

УДК 537.9

## ЭФФЕКТИВНЫЙ ГАМИЛЬТОНИАН ДЛЯ МЕДНЫХ ОКСИДОВ

© 2008 г. В. В. Вальков<sup>1,2</sup>, М. М. Коровушкин<sup>1</sup>

E-mail: vvv@iph.krasn.ru

Для модели Эмери в рамках эффективного гамильтониана, полученного при учете межузельных взаимодействий и кислородных конфигураций с различным числом дырок, вычислена концентрационная зависимость обменного интеграла для подсистемы спиновых моментов ионов меди  $J(h) = J - J_1 \cdot h - J_2 \cdot h^2$ . Показано, что учет кислородных однодырочных состояний, возникающих при легировании, приводит к дополнительным вкладам в  $J(h)$ , интенсивность которых зависит от межузельных корреляций ближайшего окружения обменно связанных ионов меди.

Для описания электронной структуры высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) в качестве базовой модели часто используют трехзонную  $p$ - $d$ -модель Эмери [1, 2]. При этом считают, что в рамках обычного дырочного представления для недопированного случая приближение Хаббард-I в пределе сильных кулоновских корреляций ( $U_d \rightarrow \infty$ ) приводит к основному состоянию, соответствующему диэлектрической фазе медь-кислородных плоскостей ВТСП. Однако проведенный в приближении Хаббард-I расчет энергетического спектра для недопированного режима [3] показал, что при обычном сценарии использования трехзонной картины в дырочном представлении химический потенциал при  $U_d = \infty$  находился в нижней зоне вблизи ее потолка. Это означало, что такой подход не обеспечивал диэлектрического состояния.

В действительности при  $U_d = \infty$  и отсутствии легирования волновая функция  $\Psi_D$ , соответствующая состоянию с полностью заполненными  $p$ -оболочками ионов кислорода и двухвалентными ионами меди, является точной собственной функцией гамильтониана модели Эмери. В этом легко убедиться, если этот гамильтониан записать в электронном представлении

$$H = H_0 + V, \quad (1)$$

где  $H_0$  в атомном представлении имеет вид

$$H_0 = \sum_f \left( \varepsilon_d \sum_{\sigma} Z_f^{\sigma\sigma} + (2\varepsilon_d + U_d) Z_f^{22} \right) + \sum_{f\delta} \left( \frac{\varepsilon_p}{2} \sum_{\sigma} X_{f+\delta}^{\sigma\sigma} + \left( \varepsilon_p + \frac{U_p}{2} \right) X_{f+\delta}^{22} \right) + V_{pd} \sum_{f\delta} \left( \sum_{\sigma} Z_f^{\sigma\sigma} + 2Z_f^{22} \right) \left( \sum_{\sigma'} X_{f+\delta}^{\sigma'\sigma'} + 2X_{f+\delta}^{22} \right),$$

с оператором возмущения

$$V = T_{pd} + T_{pp},$$

$$T_{pd} = \sum_{f\delta\sigma} t_{pd}(\delta) \{ Z_f^{\sigma 0} X_{f+\delta}^{0\sigma} + X_{f+\delta}^{\sigma 0} Z_f^{0\sigma} + Z_f^{2\bar{\sigma}} X_{f+\delta}^{\bar{\sigma} 2} + X_{f+\delta}^{2\bar{\sigma}} Z_f^{\bar{\sigma} 2} + \eta(\sigma) (Z_f^{\sigma 0} X_{f+\delta}^{\bar{\sigma} 2} + X_{f+\delta}^{2\bar{\sigma}} Z_f^{0\sigma}) \},$$

$$T_{pp} = \frac{1}{2} \sum_{f\delta\Delta\sigma} t_{pp}(\Delta) (X_{f+\delta}^{\sigma 0} X_{f+\delta+\Delta}^{0\sigma} + X_{f+\delta}^{2\bar{\sigma}} X_{f+\delta+\Delta}^{\bar{\sigma} 2} + \eta(\sigma) (X_{f+\delta}^{\sigma 0} X_{f+\delta+\Delta}^{\bar{\sigma} 2} + X_{f+\delta}^{2\bar{\sigma}} X_{f+\delta+\Delta}^{0\sigma})).$$

Здесь  $Z_f^{mn} = |fm\rangle\langle fn|$  и  $X_{f+\delta}^{mn} = |f+\delta, m\rangle\langle f+\delta, n|$  – операторы Хаббарда, описывающие переходы между состояниями ионов меди и кислорода, соответственно;  $Z_f^{\sigma\sigma} (X_{f+\delta}^{\sigma\sigma})$  – оператор числа электронов с проекцией спинового момента  $\sigma$  на ионах меди (кислорода);  $\delta$  – один из четырех векторов, связывающих ион меди с ионами кислорода в  $\text{CuO}_2$ -плоскости;  $\Delta$  – вектор, соединяющий ближайшие ионы кислорода;  $\varepsilon_d$  и  $\varepsilon_p$  – энергии электронов на ионах меди и кислорода;  $t_{pd}(\delta)$  и  $t_{pp}(\Delta)$  – интегралы перескока электронов с ионов меди на ионы кислорода и с ионов кислорода на ионы кислорода;  $U_d$  и  $U_p$  – параметры одноузельного кулоновского отталкивания электронов на ионах меди и кислорода,  $V_{pd}$  – энергия кулоновского отталкивания электронов, находящихся на соседних ионах меди и кислорода.

Предполагается, что восемь электронов  $d$ -оболочки ионов меди входят в ионный остов, заполняя глубоко лежащие энергетические уровни, и не принимают участия в процессах формирования верхних электронных зон. Аналогично этому четыре электрона  $p$ -оболочки кислородных ионов заполняют внутренние уровни и дают вклад лишь в функцию коллективного вакуумного состояния  $|\Phi_0\rangle$ . Для определенной таким образом функции  $|\Phi_0\rangle$  недопированным купратам будет соответствовать состояние, при котором на одну элементар-

<sup>1</sup> Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск.

<sup>2</sup> Сибирский федеральный университет, Красноярск.

ную ячейку  $\text{CuO}_2$ -плоскости приходится пять электронов.

Видно, что при  $U_d \rightarrow \infty$  для состояния  $\Psi_D$  перескок электрона с иона меди на ион кислорода исключается по принципу Паули (кислородные орбитали заполнены полностью). Обратный переход электрона с кислородной орбитали на ион меди привел бы к формированию завершенной  $d$ -оболочки с возникновением двукратно заполненной верхней орбитали. При  $U_d = \infty$  это соответствовало бы возникновению бесконечно большой энергии возбужденного состояния и запрещению перехода. Учитывая, что в состоянии  $\Psi_D$  все кинетические процессы полностью подавлены, приходим к заключению, что в пределе  $U_d = \infty$  и в отсутствие легирования диэлектрическая фаза точно описывается функцией  $\Psi_D$ .

Если же  $U_d$  конечно, то  $\Psi_D$  перестает быть точной функцией гамильтониана Эмери, поскольку процессы ковалентного смешивания состояний  $d^{10}$  ионов меди энергетически не запрещены, хотя и относительно слабы. Для описания диэлектрической фазы в этом случае необходимо развитие теории, выходящей за рамки приближения, основанного на линеаризованной по параметру медь-кислородного перескока схеме. С этой целью можно воспользоваться операторной формой теории возмущений [4], позволяющей перейти к эффективному гамильтониану, в котором процессы первого порядка по отмеченному параметру формально отсутствуют. При этом диэлектрическая фаза в нелегированном режиме получается естественным образом. В данной работе представлена часть результатов такого подхода. Причем акцент сделан на вычислении зависимости интеграла обменного взаимодействия ионов меди от концентрации легированных дырок.

При построении эффективного гамильтониана использован проекционный оператор

$$P = \prod_f (Z_f^{\uparrow\uparrow} + Z_f^{\downarrow\downarrow}) \prod_l (X_l^{\uparrow\uparrow} + X_l^{\downarrow\downarrow} + X_l^{22}), \quad (2)$$

осуществляющий проецирование волновых функций на усеченное гильбертово пространство, не содержащее вакуумных и двоичных состояний ионов меди, а также вакуумных состояний ионов кислорода. При этом с точностью до членов четвертого порядка по параметру  $t_{pd}$  искомый эффективный гамильтониан будет определяться выражением

$$\begin{aligned} \hat{H}_{ef} = & PH_0P + PVP + PV(H_0 - E_0)^{-1}(PV - V)P + \\ & + PV(H_0 - E_0)^{-1}(PV - V)(H_0 - E_0)^{-1}(PV - V)P + \\ & + PV(H_0 - E_0)^{-1}(PV - V)(H_0 - E_0)^{-1} \times \\ & \times (PV - V)(H_0 - E_0)^{-1}(PV - V)P. \end{aligned} \quad (3)$$

Этот гамильтониан содержит большой набор слагаемых, описывающих как обменное взаимодей-

ствие между ионами меди, так и различного рода коррелированные перескоки и взаимодействия, дающие вклады в механизм куперовского спаривания. Существенно, что с точностью до членов четвертого порядка по отмеченному параметру в эффективном гамильтониане отсутствуют слагаемые, индуцирующие состояния с двумя электронами на ионах меди. Следовательно, в недопированном случае гомеоплярное состояние, когда на ионах меди находится по одному электрону, а кислородные орбитали заполнены двумя электронами, является собственным состоянием эффективного гамильтониана. Это означает, что с рассматриваемой точностью задача построения диэлектрической фазы недопированной  $\text{CuO}_2$ -плоскости становится решенной. С другой стороны, слагаемые, индуцирующие куперовскую неустойчивость, обеспечивают реализацию сверхпроводящего состояния при больших уровнях легирования.

Среди 24 членов эффективного гамильтониана (3) четыре слагаемых описывают обменное взаимодействие между спиновыми моментами ионов меди. При вычислении их явного вида были учтены две особенности. Во-первых, принимались во внимание электронные конфигурации ионов кислорода, входящих в ближайшее окружение пары обменно связанных ионов меди и содержащие ноль дырок, одну и две дырки. Во-вторых, учтено, что межузельные кулоновские корреляции привели к снятию вырождения по энергии между конфигурациями, содержащими одинаковое число дырок, но с различным расположением дырок по отношению к паре обменно связанных спиновых моментов. Вклады от всех таких различных конфигураций находились отдельно и суммировались только на конечном этапе вычислений. При этом потребовалось ввести новый класс проекционных операторов, сепарирующего гильбертово подпространство, соответствующее семи ионам кислорода, окружающим два ближайших иона меди. В результате оператор обменного взаимодействия между спиновыми моментами медных ионов приобрел операторную структуру, составленную не только из спиновых операторов ионов меди, но и из операторов, выделяющих заданную конфигурацию кислородного окружения. После проведения статистического усреднения этих конфигураций с применением идеологии распределения по сценарию большого канонического ансамбля были получены весовые вклады, учитывающие зависимость конкретных вкладов от концентрации легированных дырок. В результате таких вычислений слагаемые, описывающие обменное взаимодействие между спиновыми моментами ионов меди, были записаны в виде

$$\sum_{f\delta} J(h) \vec{S}_f \vec{S}_{f+2\delta}, \quad (4)$$

где константа обменного взаимодействия представляет собой сумму трех слагаемых:

$$J(h) = J_0 - J_1 h - J_2 h^2, \quad (5)$$

где

$$J_0 = \frac{2t_{pd}^4}{(\Delta + V_0)^2} \left( \frac{1}{U_d} + \frac{2}{2\Delta + U_p} \right),$$

$$J_1 = 3.5J_0 - 3 \left( \frac{t_{pd}^4(2\Delta + V_0)^2}{\Delta^2(\Delta + V_0)^2(2\Delta + U_p - V_0)} + \frac{t_{pd}^4}{\Delta^2(U_d - V_0)} + \frac{t_{pd}^4}{(\Delta + V_0)^2(U_d + V_0)} \right) + \frac{t_{pd}^4}{2U_d(\Delta + U_p)(U_d - \Delta - 2V_0)},$$

$$J_2 = -5.25J_0 + 9 \left( \frac{t_{pd}^4(2\Delta + V_0)^2}{\Delta^2(\Delta + V_0)^2(2\Delta + U_p - V_0)} + \frac{t_{pd}^4}{\Delta^2(U_d - V_0)} + \frac{t_{pd}^4}{(\Delta + V_0)^2(U_d + V_0)} - \frac{t_{pd}^4}{\Delta^2(2\Delta + U_p - 2V_0)} \right) - 3 \left\{ \frac{t_{pd}^4 \Delta^2}{(\Delta^2 - V_0^2)^2(2\Delta + U_p - 2V_0)} + \frac{1}{2} \left( \frac{t_{pd}^4(\Delta^2 + 4\Delta V_0 + V_0^2 U_d)}{(\Delta^2 - V_0^2)^2(U_d^2 - 4V_0^2)} + \frac{3t_{pd}^4}{\Delta^2 U_d} \right) + \frac{1}{4} \left( \frac{2t_{pd}^4}{(\Delta + U_p)U_d(-\Delta + U_d - 2V_0)} - \right.$$

$$\left. - \frac{t_{pd}^4}{(\Delta + U_p - V_0)(U_d - V_0)(U_d - \Delta - 2V_0)} - \frac{t_{pd}^4}{(\Delta + U_p)(U_d + V_0)(U_d - \Delta - V_0)} \right\}.$$

Здесь введены следующие обозначения:  $\Delta = U_d + 4V_{pd} - \Delta_{pd} - U_p$  и  $V_0 = V_{pd}$ . Если  $h = 0$ , то  $J(h) = J_0$ , что соответствует результату работ [5, 6].

Таким образом, развитый метод позволил последовательно учесть эффекты межузельного кулоновского отталкивания электронов, находящихся на ионах меди и кислорода, и вычислить их вклад в интегралы обменных взаимодействий между спиновыми моментами ионов меди. В результате впервые с квадратичной точностью вычислена зависимость обменного интеграла для спиновых моментов ионов меди от концентрации дырок. Существенно, что при вычислении этой зависимости корректный учет межузельных корреляций обеспечивался рассмотрением окружающих ионы меди кислородных конфигураций, которые не могут быть описаны в рамках однокластерного подхода.

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. Emery V.J. // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 58. P. 2794.
2. Varma C.M., Schmitt-Rink S., Abrahams E. // Solid State Commun. 1987. V. 62. P. 681.
3. Вальков В.В., Коровушкин М.М. // Изв. РАН. Сер. физ. 2007. Т. 71. № 2. С. 261.
4. Боголюбов Н.Н. Лекции по квантовой статистике. Киев: Наук. думка, 1949.
5. Emery V.J., Reiter G. // Phys. Rev. B. 1988. V. 38. P. 4547.
6. Matsukawa H., Fukuyama H. // J. Phys. Soc. Japan. 1989. V. 58. P. 2845.