных элементов электрон-фононного взаимодействия для трех мод фононов: дыхательной, апической дыхательной и изгибной.
3. Получена низкоэнергетическая $t-J^*$ модель с фононами, содержащая, наряду с электрон-фононным, и спин-фононное взаимодействие. Исключение фононов дало эффективное электрон-электронное взаимодействие, которое вследствие сильных электронных корреляций зависит от чисел заполнения многоэлектронных термов и от концентрации носителей.
4. В приближении среднего поля построена теория сверхпроводимости типа БКШ с учетом магнитного и фононного механизмов спаривания. Показано, что в системах с СЭК константа связи λ_{tot} описывает магнитный механизм спаривания, перенормированный ЭФВ. При этом импульсная зависимость матричных элементов ЭФВ приводит к тому, что в d -канале фононный вклад может как увеличивать, так и уменьшать λ_{tot} . Нетривиальным результатом является то, что константа связи содержит спин-жидкостный вклад, обусловленный интерференцией магнитного и фононного механизмов спаривания. В области сильного допирования, где спиновые корреляционные функции затухают, спин-жидкостный вклад пропадает, в области слабого допирования – усиливает ЭФВ. Также исследовано влияние ЭФВ на температуру СП перехода в $La_{2-x}Sr_xCuO_4$. Показано, что ЭФВ подавляет критическую температуру, обусловленную магнитным механизмом спаривания.

Основные результаты диссертации опубликованы в работах:

1. S. G. Ovchinnikov, E.I. Shneyder, Electron spectral density of the half-filled Hubbard model in the atomic limit at finite temperature. // Central European Journal of Physics. – 2003. – V. 3. – N. 3. – P.421-431.
2. С.Г. Овчинников, Е.И. Шнейдер, Спектральные функции модели Хаббарда в случае половинного заполнения. // ФТТ. – 2004. – Т. 46. – В. 8. – С. 1428-1432.
3. С.Г. Овчинников, Е.И. Шнейдер, Эффективный гамильтониан для ВТСП купратов с учетом электрон-фононного взаимодействия в режиме сильных корреляций. // ЖЭТФ. – 2005. – Т. 128. – В. 5. – С. 974-986.
4. S. G. Ovchinnikov, V. A. Gavrichkov, M. M. Korshunov, and E. I. Shneyder, Electron structure and electron–phonon interaction in the strongly correlated electron system of cuprates. // Low Temperature Physics. – 2006. – V. 32. – N. 4. P. 483-488.
5. S. G. Ovchinnikov, E.I. Shneyder, Electron-phonon interaction in cuprates with T and T'- structure in strongly correlated limit. // Physica B. – 2006. – V. 378-380. – P. 451-452.
6. Е.И. Шнейдер, С.Г. Овчинников, Фононный и магнитный механизмы спаривания в высокотемпературных сверхпроводниках в режиме сильных корреляций. // Письма в ЖЭТФ. – 2006. – Т. 128. – В. 5. – С. 974-986.
7. С.Г. Овчинников, Е.И. Шнейдер, Спектральные функции модели Хаббарда в случае половинного заполнения. // XXXIII Совещание по физике низких температур. – Екатеринбург. – 17-20 июня. – 2003. – с. 94-95.
8. S. G. Ovchinnikov, E.I. Shneyder, The effect of spin fluctuations and next-nearest hopping on band structure forming in Hubbard model. // Euro-Asian Symposium “Trends in Magnetism”. – Russia, Krasnoyarsk. – 24th – 27th August. – 2004. – P.147.

9. S. G. Ovchinnikov, E.I. Shneyder, Electron-phonon interaction in cuprates with T and T'- structure in strongly correlated limit. // The International Conference on Strongly Correlated Electron Systems. – Austria, Vienna. – July 26th - 30th. – 2005. – P. 128.
10. С.Г. Овчинников, Е.И. Шнейдер, Влияние спиновых флуктуаций и перескока на следующего за ближайшим соседа на формирование электронной структуры в модели Хаббарда. // XXX Международная зимняя школа физиков-теоретиков. – Кыштым. – 22-28 февраля. – 2004. – С. 59-А.
11. С.Г. Овчинников, Гавричков В.А., Коршунов М.М., Е.И. Шнейдер, Электронная структура и механизмы сверхпроводимости в купратах. // XXXI Международная зимняя школа физиков-теоретиков. – Кыштым. – 19-25 февраля. – 2006. – С. 37.
12. E.I. Shneyder, S. G. Ovchinnikov, Interplay of magnetic and phonon pairing in cuprates in strongly correlated limit. // The International Conference on Strongly Correlated Electron Systems. – Japan, Kyoto. – 20th – 25th August. – 2006. – P. 250.
13. Е.И. Шнейдер, С.Г. Овчинников, Электрон-фононное взаимодействие в высокотемпературных сверхпроводниках в режиме сильных электронных корреляций. // Фундаментальные проблемы сверхпроводимости. – Москва, ФИАН. – 9-13 октября. – 2006. – С. 94.
14. С.Г. Овчинников, Гавричков В.А., Коршунов М.М., Е.И. Шнейдер, Захарова Е.В., Связь магнитного и фононного механизмов сверхпроводимости с особенностями электронной структуры в ВТСП купратах. // Фундаментальные проблемы сверхпроводимости. – Москва, ФИАН. – 9-13 октября. – 2006. – С. 79.

СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Максимов Е.Г., Проблема высокотемпературной сверхпроводимости. Современное состояние. // УФН - 2000. - Т. 170, N 10. - С. 1033-1061.
2. Ovchinnikov S.G., Sandalov I.S., The band structure of strong-correlated electrons in $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ and $YBa_2Cu_3O_{7-y}$. // Physica C. – 1989. – V. 147. – P. 307-319.
3. Devereaux T.P., Cuk T., Shen Z.-X., Nagaosa N.. Anisotropic Electron-Phonon Interaction in the Cuprates. // Phys. Rev. Lett. – 2004. - V. 93. – P. 117004-1 – 117004-4.
4. Ishihara S., Nagaosa N., Interplay of Electron-Phonon Interaction and Electron Correlation in High Temperature Superconductivity. // Phys. Rev. B. – 2004. – V. 69. – P. 144520-144533.
5. Grober C., Eder R., Hanke W., Anomalous low-doping phase of the Hubbard model. // Phys. Rev. B. – 2000. – V. 62. N. 7. – P. 4336-4352.
6. Bulut N., Scalapino D.J., White S.R., Electronic Properties of the Insulating Half-Filled Hubbard Model. // Phys. Rev. Lett. – 1994. – V. 73. – N. 5. – P. 748-751.
7. Val'kov V.V., Val'kova T.A., Dzebisashvili D.M., Ovchinnikov S.G., // JETP Letters. – 2002. – Т. 75. – N. 8. P. 378-382.
8. Fröhlich H., Theory of the Superconductivity State. I. The Ground state at the Absolute Zero of Temperature. // Phys. Rev. – 1950. - V. 79. – N. 4. – P. 845-856.
9. Yushankhai V. Yu., Vujicic, and Zakula R.B., Singlet pairing in the single-band Hubbard model: contributions of second order in t/U . // Phys. Lett. A. – 1990. – V. 151. – P. 254.

Подписано в печать 01.11.2006.

Формат 60x85 16.у.-и. л. 1.

Усл. печ. л. 1. Тираж _____. Заказ № 37.

Отпечатано в типографии Института Физики СО САН
660036б Красноярск, Академгородок, ИФ СО РАН.