

УДК 537.9

ВЛИЯНИЕ МЕЖУЗЕЛЬНОГО КУЛОНОВСКОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ МОДЕЛИ ЭМЕРИ

© 2007 г. В. В. Вальков^{1,2,3}, М. М. Коровушкин¹

E-mail: vvv@iph.krasn.ru

Вычислен низкоэнергетический спектр фермиевских возбуждений трехзонной модели Эмери с учетом межузельного взаимодействия. Показано, что кулоновское взаимодействие между кислородными и медными дырками существенно ренормирует спектр фермиевских возбуждений нижней зоны и модифицирует концентрационную зависимость химического потенциала от степени легирования.

Известно, что в невырожденной (одноорбитальной) модели Хаббарда [1] при половинном заполнении затравочной зоны носителей тока переход Мотта–Хаббарда в диэлектрическое состояние индуцируется сильным кулоновским взаимодействием электронов, находящихся на одном узле и обладающих противоположными проекциями спинового момента.

При учете нескольких орбиталей, как, это, например, имеет место в трехзонной модели Эмери [2, 3], вопрос о формировании диэлектрической фазы Мотта–Хаббарда оказывается более сложным. Представленные в работе результаты исследований основного состояния и спектра элементарных возбуждений модели Эмери показывают, что в приближении Хартри–Фока без допирования однородная парамагнитная фаза этой модели не является диэлектрической даже в режиме сильных одноузельных корреляций. Этот вывод обусловлен тем, что без легирования химический потенциал, найденный из решения уравнений самосогласования, расположен в нижней зоне вблизи ее потолка.

Трехзонный энергетический спектр модели Эмери часто рассматривают как усложнение модели. В связи с этим появилось значительное количество работ, в которых на основе кластерной формы теории возмущений развивались сценарии построения эффективного гамильтониана, подобного гамильтониану модели Хаббарда. Наряду с очевидным упрощением при таком подходе часть особенностей электронного строения высокотемпературных сверхпроводников оказывается потерянной, поэтому представляются актуальным вычисление электронного энергетического спектра и анализ его особенностей непосредственно в модели Эмери.

Гамильтониан модели Эмери в пределе сильных электронных корреляций в атомном представлении может быть записан в виде

$$\hat{H} = \sum_{f\sigma} (\epsilon_d - \mu) Z_f^{\sigma\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{f\delta\sigma} (\epsilon_p - \mu) X_{f+\delta}^{\sigma\sigma} + \sum_{f\delta\sigma} t_{pd}(\delta) (Z_f^{\sigma 0} X_{f+\delta}^{0\sigma} + X_{f+\delta}^{\sigma 0} Z_f^{0\sigma}) + \frac{1}{2} \sum_{f\delta\sigma} t_{pp}(\Delta) X_{f+\delta}^{\sigma 0} X_{f+\delta+\Delta}^{0\sigma} + V_{pd} \sum_{f\delta} \hat{n}_f^d \hat{n}_{f+\delta}^p, \quad (1)$$

где Z_f^{mn} и $X_{f+\delta}^{mn}$ – операторы Хаббарда, описывающие переходы между одноионными состояниями для ионов меди и кислорода соответственно; \hat{n}_f^d ($\hat{n}_{f+\delta}^p$) – оператор числа дырок на ионах меди (кислорода). δ – один из четырех векторов, связывающих ион меди с ионами кислорода в CuO_2 -плоскости; Δ – вектор, соединяющий ближайшие ионы кислорода. ϵ_d и ϵ_p – энергии дырок на ионах меди и кислорода; $t_{pd}(\delta)$ и $t_{pp}(\Delta)$ – интегралы перескока дырок с ионов меди на ионы кислорода и с ионов кислорода на ионы кислорода; μ – химический потенциал системы; V_{pd} – энергия кулоновского отталкивания дырок, находящихся на соседних ионах меди и кислорода. Предел сильных корреляций означает, что параметры кулоновского взаимодействия $U_d \rightarrow \infty$, $U_p \rightarrow \infty$.

Покажем, что без учета межузельного кулоновского взаимодействия дырок на ионах меди и кислорода основное состояние рассматриваемой модели без легирования не является диэлектрическим. Для расчета энергетической структуры используем метод двухвременных температурных функций Грина, построенных на операторах Хаббарда. Замкнутая система уравнений движения в квазиимпульсном представлении, соответствующая приближению Хаббард-I, имеет вид

¹ Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск.

² Красноярский государственный университет.

³ Красноярский государственный технический университет.

$$\begin{aligned}(\omega - \varepsilon_d + \mu)Z &= N_d - iN_d(S_x X + S_y Y), \\(\omega - \varepsilon_p + \mu)X &= N_p(iS_x Z - V_{xy}Y), \\(\omega - \varepsilon_p + \mu)Y &= N_p(iS_y Z - V_{xy}X).\end{aligned}\quad (2)$$

Здесь

$$\begin{aligned}X &= \langle\langle X_{k\sigma} | Z_{k\sigma}^+ \rangle\rangle, \quad Y = \langle\langle Y_{k\sigma} | Z_{k\sigma}^+ \rangle\rangle, \quad Z = \langle\langle Z_{k\sigma} | Z_{k\sigma}^+ \rangle\rangle, \\N_d &= 1 - \frac{n_d}{2}, \quad N_p = 1 - \frac{n_p}{2}, \quad S_x = 2t_{pd} \sin\left(\frac{k_x a}{2}\right), \\S_y &= 2t_{pd} \sin\left(\frac{k_y a}{2}\right), \quad V_{xy} = 4t_{pp} \sin\left(\frac{k_x a}{2}\right) \sin\left(\frac{k_y a}{2}\right).\end{aligned}$$

Эти уравнения применимы при $t_{pd}/\Delta_{pd} \ll 1$ и $t_{pp}/\Delta_{pd} \ll 1$ ($\Delta_{pd} = \varepsilon_p - \varepsilon_d$). Из представленной системы уравнений следует, что с квадратичной по этим параметрам точностью спектр нижней ветви определяется выражением

$$E_1(\vec{k}) = \varepsilon_d - 4N_p N_d \left(\frac{t_{pd}}{\Delta_{pd}}\right)^2 S(k_x, k_y), \quad (3)$$

где $S(k_x, k_y) = \sin^2(k_x a/2) + \sin^2(k_y a/2)$.

При $T = 0$ и положении химического потенциала вблизи потолка нижней зоны получаем, что с рассматриваемой точностью среднее число дырок на ионах меди

$$n_d = 1 - \left(\frac{t_{pd}}{\Delta_{pd}}\right)^2 - \frac{1}{4\pi} \left(\frac{\delta\mu}{t_{pd}}\right) \left(\frac{\Delta_{pd}}{t_{pd}}\right) + \frac{1}{8\pi} \left(\frac{\delta\mu}{t_{pd}}\right)^2. \quad (4)$$

Физическое происхождение уменьшения числа дырок на ионах меди связано с наличием эффектов ковалентности, вызванных гибридизацией медных и кислородных орбиталей.

Записывая аналогичную систему уравнений для нахождения функции $\langle\langle X_{k\sigma} | X_{k\sigma}^+ \rangle\rangle$ и решая ее, получаем, что при $T = 0$ в выбранной области нахождения химического потенциала среднее число дырок, приходящихся на один ион кислорода,

$$n_p = 2\left(\frac{t_{pd}}{\Delta_{pd}}\right)^2 - \frac{1}{4\pi} \left(\frac{\delta\mu}{t_{pd}}\right)^2. \quad (5)$$

Подставляя полученные выражения в условие электронейтральности $n_d + 2n_p = 1 + P$ (P – параметр, определяющий уровень легирования), и решая уравнение относительно химического потенциала, находим

$$\mu = \varepsilon_d - 4\pi \left(\frac{t_{pd}}{\Delta_{pd}}\right)^2 \left(3\left(\frac{t_{pd}}{\Delta_{pd}}\right)^2 - P\right). \quad (6)$$

Видно, что в нелегированном случае ($P = 0$) химический потенциал лежит ниже потолка нижней зоны (ε_d). Это означает, что основное состояние не является диэлектрическим. При легировании ($P > 0$)

химический потенциал увеличивается и при $P = P_c = 3(t_{pd}/\Delta_{pd})^2$ нижняя зона становится полностью заполненной. При этом основное состояние системы становится диэлектрическим.

В условиях, когда в расчете на один ион число медных дырок $n_d \cong 1$, а число кислородных дырок $n_p \ll 1$, становятся важными взаимодействия между дырками, находящимися на ионах меди и кислорода. В то же время из-за условия $n_p \ll 1$ взаимодействиями между дырками, находящимися на ионах кислорода, можно пренебречь. Таким образом, задача об энергетическом спектре модели Эмери в режиме слабого допирования представляет собой задачу, в которой присутствует газовый параметр $p \ll 1$ (p – концентрация дырок на ионах кислорода). Использование этого параметра малости и лежит в основе возможности корректного описания медь-кислородного взаимодействия дырок.

Для корректного описания межзельного взаимодействия базис функций Грина был существенно расширен. При этом была получена и решена (в газовом приближении по параметру p) полная замкнутая система из шести уравнений для функций Грина, которая содержит ренормировки гибридного взаимодействия, лежащие в основе существенной модификации энергетического спектра и характера основного состояния системы. В частности, при $n_d \leq 1$ энергетический спектр нижней зоны определяется выражением

$$\begin{aligned}E_d &= \varepsilon_d - 4\left(\frac{t_{pd}}{\Delta_{pd}}\right)^2 \times \\&\times \frac{(1 - n_d)(\Delta_{pd} + V_{pd}(1 - n_d))}{(\Delta_{pd} + V_{pd})} S(k_x, k_y).\end{aligned}\quad (7)$$

Видно, что при $n_d \rightarrow 1$ ширина нижней зоны стремится к нулю.

Спектр верхних зон определяется выражением

$$E_p^\pm = \varepsilon_p + 2V_{pd} \pm 4t_{pp} n_d^2 \sin(k_x a/2) \sin(k_y a/2). \quad (8)$$

Видно, что коллективная дырочная зона определяется уширением уровня $\varepsilon_p + 2V_{pd}$, а ее ширина остается перенормированной. Причина этого факта также связана с подавлением ковалентных эффектов, когда эффективная медь-кислородная гибридизация обращается в нуль.

Таким образом, по результатам проведенных исследований можно сделать следующие выводы:

1) без легирования основное состояние модели Эмери на классе однородных парамагнитных решений – не диэлектрическое, так как химический потенциал расположен ниже потолка валентной зоны;

2) переход в диэлектрическое состояние реализуется только при конечном уровне легирования. С квадратичной по t_{pd}/Δ_{pd} точностью ($t_{pd} \ll \Delta_{pd}$),

критическое значение легирования P_c определяется выражением

$$P_c = 3(t_{pd}/\Delta_{pd})^2;$$

3) решение задачи в газовом пределе на основе расширенного набора гриновских функций показало, что строгий учет межузельного кулоновского взаимодействия дырок на ионах меди и кислорода приводит к существенной ренормировке спектра фермиевских возбуждений;

4) поскольку в модели Хаббарда с половинным заполнением основное состояние, как известно, является диэлектрическим, корректное сведение

многоорбитальной модели Эмери к одноорбитальной модели Хаббарда невозможно.

Работа выполнена при поддержке Программы Президиума РАН "Квантовая макрофизика", РФФИ (грант № 06-02-16100), Интеграционного проекта СО РАН и Лаврентьевского конкурса СО РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Hubbard J.C.* // Proc. Roy. Soc. A. 1963. V. 276. P. 238.
2. *Emery V.J.* // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 58. P. 2794.
3. *Varma C.M., Schmitt-Rink S., Abrahams E.* // Solid State Commun. 1987. V. 62. P. 681.