

ВЛИЯНИЕ ДИАГОНАЛЬНОГО И НЕДИАГОНАЛЬНОГО ЭЛЕКТРОН-ФОНОННЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ НА ФОРМИРОВАНИЕ ЛОКАЛЬНЫХ ПОЛЯРОНОВ И ИХ ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ В ВЕЩЕСТВАХ С СИЛЬНЫМИ ЭЛЕКТРОННЫМИ КОРРЕЛЯЦИЯМИ

Е. И. Шнейдер^{a,b*}, *И. А. Макаров*^a, *М. В. Зотова*^{a,b}, *С. Г. Овчинников*^{a,b}

^a *Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук — обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН
660036, Красноярск, Россия*

^b *Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Сибирский федеральный университет»
660041, Красноярск, Россия*

Поступила в редакцию 20 октября 2017 г.

Для систем с сильными электронными корреляциями и сильным электрон-фононным взаимодействием проведен анализ электрон-фононного взаимодействия в локальных переменных. Описаны эффекты взаимного влияния электрон-электронного и электрон-фононного взаимодействий, определяющие структуру локальных хаббардовских поляронов. В рамках скорректированной формулировки поляронной версии обобщенного метода сильной связи на примере системы, содержащей медь-кислородные слои, рассмотрена конкуренция диагонального и недиагонального взаимодействий электронов с дыхательной модой в процессе формирования зонной структуры поляронов. Показано, что зонная структура хаббардовских поляронов сильно зависит от температуры вследствие возбуждения резонансов Франка–Кондона. Для недопированного соединения La_2CuO_4 прослежена эволюция зонной структуры и спектральной функции от дисперсии дырки в антиферромагнитном диэлектрике при низких температурах с максимумом валентной зоны в точке $(\pi/2, \pi/2)$ до типичного для парамагнитной фазы спектра с максимумом в точке (π, π) . Ширина спектральной линии поляронов на потолке валентной зоны и ее температурная зависимость качественно согласуются с данными фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением для недопированных купратов.

DOI: 10.7868/S0044451018050140

1. ВВЕДЕНИЕ

Развитие представлений о таких веществах, как высокотемпературные сверхпроводящие купраты, а также многие другие оксиды переходных металлов (манганиты, кобальтиты и др.), объединяемых термином «системы с сильными электронными корреляциями», требует корректного учета не только эффектов локального кулоновского электрон-электронного взаимодействия, но и сильного электрон-фононного взаимодействия (ЭФВ). Как правило, исследования подобных систем про-

водятся в простейшем случае в модели Хаббарда или низкоэнергетической эффективной tJ -модели, более реалистичные подходы опираются на многозонную pd -модель или ее редукцию к однозонному гамильтониану. При этом фононная подсистема и электрон-фононное взаимодействие описываются в рамках гамильтониана Хольштейна [1, 2] с постоянной константой связи $g(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = g$ и бездисперсионными модами $\omega_{\mathbf{q}} = \omega$ или в рамках гамильтониана Фрелиха [3] с константой связи $g(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \sim 1/q$, а также в рамках модифицированных гамильтонианов с константами связи, учитывающими особенности взаимодействия [4–17]. (Здесь \mathbf{k} и \mathbf{q} — соответственно исходный импульс электрона и переданный импульс фонона.)

* E-mail: shneyder@iph.krasn.ru

В зависимости от силы ЭФВ взаимодействие электронных возбуждений с решеточными рассматривают различным образом. Если колебания решетки существенно меняют спектр электронов, то говорят о формировании поляронов и исследуют связанное состояние электронов и фононов. В противном случае взаимодействие электронов с фононами описывают по теории возмущений, т. е. полагая, что с решеткой взаимодействуют уже сформированные квазичастицы. Необходимо учитывать, что в сильнокоррелированных системах электронные квазичастичные возбуждения отличаются от фермижидкостных: в силу большого локального кулоновского взаимодействия между электронами двухчастичные состояния оказываются вытолкнутыми в высокоэнергетическую часть спектра. Это приводит к перераспределению спектрального веса между одночастичными и двухчастичными возбуждениями и, как следствие, к формированию существенных особенностей электронной структуры вещества. Соответствующие квазичастичные возбуждения называют хаббардовскими фермионами.

Взаимодействие сформированных хаббардовских фермионов с фононами рассматривалось ранее в работе [18], в том числе в схеме обобщенного метода сильной связи [19, 20], где был выполнен переход к соответствующему низкоэнергетическому гамильтониану [19]. В настоящей работе мы обсудим формирование и свойства квазичастичных возбуждений, обусловленные одновременным сильным влиянием электрон-электронного и электрон-фононного взаимодействий. Такая постановка задачи актуальна для недопированных и слабопированных купратов, а также для многих других Zd -оксидов-диэлектриков Мотта–Хаббарда, находящихся в режиме сильной взаимосвязи электронной и фононной подсистем.

Неприменимость адиабатического подхода и одноэлектронных приближений предполагает поиск новых способов описания. Предлагаемый метод опирается на предположение о том, что перенормировки электронных возбуждений кулоновским и электрон-фононным взаимодействиями обусловлены в первую очередь их локальной частью. Процедура метода такова, что при определении квазичастичных возбуждений локальные эффекты электрон-электронного и электрон-фононного взаимодействий учитываются точно, а нелокальные — в рамках выбранного для данной задачи приближения.

Дальнейший план статьи таков: в разд. 2 рассмотрен последовательный вывод гамильтониана

ЭФВ в системах с сильными электронными корреляциями в локальных переменных. Роль конкуренции диагонального и недиагонального ЭФВ для дыхательной моды в процессе формирования локальных состояний CuO -кластера проанализирована в разд. 3. Для удобства читателей в разд. 4 приведено краткое изложение идеологии и расчетной схемы поляронной версии обобщенного метода сильной связи при учете температурных эффектов. В разд. 5 представлены зонная структура и спектральный вес хаббардовских поляронов при конечных температурах. Обсуждение результатов и выводы содержатся в заключительном разд. 6.

2. АНАЛИЗ ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДЛЯ СИЛЬНОКОРРЕЛИРОВАННЫХ СИСТЕМ В ЛОКАЛЬНЫХ ПЕРЕМЕННЫХ

При выборе исходного гамильтониана будем учитывать, что в системах с сильными электронными корреляциями квазичастичные возбуждения могут обладать свойствами хаббардовского фермиона и полярона одновременно. В поляронной версии обобщенного метода сильной связи такие квазичастицы мы называем хаббардовскими поляронами. Их дисперсия определяется гибридизацией зон хаббардовских фермионов с локальными резонансами Франка–Кондона [21]. Несмотря на то что характерные масштабы электронной структуры в купратах заметно превышают частоты сильно взаимодействующих с электронами колебательных мод, при достаточной величине ЭФВ возникают перенормировки электронной структуры по всей глубине не только валентной зоны, но и зоны проводимости [21]. Иначе говоря, элементарные квазичастичные возбуждения формируются за пределами низкоэнергетических окон эффективных однозонных гамильтонианов. В этом случае адекватное описание, а также построение в дальнейшем соответствующих эффективных гамильтонианов, должны опираться на подходы, стартующие с реалистичных моделей и учитывающие электрон-электронное и электрон-фононное взаимодействие на равной основе. Один из таких вариантов был предложен ранее в работе [22] и получил развитие [21] в рамках обобщенного метода сильной связи (generalized tight-binding, GTB). В настоящем параграфе мы уточним формулировку поляронной версии этого метода, проведя последовательный анализ ЭФВ для систем с СЭК в локальных переменных.

Поскольку выбор гамильтониана для электронной подсистемы зависит в том числе от того, какие колебания будут приняты во внимание, начнем с обсуждения мод, являющихся источниками наиболее сильного ЭФВ в купратах. Как известно [23, 24], к таковым относятся, во-первых, высокоэнергетические моды, изменяющие интегралы перескока с кислорода на медь и таким образом модулирующие большую энергию синглета Жанга – Райса. Это дыхательные (breathing) и полудыхательные (half-breathing) колебания атомов кислорода в CuO-плоскости. Во-вторых, это изгибные (buckling) и поворотные (tilting) моды, вовлекающие колебания в фазе или в противофазе плоскостных атомов кислорода поперек CuO-плоскости вдоль оси c . Некоторые из них связаны с нестабильностью системы относительно структурного фазового перехода. И наконец, моды, характеризующиеся движениями апиического атома кислорода вдоль оси c (apical breathing). Их сильная связь с электронами [25] обусловлена слабой экранировкой электростатического кулоновского взаимодействия в данном направлении. Все перечисленные колебания демонстрируют различные аномалии фононного спектра, указывающие на их сильное взаимодействие с электронами в определенных диапазонах допирования и температур [26–28].

Для модельного описания ЭФВ в поляронной версии обобщенного метода сильной связи мы остановимся на учете оптической, так называемой планарной, дыхательной моды. Она присутствует во всех соединениях-прародителях высокотемпературных сверхпроводников на основе оксидов меди. Ее доминирующий вклад в полную константу электрон-фононной связи был неоднократно продемонстрирован в различных приближениях [6, 29, 30]. Так, при оценке эффектов ЭФВ в купратах на основе расчетов из первых принципов и приближения Мигдала было показано, что для оптимально допированного соединения вклад дыхательных планарных мод в действительную часть собственной энергии электронов, обусловленную их взаимодействием с фононами, является преобладающим [31].

Заметим, что в отличие от дыхательной моды вклад в электрон-фононное взаимодействие от изгибных и поворотных мод в первом порядке по смещениям возникает либо вследствие искажения CuO-плоскостей, либо при наличии конечного электрического поля вдоль оси c , обусловленного, например, асимметричным окружением атомов CuO-плоскости [5]. Кроме того, учет изгибных колебаний требует внимания к эффектам ангармонизма [32]. Ды-

хательные же колебания апиических атомов кислорода, по-видимому, не имеют определяющего значения при описании электронной структуры и некоторых свойств купратов в силу ортогональности фононного волнового вектора и электронного импульса, лежащего в CuO-плоскости [7, 33]. Этот вывод подтверждают эксперименты по позиционно-чувствительному изотопическому замещению атомов кислорода [34], указывающие на преобладающий вклад в изотопическом сдвиге критической температуры T_c именно плоскостных атомов кислорода.

Для описания взаимодействия электронов CuO-плоскости с продольной дыхательной модой рассмотрим следующий гамильтониан:

$$H = H^{el} + H^{ph} + H^{epi}, \quad (1)$$

где H^{el} — гамильтониан реалистичной трехзонной pd -модели купратов, включающей все основные взаимодействия в CuO-плоскости:

$$\begin{aligned} H^{el} = & \sum_{\mathbf{g},\sigma} (\varepsilon_d - \mu) n_{\mathbf{g},\sigma}^d + \sum_{\mathbf{g}} U_d n_{\mathbf{g},\sigma}^d n_{\mathbf{g},-\sigma}^d + \\ & + \sum_{\mathbf{g},\delta,\sigma} (\varepsilon_p - \mu) n_{\mathbf{g}+\delta,\sigma}^p + \sum_{\mathbf{g},\delta} U_p n_{\mathbf{g}+\delta,\sigma}^p n_{\mathbf{g}+\delta,-\sigma}^p + \\ & + \sum_{\langle \mathbf{g},\mathbf{g}' \rangle, \delta, \sigma} P_{\delta\delta'} t_{pp} \left(p_{\mathbf{g}+\delta,\sigma}^\dagger p_{\mathbf{g}'+\delta',\sigma} + \text{H.c.} \right) + \\ & + \sum_{\mathbf{g},\delta,\sigma} P_\delta t_{pd} \left(d_{\mathbf{g},\sigma}^\dagger p_{\mathbf{g}+\delta,\sigma} + \text{H.c.} \right) + \\ & + \sum_{\mathbf{g},\delta,\sigma,\sigma'} V_{pd} n_{\mathbf{g}+\delta,\sigma}^p n_{\mathbf{g},\sigma'}^d. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь векторы \mathbf{g} нумеруют узлы меди, а векторы $\mathbf{g} + \delta$ указывают позиции окружающих их атомов кислорода. Величины ε_d и ε_p — локальные энергии атомных орбиталей меди и кислорода, а $n_{\mathbf{g},\sigma}^d = d_{\mathbf{g},\sigma}^\dagger d_{\mathbf{g},\sigma}$ и $n_{\mathbf{g}+\delta,\sigma}^p = p_{\mathbf{g}+\delta,\sigma}^\dagger p_{\mathbf{g}+\delta,\sigma}$ — соответствующие операторы числа частиц (дырок) со спином σ , t_{pp} и t_{pd} — интегралы перекрытия указанных орбиталей, μ — химический потенциал, U_d и U_p — внутриатомные, а V_{pd} — межатомный кулоновские матричные элементы. Фазовые множители $P_{\delta\delta'}$ и P_δ равны ± 1 в зависимости от того, имеют ли орбитали (с вещественными волновыми функциями) одинаковые или противоположные знаки в области перекрытия.

Гамильтонианы фононной системы и электрон-фононного взаимодействия на данном этапе запишем в самом общем случае, заметив, что для оптических фононов деформационный потенциал пропорционален просто смещениям атомов:

$$H^{ph} = \sum_{\mathbf{q}s} \hbar\omega_{\mathbf{q}s} \left(f_{\mathbf{q}s}^\dagger f_{\mathbf{q}s} + \frac{1}{2} \right), \quad (3)$$

$$H^{epi} = \sum_{\nu, \zeta, \zeta'} M(\nu, \zeta, \zeta') \left(f_{-\nu}^\dagger + f_\nu \right) c_\zeta^\dagger c_{\zeta'}. \quad (4)$$

где $\zeta = (\mathbf{k}, \gamma, \sigma)$, $\nu = (\mathbf{q}, s)$ и $-\nu = (-\mathbf{q}, s)$. Операторы f_ν^\dagger (f_ν) и c_ζ^\dagger (c_ζ) описывают соответственно процессы рождения (уничтожения) фонона s -й ветви с импульсом \mathbf{q} и частотой $\omega_{\mathbf{q}s}$ или электрона с зонным индексом γ , импульсом \mathbf{k} и спином σ . Волновые векторы \mathbf{k} , \mathbf{k}' и \mathbf{q} связаны законом сохранения энергии. Наконец, $M(\nu, \zeta, \zeta')$ — матричный элемент ЭФВ.

Из всех возможных процессов обмена энергией между электронами и фононами мы учтем в уравнении (4) лишь наибольшие вклады для одной дыхательной моды. Это слагаемые, связанные с модуляцией параметров перескока t_{pd} и локальной энергии ε_d электронов на атомах меди (charge density displacement type of electron-phonon interaction). В литературе их также называют соответственно транзитивным (или недиагональным) и локальным (или диагональным) ЭФВ. В силу очевидной конкуренции двух указанных вкладов важно рассмотреть их совместное влияние на характеристики системы. Заметим, что для отдельной молекулы последний вклад обуславливает лишь перенормировку частоты колебаний при изменении электронных чисел заполнения [35]. В решетке же происходит процесс обмена энергией между фононами и d -электронами. Малое перекрытие орбиталей соседних ионов меди позволяет нам не описывать соответствующий перескок в электронном гамильтониане, а масса атомов меди, много большая массы атомов кислорода, позволяет пренебречь смещениями меди. В то же время изменение кристаллического поля на меди может оказаться существенным для сильнокоррелированной системы, так как ведет к изменению энергии квазичастичных возбуждений, определяющих в итоге особенности электронной структуры, а потому этот вклад требует анализа.

Положим, что рассматриваемая мода является бездисперсионной. Тогда в узельном представлении выражения (3), (4) примут простой вид:

$$H^{ph} = \sum_g \hbar\omega \left(f_g^\dagger f_g + \frac{1}{2} \right), \quad (5)$$

$$H^{epi} = \sum_{\mathbf{g}, \sigma} M_d (f_{\mathbf{g}}^\dagger + f_{\mathbf{g}}) d_{\mathbf{g}\sigma}^\dagger d_{\mathbf{g}\sigma} + \sum_{\mathbf{g}, \delta, \sigma} M_{pd} P_\delta (f_{\mathbf{g}}^\dagger + f_{\mathbf{g}}) (d_{\mathbf{g}\sigma}^\dagger p_{\mathbf{g}+\delta, \sigma} + \text{H.c.}). \quad (6)$$

Для реализации процедуры [36, 37] обобщенного метода сильной связи необходимо разделить полный гамильтониан (1) на внутрикластерную и межкластерную части, решив сопутствующую проблему ортогонализации молекулярных орбиталей соседних ячеек. Это позволит найти точные решения для кластера CuO_4 , на их базисе перейти к представлению операторов Хаббарда, и далее к учету межкластерного взаимодействия по теории возмущений. Важно, что определенные таким образом характеристики системы уже в нулевом приближении теории возмущений будут содержать эффекты как сильного локального кулоновского взаимодействия, так и ЭФВ.

Проблема ортогонализации для электронного гамильтониана была решена в работе Шастри [38] путем введения «канонических» фермионов. Подробное описание данной процедуры для многозонной pd -модели в рамках обобщенного метода сильной связи представлено в работе [36]. Авторы работы [22] предложили использовать аналогичный подход и для гамильтониана электрон-фононного взаимодействия. Развивая эту идею, мы скорректируем ее формулировку в соответствии с общими подходами к описанию ЭФВ в кристаллах [39].

Рассмотрим подробно в уравнении (6) недиагональный вклад H_{pd}^{epi} в ЭФВ и учтем связь операторов фононного поля с оператором фононного смещения. Для одной бездисперсионной моды имеем

$$\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (f_{\mathbf{g}}^\dagger + f_{\mathbf{g}}) = Q_{\mathbf{g}},$$

где m — масса атома кислорода. С другой стороны, нормальная координата $Q_{\mathbf{g}}$ планарных дыхательных колебаний соответствует следующей суперпозиции смещений атомов кислорода:

$$Q_{\mathbf{g}} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} (U_{\mathbf{g}+\mathbf{a}_\alpha/2} - U_{\mathbf{g}-\mathbf{a}_\alpha/2}). \quad (7)$$

Здесь $\alpha = x, y$ и \mathbf{a}_α — векторы элементарной ячейки. Выбор знаков перед смещениями соответствует константе ЭФВ $M_{pd} > 0$ и показывает, что интеграл перекрытия t_{pd} уменьшается с ростом длины связи Cu-O . Введем вспомогательные бозонные операторы для каждого смещения —

$$U_{\mathbf{g}\pm\mathbf{a}_\alpha/2} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (e_{\mathbf{g}\pm\mathbf{a}_\alpha/2}^\dagger + e_{\mathbf{g}\pm\mathbf{a}_\alpha/2}) \quad (8)$$

— и упростим обозначения, объединив операторы по парам таким образом, что

$$e_{\alpha, \mathbf{g}}^\dagger = e_{\mathbf{g}+\mathbf{a}_\alpha/2}^\dagger - e_{\mathbf{g}-\mathbf{a}_\alpha/2}^\dagger, \\ p_{\alpha, \mathbf{g}} = p_{\mathbf{g}-\mathbf{a}_\alpha/2} - p_{\mathbf{g}+\mathbf{a}_\alpha/2}.$$

Тогда гамильтониан недиагонального электрон-фононного взаимодействия примет вид

$$H_{pd}^{epi} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{g}, \alpha, \alpha', \sigma} M_{pd} (e_{\alpha, \mathbf{g}}^\dagger + e_{\alpha, \mathbf{g}}) \times (d_{\mathbf{g}\sigma}^\dagger p_{\alpha', \mathbf{g}, \sigma} + \text{H.c.}). \quad (9)$$

Здесь мы учли фазовые множители P_δ , согласовав их выбор с работой [36]. Наконец, выполним в последнем выражении преобразования Фурье, замечая, что для операторов, не центрированных на узлах меди, они подчиняются следующему правилу:

$$e_{\mathbf{g} \pm \mathbf{a}_\alpha / 2} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} e_{\alpha, \mathbf{q}} \exp \left[-i\mathbf{q} \left(\mathbf{g} \pm \frac{\mathbf{a}_\alpha}{2} \right) \right].$$

В итоге получим

$$H_{pd}^{epi} = 2 \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \sigma} M_{pd} (e_{x, \mathbf{q}}^\dagger s_{x, \mathbf{k}} + e_{y, \mathbf{q}}^\dagger s_{y, \mathbf{k}} + \text{H.c.}) \times \left[d_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, \sigma}^\dagger (p_{x, \mathbf{k}, \sigma} s_{x, \mathbf{k}} + p_{y, \mathbf{k}, \sigma} s_{y, \mathbf{k}}) + \text{H.c.} \right], \quad (10)$$

где введено сокращенное обозначение $s_{\alpha, \mathbf{k}} = \sin(k_\alpha a_\alpha / 2)$. Далее, следуя работе Шастри [38], определим «канонические» бозоны и «канонические» фермионы. Как видно из уравнения (10), для рассматриваемой моды (7), (8) канонические преобразования операторов $e_{\alpha, \mathbf{q}}^\dagger$ имеют вид, аналогичный виду преобразований для операторов $p_{\alpha, \mathbf{k}}$, отличаясь лишь знаком:

$$\begin{aligned} b_{\mathbf{k}} &= \frac{i}{\mu_{\mathbf{k}}} (s_{x, \mathbf{k}} p_{x, \mathbf{k}} + s_{y, \mathbf{k}} p_{y, \mathbf{k}}), \\ a_{\mathbf{k}} &= \frac{i}{\mu_{\mathbf{k}}} (s_{y, \mathbf{k}} p_{x, \mathbf{k}} - s_{x, \mathbf{k}} p_{y, \mathbf{k}}) \end{aligned} \quad (11)$$

и

$$\begin{aligned} A_{\mathbf{q}} &= -\frac{i}{\mu_{\mathbf{q}}} (s_{x, \mathbf{q}} e_{x, \mathbf{q}} + s_{y, \mathbf{q}} e_{y, \mathbf{q}}), \\ B_{\mathbf{q}} &= -\frac{i}{\mu_{\mathbf{q}}} (s_{y, \mathbf{q}} e_{x, \mathbf{q}} - s_{x, \mathbf{q}} e_{y, \mathbf{q}}), \end{aligned} \quad (12)$$

где $\mu_{\mathbf{k}} = \sqrt{s_{x, \mathbf{k}}^2 + s_{y, \mathbf{k}}^2}$. Новые бозонные и фермионные операторы центрированы на узлах меди и удовлетворяют необходимым коммутационным соотношениям $[b_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}'}^\dagger]_{\pm} = 0$ и $[B_{\mathbf{q}}, A_{\mathbf{q}'}^\dagger]_{\pm} = 0$. Выполнив соответствующие подстановки, окончательно найдем

$$H_{pd}^{epi} = -2M_{pd} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \sigma} \mu_{\mathbf{k}} \mu_{\mathbf{q}} \varphi_{\mathbf{q}}^A \left(d_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger b_{\mathbf{k}, \sigma} + \text{H.c.} \right), \quad (13)$$

где $\varphi_{\mathbf{q}}^A = (A_{\mathbf{q}}^\dagger + A_{\mathbf{q}})$. Как и следовало ожидать, преобразованный гамильтониан содержит только

один вид бозонных операторов, а именно тот, который сохраняет симметрию исходной колебательной моды. Кроме того, по сравнению с предыдущей версией преобразований [21, 22], в уравнении (13) изменился коэффициент Ванье перед константой недиагонального вклада. Эти результаты отличают предлагаемую формулировку метода от реализованной ранее в работах [21, 22].

Совершив аналогичные преобразования для гамильтониана H_d^{epi} , описывающего в уравнении (6) диагональный вклад в ЭФВ, получим

$$H_d^{epi} = M_d \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \sigma} \mu_{\mathbf{q}} \varphi_{\mathbf{q}}^A \left(d_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger d_{\mathbf{k}, \sigma} + \text{H.c.} \right). \quad (14)$$

Здесь учтено, что энергия дырок на меди растет при росте длины связи Cu–O, при этом $M_d > 0$. Заметим, что учет симметрии колебаний модифицировал полные константы связи: для недиагонального взаимодействия полная константа зависит как от переданного импульса \mathbf{q} , так и от исходного импульса электрона \mathbf{k} , в то время как для диагонального вклада имеется только зависимость от вектора \mathbf{q} , что согласуется с результатами других авторов [7, 40].

Для того чтобы переписать в новых переменных (12) гамильтониан (5) свободных фононов H^{ph} , учтем связь нормальной координаты $Q_{\mathbf{g}}$ с нормальным импульсом $P_{\mathbf{g}}$, выразим каждую величину $Q_{\mathbf{g}}$ и $P_{\mathbf{g}}$ в операторах $e_{\alpha, \mathbf{g}}^\dagger (e_{\alpha, \mathbf{g}})$ и далее в операторах «канонических бозонов» $A_{\mathbf{q}}^\dagger (A_{\mathbf{q}})$ и $B_{\mathbf{q}}^\dagger (B_{\mathbf{q}})$:

$$H^{ph} = \sum_{\mathbf{q}} \hbar\omega \left[\left(A_{\mathbf{q}}^\dagger A_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right) + \left(B_{\mathbf{q}}^\dagger B_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right) \right]. \quad (15)$$

Важно, что операторы бозонных возбуждений $B_{\mathbf{q}}^\dagger (B_{\mathbf{q}})$ не смешиваются ни с какими другими возбуждениями полного гамильтониана, а потому могут быть полностью исключены из рассмотрения.

Проведенные преобразования позволяют в узельном представлении разбить гамильтонианы фононной системы и электрон-фононного взаимодействия на локальную внутрикластерную $H_c^{ph, epi}$ и межкластерную $H_{cc}^{ph, epi}$ части. Для электронного гамильтониана (2) сразу воспользуемся результатом соответствующих преобразований (11). В итоге полный гамильтониан запишем как

$$\begin{aligned} H &= H_c + H_{cc}, \\ H_c &= \sum_{\mathbf{g}} H_{\mathbf{g}}, \quad H_{cc} = \sum_{\mathbf{g}, \mathbf{g}', \sigma} H_{\mathbf{g}\mathbf{g}', \sigma}, \end{aligned} \quad (16)$$

где локальные вклады имеют вид

$$H_{\mathbf{g}}^{el} = \sum_{\sigma} (\varepsilon_d - \mu) n_{\mathbf{g},\sigma}^d + \sum_{\sigma} (\varepsilon_b - \mu) n_{\mathbf{g},\sigma}^b + U_d n_{\mathbf{g},\sigma}^d n_{\mathbf{g},-\sigma}^d + U_b n_{\mathbf{g},\sigma}^b n_{\mathbf{g},-\sigma}^b + \sum_{\sigma,\sigma'} V_{bd} n_{\mathbf{g},\sigma}^d n_{\mathbf{g},\sigma'}^b - 2t_{pd}\mu_{00} \sum_{\sigma} (d_{\mathbf{g},\sigma}^{\dagger} b_{\mathbf{g},\sigma} + \text{H.c.}), \quad (17)$$

$$H_{\mathbf{g}}^{ph} = \hbar\omega \left(A_{\mathbf{g}}^{\dagger} A_{\mathbf{g}} + \frac{1}{2} \right), \quad (18)$$

$$H_{\mathbf{g}}^{epi} = M_d \mu_{00} \sum_{\sigma} \varphi_{\mathbf{g}}^A n_{\mathbf{g},\sigma}^d - 2M_{pd} \mu_{00}^2 \sum_{\sigma} \varphi_{\mathbf{g}}^A (d_{\mathbf{g},\sigma}^{\dagger} b_{\mathbf{g},\sigma} + \text{H.c.}), \quad (19)$$

а межкластерная часть определена как

$$H_{\mathbf{g}\mathbf{g}',\sigma}^{el} = -2t_{pd}\mu_{\mathbf{g}\mathbf{g}'} (d_{\mathbf{g},\sigma}^{\dagger} b_{\mathbf{g}',\sigma} + \text{H.c.}) - 2t_{pp}\nu_{\mathbf{g}\mathbf{g}'} b_{\mathbf{g},\sigma}^{\dagger} b_{\mathbf{g}',\sigma}, \quad (20)$$

$$H_{\mathbf{g}\mathbf{g}',\sigma}^{epi,d} = M_d \mu_{\mathbf{g}\mathbf{g}'} \varphi_{\mathbf{g}}^A n_{\mathbf{g}',\sigma}^d, \quad (21)$$

$$H_{\mathbf{g}\mathbf{g}',\sigma}^{epi,pd} = -2M_{pd} \sum_{\mathbf{h}} \mu_{\mathbf{g}\mathbf{g}'} \mu_{\mathbf{h}\mathbf{g}'} \times \varphi_{\mathbf{g}}^A (d_{\mathbf{g}',\sigma}^{\dagger} b_{\mathbf{h},\sigma} + \text{H.c.}). \quad (22)$$

Здесь отброшены быстро убывающие с расстоянием межкластерные вклады от кулоновских матричных элементов U_p и V_{pd} [36], а фурье-образы коэффициентов Ванье выглядят следующим образом:

$$\mu_{\mathbf{g}\mathbf{g}'} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \mu_{\mathbf{k}} \exp[-i\mathbf{k}(\mathbf{g} - \mathbf{g}')],$$

$$\nu_{\mathbf{g}\mathbf{g}'} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{4s_x^2 s_y^2}{\mu_{\mathbf{k}}^2} \exp[-i\mathbf{k}(\mathbf{g} - \mathbf{g}')].$$

Предложенная форма анализа электрон-фононного взаимодействия в локальных переменных позволяет объединить рассмотрение эффектов сильных электронных корреляций и ЭФВ в единой схеме обобщенного метода сильной связи.

3. РОЛЬ КОНКУРЕНЦИИ ДИАГОНАЛЬНОГО И НЕДИАГОНАЛЬНОГО ЭФВ ДЛЯ ДЫХАТЕЛЬНОЙ МОДЫ В ПРОЦЕССЕ ФОРМИРОВАНИЯ ЛОКАЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ КЛАСТЕРА

В схеме обобщенного метода сильной связи локальные состояния кластера определяют возможные квазичастичные возбуждения, являющиеся результатом перехода из одного состояния в другое.

Рассмотрим, как интенсивность электрон-фононного взаимодействия влияет на структуру локальных состояний коррелированных электронов. Процедуру диагонализации полного гамильтониана H_c выполним для различных конфигураций медных и кислородных орбиталей, соответствующих недопированному составу с одной дыркой на узел ($d^9 p^6$, $d^{10} p^5$), а также случаям с нулем ($d^{10} p^6$) и двумя дырками на узел ($d^9 p^5$, $d^{10} p^4$ и $d^8 p^6$). Вследствие электрон-фононного взаимодействия каждое электронное состояние кластера размывается в набор поляронных уровней, различающихся фононной «шубой». Так, для «вакуумного» сектора с числом дырок $n_h = 0$ собственные состояния кластера имеют вид

$$|0, \nu\rangle = |d^{10} p^6\rangle |\nu\rangle, \quad (23a)$$

где $|\nu\rangle$ — многофононное состояние с числом фононов $n_{ph} = \nu$. Для однодырочного $n_h = 1$ и двухдырочного $n_h = 2$ секторов учтем только нижние поляронные состояния, образованные соответственно спиновым дублетом $|1\sigma\rangle$ и синглетом $|2\rangle$, тогда

$$|1\sigma, i\rangle = \sum_{\nu=0}^{N_{max}} (c_{i,\nu}^d |d_{\sigma}\rangle + c_{i,\nu}^b |b_{\sigma}\rangle) |\nu\rangle, \quad (23b)$$

$$|2, j\rangle = \sum_{\nu=0}^{N_{max}} (c_{j,\nu}^{ZR} |ZR\rangle + c_{j,\nu}^{dd} |d_{-\sigma} d_{\sigma}\rangle + c_{j,\nu}^{bb} |b_{-\sigma} b_{\sigma}\rangle) |\nu\rangle. \quad (23c)$$

Здесь

$$|d_{\sigma}\rangle = d_{\sigma}^{\dagger} |0\rangle, \quad |b_{\sigma}\rangle = b_{\sigma}^{\dagger} |0\rangle,$$

$$|ZR\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |d_{-\sigma}^{\dagger} b_{\sigma}^{\dagger} - d_{\sigma}^{\dagger} b_{-\sigma}^{\dagger} |0\rangle.$$

Подробно схема уровней рассмотрена в работе [21].

Параметры электронного гамильтониана H^{el} многозонной pd -модели (2) для La_2CuO_4 были получены ранее [41] путем проектирования [42] электронной структуры, определенной из первых принципов в приближении локальной электронной плотности, на базис функций Ванье. Соответствующие величины параметров гамильтониана H_c^{el} приведены ниже. Заметим, что в отличие от данных таблицы III из работы [41] мы не нормируем интегралы перескока на величину t_{pd} , таким образом,

$$\varepsilon_d = 0, \quad \varepsilon_p = 0.9, \quad \varepsilon_b = \varepsilon_p - 2t_{pp}\nu_{00} = 0.35,$$

$$t_{pp} = 0.86, \quad t_{pd} = 1.36$$

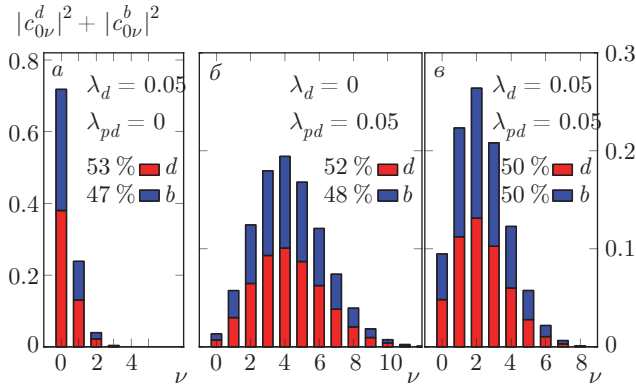


Рис. 1. (В цвете онлайн) Структура основного состояния локальных поляронов в одночастичном секторе, $n_h = 1$. По оси x отложено число фононов ν , по оси y — суммарная вероятность найти дырку с данными значениями ν , т. е. сумма квадратов амплитуд в формуле (23b)

(все величины приведены в электронвольтах). Кулоновские матричные элементы взяты из работы [43], где рассматривалась подгонка электронной структуры к экспериментальным данным спектроскопии с угловым разрешением (все в электронвольтах):

$$U_d = 9, \quad U_p = 4, \quad U_b = U_p \Phi_{0000} = 0.84,$$

$$V_{pd} = 1.5, \quad V_{bd} = V_{pd} \Phi_{000} = 1.38.$$

Здесь коэффициенты Φ_{0000} и Φ_{000} , так же как ν_{00} и μ_{00} из уравнения (17), описывают изменения исходных параметров H^{el} при ортогонализации молекулярных орбиталей соседних кластеров [44].

Интенсивность электрон-фононного взаимодействия мы задаем безразмерным параметром $\lambda_{d(pd)} = M_{d(pd)}^2 / W \hbar \omega$, где частота планарной дыхательной моды $\hbar \omega = 0.09$ эВ, а W — полуширина зоны свободных электронов. В методе сильной связи $W = zt$, где z — координационное число; в наших расчетах $W = 2.15$ эВ. Такое определение безразмерной константы связи часто используется в литературе [24, 45, 46]. По сути, параметр λ является отношением энергии локализованного электрона в деформированной решетке к кинетической энергии его делокализации [17].

Согласно формулам (23), структура локальных поляронных состояний (рис. 1) определяется, во-первых, распределением электронной плотности по орбиталям, а во-вторых, числом фононов ν от 0 до N_{max} , вовлеченных в формирование поляронного состояния при заданной силе ЭФВ. Заметим, что мы не фиксируем заранее в расчетах величину N_{max} , определяя ее для заданного ЭФВ таким образом, чтобы сумма вероятностей распределения электрон-

ной плотности по всем состояниям с индексом ν составляла не менее 99%. В-третьих, локальные состояния характеризуются максимумом вероятности распределения электронной плотности по состояниям с различным числом фононов. Согласно этим максимумам, мы называем состояния нульфононными, однофононными и т. д., хотя число фононов не является в данном случае квантовым числом.

На рис. 1 показана структура основного состояния локальных поляронов в одночастичном секторе для различных соотношений параметров диагонального и недиагонального ЭФВ, демонстрирующих их взаимное влияние.

Как видно из сопоставления рис. 1a и 1б, диагональное ЭФВ приводит к значительно более слабым перенормировкам электронных состояний. Так, при $\lambda_d = 0.05$ и $\lambda_{pd} = 0$ формируется состояние с максимумом вероятности на нуле фононов, в то время как в противоположном случае ($\lambda_d = 0$ и $\lambda_{pd} = 0.05$) реализуется многофононное состояние с максимумом вероятности для $\nu = 4$. Рисунок 1в демонстрирует ослабление недиагонального вклада диагональным, что указывает на их конкурирующий характер. Обратим внимание также на перераспределение электронной плотности по отношению к случаю без ЭФВ: диагональный вклад приводит к росту заселенности орбиталей меди, а недиагональный — орбиталей кислорода. Взаимное влияние этих вкладов обуславливает переход от малого к большому локальному полярону.

Рассмотрим подробно, каким образом конкуренция диагонального и недиагонального ЭФВ влияет на переход от нульфононных состояний к многофононным. На рис. 2 показана карта таких переходов для основного состояния в одночастичном (рис. 2a) и двухчастичном (рис. 2б) секторах. Формирование многофононных состояний, обусловленное недиагональным вкладом, т. е. на линии $\lambda_d = 0$ справа от полосы нульфононных состояний, начинается с величин $\lambda_{pd} \geq 0.025$ для $n_h = 1$ и с величин $\lambda_{pd} = 0.008$ для $n_h = 2$, в то время как диагональный вклад приводит к формированию многофононных состояний лишь для величин λ_d , на порядок больших, а именно, при $\lambda_d \geq 0.3$ для $n_h = 1$ и $\lambda_d \geq 0.2$ для $n_h = 2$. Заметим, что ввиду сильного подавления диагонального вклада недиагональным полоса многофононных состояний, обусловленных диагональным вкладом, реализуется в очень узком диапазоне параметра λ_{pd} и не может быть отображена на рисунке при заданном масштабе. Таким образом, для дыхательной моды недиагональный вклад является преобладающим, а его рост способствует быстрому

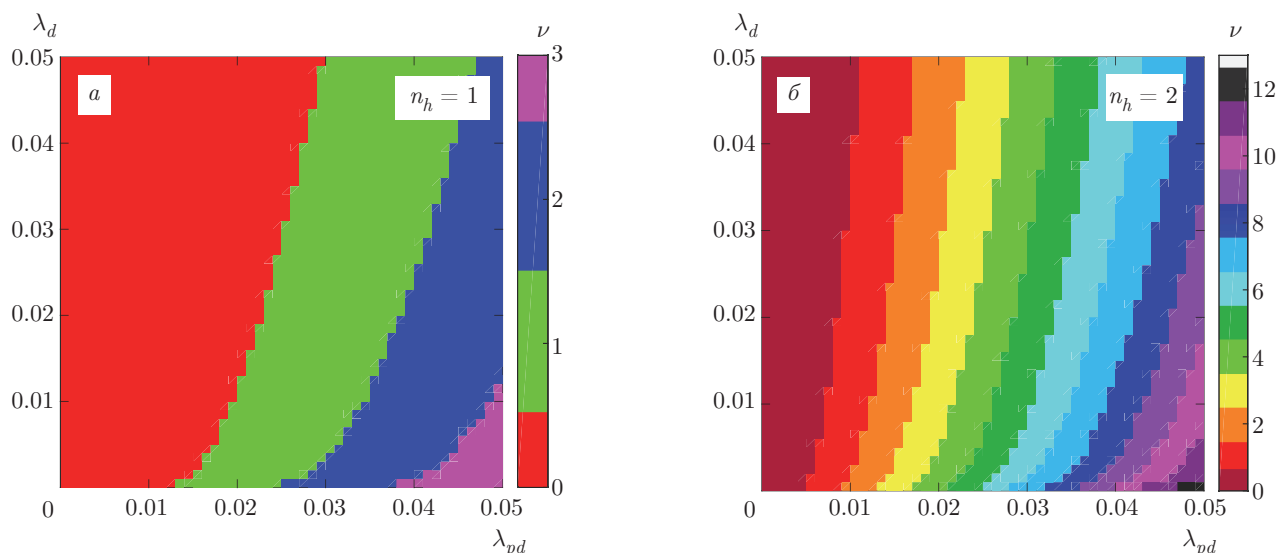


Рис. 2. (В цвете онлайн) Влияние параметров ЭФВ на положение максимума вероятности в распределении электронной плотности по состояниям с различным числом фононов ν

смещению вероятности распределения электронной плотности на состояния с большим числом фононов.

Мы также проследили влияние кулоновского взаимодействия U_d на структуру локальных поляронных состояний в условиях сильного ЭФВ. С этой целью были сопоставлены карты переходов от нульфононных состояний к многофононным для основного состояния в двухчастичном секторе при различных величинах параметра U_d . Распределение вероятностей по состояниям с различным числом фононов показало, что при большей величине параметра локального кулоновского взаимодействия многофононные состояния реализуются для больших параметров ЭФВ. Так, на линии $\lambda_d = 0$ многофононные состояния начинаются с величины $\lambda_{pd} = 0.008$ при $U_d = 9$ эВ, далее с величины $\lambda_{pd} = 0.009$ при $U_d = 13$ эВ или с величины $\lambda_{pd} = 0.010$ при $U_d = 18$ эВ. Для диагонального взаимодействия эффект более выраженный: на линии $\lambda_{pd} = 0$ многофононные состояния начинаются с величины $\lambda_d = 0.20$ при $U_d = 9$ эВ, с величины $\lambda_d = 0.24$ при $U_d = 13$ эВ или с величины $\lambda_d = 0.26$ при $U_d = 18$ эВ. Таким образом, в процессе формирования локальных поляронных состояний электронные корреляции подавляют эффекты ЭФВ.

Сравнение распределения вероятностей по состояниям с различным числом фононов для одночастичного и двухчастичного секторов при одинаковых параметрах локального кулоновского взаимодействия также указывает на то, что кулонов-

ское взаимодействие усиливает эффект компенсации диагонального вклада недиагональным. Иначе говоря, подавление эффектов ЭФВ электронными корреляциями более выражено для диагонального вклада. Это можно объяснить тем, что локальные кулоновские корреляции подавляют флуктуации плотности заряда на меди, в то время как последние играют определяющую роль именно в диагональном ЭФВ.

Взаимное влияние сильных электронных корреляций и сильного ЭФВ — одна из краеугольных проблем теоретического описания систем с СЭК. Очевидно, что результат интерференции этих взаимодействий может различаться не только для мод различной симметрии, но и для различных вкладов, обусловленных одной модой. С этой точки зрения интересны подходы, стартующие с микроскопического описания. Рассмотрим, как результаты, полученные выше, коррелируют с выводами других авторов.

В работах [13, 14] эффекты диагонального и недиагонального ЭФВ для планарной дыхательной моды обсуждались на основе tJ -модели, т. е. уже для сформированных сильными корреляциями квазичастичных возбуждений. В этом случае диагональное взаимодействие связано с модуляцией энергии синглета Жанга–Райса вследствие изменений набора параметров t_{pd} , ε_d , ε_p и U_{pd} , а недиагональный вклад определяется модуляцией параметра перескока для синглета Жанга–Райса (для сравне-

ния см. формулу (6) и рассуждения перед ней). Такое описание справедливо для более слабого ЭФВ и не может быть напрямую сопоставлено с выводами, полученными выше. Тем не менее заметим, что, анализируя потенциал сверхпроводящего спаривания, квазичастичные перенормировки, туннельные и оптические спектры, авторы работы [13] подчеркивают определяющую роль недиагонального вклада. Этот вывод сохраняется не только в режиме мотт-Хаббардовского диэлектрика, где подавлены зарядовые флуктуации, но и в режиме слабого допирования, где значительную роль играют перенормировки вершины электрон-фононного взаимодействия.

Стоит обратить внимание, что в работе [14] анализировались матричные элементы соответствующих вкладов. Опираясь на предположения о зависимости параметров перескока t_{pd} и кулоновского взаимодействия V_{pd} от расстояния, авторы показали, что недиагональный матричный элемент существенно меньше диагонального. Однако это не противоречит нашим выводам, так как из проведенного выше анализа видно, что роль диагонального вклада в процессе формирования локальных поляронов остается незначительной даже для параметров связи, на порядок превышающих недиагональный вклад.

Наконец, отметим работу [47], где авторы рассматривали эффекты ЭФВ в коррелированной системе в рамках микроскопической pd -модели и показали, что именно недиагональное ЭФВ с дыхательной модой дает существенный вклад в перенормировки зон.

Косвенно выводы о преобладающем недиагональном вкладе подтверждают исследования динамической зарядовой восприимчивости в работе [48]. Здесь было показано, что совокупность всех экспериментальных данных может быть объяснена лишь в предположении, что взаимодействие через поле фононов различно на разных участках поверхности Ферми, т. е. параметры электрон-фононной связи зависят как от величины переданного импульса \mathbf{q} , так и от волнового вектора \mathbf{k} . В рамках предложенного подхода такая зависимость возникает только для недиагонального вклада, что видно из сравнения формул (13) и (14).

В работе [49] исследовалось влияние сильных электронных корреляций на перенормировки фононных спектров в рамках единого подхода для различных одномерных моделей ЭФВ, соответствующих диагональному [1] и недиагональному [50] типам взаимодействий. С помощью зависящего от времени приближения Гутцвиллера было показано, что перенормировки фононной частоты, обу-

словленные диагональным вкладом, уменьшаются с ростом локального кулоновского взаимодействия. Этот результат дополняет выводы работы [51] о том, что для систем с большей размерностью электрон-электронные корреляции эффективно экранируют взаимодействие носителей с решеткой, и согласуется с нашими данными о подавлении эффектов ЭФВ кулоновскими корреляциями.

Таким образом, полученные выше результаты коррелируют с результатами других авторов и могут служить отправной точкой при выборе способа описания различных свойств систем с сильными электронными корреляциями и сильным ЭФВ.

4. СХЕМА РАСЧЕТА ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ В ПОЛЯРОННОЙ ВЕРСИИ ОБОБЩЕННОГО МЕТОДА СИЛЬНОЙ СВЯЗИ

После диагонализации гамильтониана кластера (17)–(19) полный гамильтониан (17)–(22) может быть переписан в операторах Хаббарда, построенных на базисе локальных поляронных состояний $|0, \nu\rangle$, $|1, i\rangle$ и $|2, j\rangle$ по следующему правилу:

$$Q_{\mathbf{g}} = \sum_{p,q} \langle p | Q_{\mathbf{g}} | q \rangle X_{\mathbf{g}}^{pq} = \sum_m \gamma^m X_{\mathbf{g}}^m. \quad (24)$$

Здесь $Q_{\mathbf{g}}$ — произвольный оператор на узле \mathbf{g} и γ^m — матричный элемент, определяющий вероятность возбуждения из начального состояния $|q\rangle$ в конечное состояние $|p\rangle$ для заданной m -й пары состояний. Заметим, что в новом представлении фермиевские операторы описывают квазичастичные дырочные $X_{\mathbf{g}}^{2j,1i}$ и электронные $X_{\mathbf{g}}^{0\nu,1i}$ возбуждения, которые меняют среднее число фононов и поляризацию кислородного окружения атома меди.

При исследовании полного гамильтониана мы точно учтем эффекты ЭФВ, обусловленные локальными внутрикластерными вкладами (18), (19), и отбросим межкластерное ЭФВ (21), (22), замечая, что перенормирующие его коэффициенты Ванье $\mu_{\mathbf{g}\mathbf{g}'}$ и $\nu_{\mathbf{g}\mathbf{g}'}$ быстро убывают с расстоянием. Получим

$$\begin{aligned} H_c &= \sum_{\mathbf{f},\nu} \varepsilon_{0\nu} Z_f^{0\nu,0\nu} + \sum_{\mathbf{f},i} \varepsilon_{1i} Z_f^{1i,1i} + \\ &\quad + \sum_{\mathbf{f},j} \varepsilon_{2j} Z_f^{2j,2j}, \\ H_{cc} &= \sum_{\mathbf{f} \neq \mathbf{g}, \sigma} \sum_{m,n} \left[-2t_{pp\nu_{\mathbf{f}\mathbf{g}}} (\gamma_{b,\sigma}^m)^* \gamma_{b,\sigma}^n - \right. \\ &\quad \left. - 2t_{pd}\mu_{\mathbf{f}\mathbf{g}} \left((\gamma_{d,\sigma}^m)^* \gamma_{b,\sigma}^n + (\gamma_{b,\sigma}^m)^* \gamma_{d,\sigma}^n \right) \right] X_{\mathbf{f}}^{\dagger m} X_{\mathbf{g}}^n. \end{aligned} \quad (25)$$

Здесь $Z_{\mathbf{f}}^{pp'}$ — бозевские операторы Хаббарда локальных экситонных возбуждений, происходящих без изменения числа дырок в начальном и конечном состояниях, и $\varepsilon_{0\nu}, \varepsilon_{1i}, \varepsilon_{2j}$ — энергии собственных многоэлектронных и многофотонных состояний кластера с числом дырок соответственно $n_h = 0, 1, 2$. Обратим внимание, что матричные элементы $\gamma_{d(b),\sigma}^m$, входящие в выражение для H_{cc} , по определению содержат эффекты внутрикластерного ЭФВ.

Согласно уравнению (24), в представлении операторов Хаббарда электронная функция Грина

$$G_{\lambda\lambda',\sigma}(\mathbf{f}, \mathbf{g}; \omega) = \left\langle \left\langle a_{\mathbf{f}\lambda\sigma} \left| a_{\mathbf{g}\lambda'\sigma}^\dagger \right. \right\rangle \right\rangle_{\omega}$$

с зонными индексами $\lambda = b, d$ выражается через квазичастичные функции

$$D_{mn}(\mathbf{f}, \mathbf{g}; \omega) = \left\langle \left\langle X_{\mathbf{f}}^m \left| X_{\mathbf{g}}^n \right. \right\rangle \right\rangle_{\omega}$$

посредством соотношения

$$G_{\lambda\lambda',\sigma}(\mathbf{f}, \mathbf{g}; \omega) = \sum_{m,n} \gamma_{\lambda,\sigma}^m (\gamma_{\lambda',\sigma}^n)^* D_{mn}(\mathbf{f}, \mathbf{g}; \omega). \quad (26)$$

Выражения для квазичастичных функций Грина были получены в обобщенном приближении Хартри–Фока с помощью процедуры типа проекционной техники Мори [52, 53]. В таком подходе нулевая функция Грина в уравнении Дайсона содержит статические пространственные корреляционные функции, которые существенно ренормируют спектр хаббардовских возбуждений [54–57]. В итоге дисперсионное выражение для квазичастиц выглядит следующим образом:

$$\det \|(\omega - \Omega_m) \delta_{mn} - F_m t_{mn}(\mathbf{k}) - \Sigma_{mn}(\mathbf{k})\| = 0. \quad (27)$$

Обратим внимание на то, что индексы m и n нумеруют квазичастичные возбуждения, а индексы в скобках, например (zw) , указывают эти возбуждения непосредственно как переходы между соответствующими состояниями z и w . Величины $\Omega_m \equiv \equiv \Omega_{(pq)} = \varepsilon_q - \varepsilon_p$ определяют энергию квазичастичных возбуждений. Коэффициенты $F_m \equiv F_{(pq)} = \langle X^{pp} \rangle + \langle X^{qq} \rangle$ зависят от средних чисел заполнения начального и конечного состояний и называются факторами заполнения. Элементы $t_{mn}(\mathbf{k})$ матрицы межкластерных перескоков имеют вид

$$t_{mn}(\mathbf{k}) = -\frac{2}{N} \sum_{(\mathbf{f}-\mathbf{g}),\sigma} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{f}-\mathbf{g})} \left[t_{pp\nu\mathbf{f}\mathbf{g}} (\gamma_{b,\sigma}^m)^* \gamma_{b,\sigma}^n + t_{pd\mu\mathbf{f}\mathbf{g}} \left((\gamma_{d,\sigma}^m)^* \gamma_{b,\sigma}^n + (\gamma_{b,\sigma}^m)^* \gamma_{d,\sigma}^n \right) \right]. \quad (28)$$

Вклад спиновых корреляционных функций задается элементами матрицы $\Sigma_{mn}(\mathbf{k}) = \Sigma_{(uv),(zw)}(\mathbf{k})$:

$$\Sigma_{(uv),(zw)}(\mathbf{k}) = \frac{2}{F_{(zw)}} \times \sum_{\mathbf{k}',\sigma} \left\{ \begin{array}{l} \sum_{p,s} t_{(pu)(zs)}(\mathbf{k}') c_{\mathbf{k}'}^{(pv)(ws)}, \Leftrightarrow n_h^u = 0, n_h^z = 0, \\ \sum_{p,r} t_{(pu)(rw)}(\mathbf{k}') c_{\mathbf{k}'}^{(pv)(rz)}, \Leftrightarrow n_h^u = 0, n_h^z = 1, \\ \sum_{q,s} t_{(vq)(zs)}(\mathbf{k}') c_{\mathbf{k}'}^{(uq)(ws)}, \Leftrightarrow n_h^u = 1, n_h^z = 0, \\ \sum_{q,r} t_{(vq)(rw)}(\mathbf{k}') c_{\mathbf{k}'}^{(uq)(rz)}, \Leftrightarrow n_h^u = 1, n_h^z = 1. \end{array} \right.$$

Здесь собственные функции перебираются таким образом, что число дырок n_h в состояниях u, z, q и s на единицу меньше, чем в состояниях v, w, p, r . Кроме того, состояния p и v (либо w и s) в структуре спиновой корреляционной функции $c_{\mathbf{k}}^{(pv)(ws)}$ имеют противоположные проекции спина. Будем учитывать корреляторы, построенные только на основных однодырочных состояниях, а также предположим, что в системе реализуется состояние изотропной спиновой жидкости с ближним антиферромагнитным порядком. В этом случае фурье-образы спиновых корреляционных функций имеют вид

$$c_{\mathbf{k}}^{(pv)(ws)} = \sum_{\mathbf{f},\mathbf{g}} \langle X_{\mathbf{f}}^{pv} X_{\mathbf{g}}^{ws} \rangle e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{f}-\mathbf{g})} = \sum_{\mathbf{f},\mathbf{g}} \langle X_{\mathbf{f}}^{\sigma\bar{\sigma}} X_{\mathbf{g}}^{\bar{\sigma}\sigma} \rangle e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{f}-\mathbf{g})} = 2 \sum_{\mathbf{f},\mathbf{g}} \langle S_{\mathbf{f}}^z S_{\mathbf{g}}^z \rangle e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{f}-\mathbf{g})}, \quad (29)$$

где $\bar{\sigma} = -\sigma$.

Наличие фактора заполнения в уравнении (27) приводит к температурным зависимостям зонной структуры и спектрального веса квазичастиц [58]. Этот эффект для систем с сильными электронными корреляциями был продемонстрирован ранее на примере соединения LaCoO_3 , где сильная зависимость чисел заполнения от температуры обусловлена кроссовером между низкоспиновым и высокоспиновым состояниями иона Co^{+3} . Заполнение собственных однодырочных состояний кластера при конечной температуре задается распределением Больцмана

$$n_{1,i} = n_{1,i=0} \exp \left[-\frac{\varepsilon_{1,i} - \varepsilon_{1,i=0}}{kT} \right]. \quad (30)$$

При $T = 0$ К ненулевой спектральный вес имеют только возбуждения с участием заполненного основного состояния. С ростом температуры заполнение

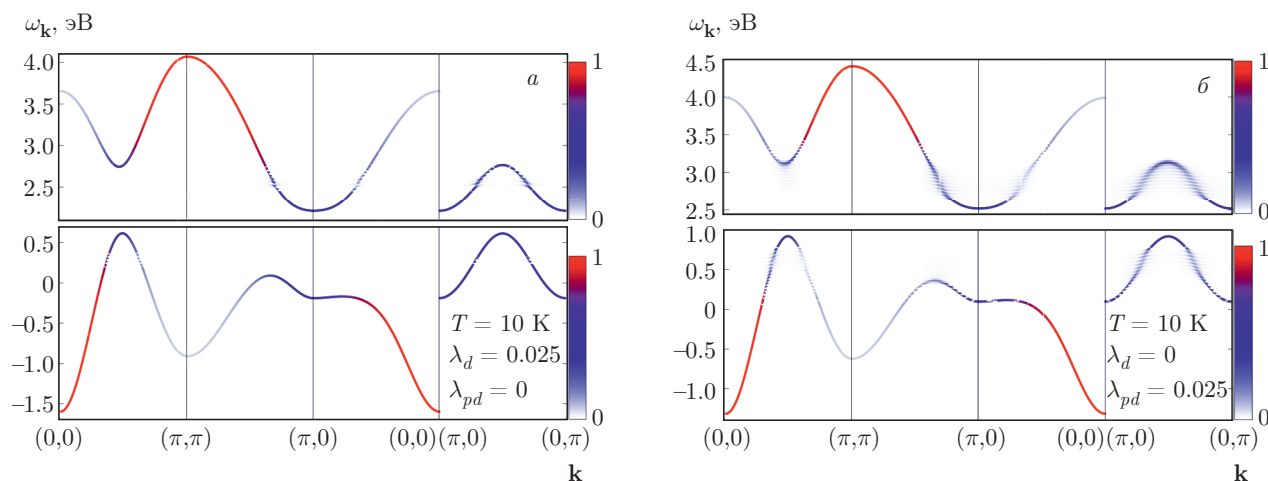


Рис. 3. (В цвете онлайн) Зонная структура хаббардовских поляронов при учете только диагонального (а) и недиагонального (б) ЭФВ для температуры $T = 10$ К. Верхняя часть рисунка показывает зону проводимости, нижняя — валентную зону. Цвет в каждой точке дисперсионной зависимости характеризует спектральную интенсивность квазичастичного возбуждения с данными \mathbf{k} и $\omega_{\mathbf{k}}$ по относительной шкале, показанной справа

основного состояния уменьшается, в то время как заполнение первого, второго и последующих возбужденных уровней растет в соответствии с выражением (30). При $T = 800$ К, например, заполнение имеет существенную величину вплоть до седьмого возбужденного состояния:

$$n_0 = 0.42, \quad n_1 = 0.24, \quad n_2 = 0.14, \quad n_3 = 0.08, \\ n_4 = 0.02, \quad n_5 = 0.01, \quad n_6 = 0.007, \quad n_7 = 0.003.$$

Заметим, что мы не учитываем ангармонических эффектов, роль которых растет с температурой, а потому приведенные ниже результаты для высоких температур носят качественный характер.

5. ЗОННАЯ СТРУКТУРА И СПЕКТРАЛЬНЫЙ ВЕС ПОЛЯРОНОВ ПРИ КОНЕЧНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Зонная структура квазичастичных возбуждений системы с сильными электронными корреляциями и сильным ЭФВ представляет собой зоны хаббардовских фермионов, расщепленные на подзоны в результате гибридизации с многофононными резонансами Франка – Кондона. Как диагональное, так и недиагональное ЭФВ приводят к расщеплениям зоны когерентных возбуждений в определенном интервале энергий и переносу спектрального веса на высокоэнергетические многофононные возбуждения со слабой дисперсией. Сила электрон-фононной связи влияет на количество и степень расщеплений,

распределение спектрального веса между многофононными возбуждениями. Потеря спектрального веса и размытие дисперсии свидетельствуют о частичной потере когерентности квазичастиц. Иначе говоря, квазичастицы становятся хуже определенными. Видно, что эффект от диагонального ЭФВ значительно меньше (рис. 3а), чем от недиагонального (рис. 3б). В случае диагонального ЭФВ с константой $\lambda_d = 0.025$ слабое расщепление на подзоны происходит в зоне проводимости, валентная зона почти не затронута (рис. 3а). В случае недиагонального ЭФВ ($\lambda_{pd} = 0.025$) в зоне проводимости и в валентной зоне четко выделяются области энергий, в которых взаимодействие с многофононными возбуждениями разрушает когерентность квазичастиц, формирующих зону (рис. 3б). Одновременное присутствие диагонального и недиагонального ЭФВ сопровождается их частичной компенсацией. В режиме равных диагонального и недиагонального ЭФВ диагональное ЭФВ в небольшой степени уменьшает эффект от недиагонального ЭФВ, наиболее высокоэнергетические возбуждения теряют спектральный вес, закрываются расщепления в широкой зоне хаббардовских фермионов на энергиях этих возбуждений (рис. 4а). В целом дисперсия низкоэнергетических возбуждений в случае равных диагонального и недиагонального ЭФВ остается такой же, как в случае только недиагонального ЭФВ.

При увеличении температуры квазичастицы, построенные с участием заполненных однодырочных возбужденных состояний, приобретают дисперсию и

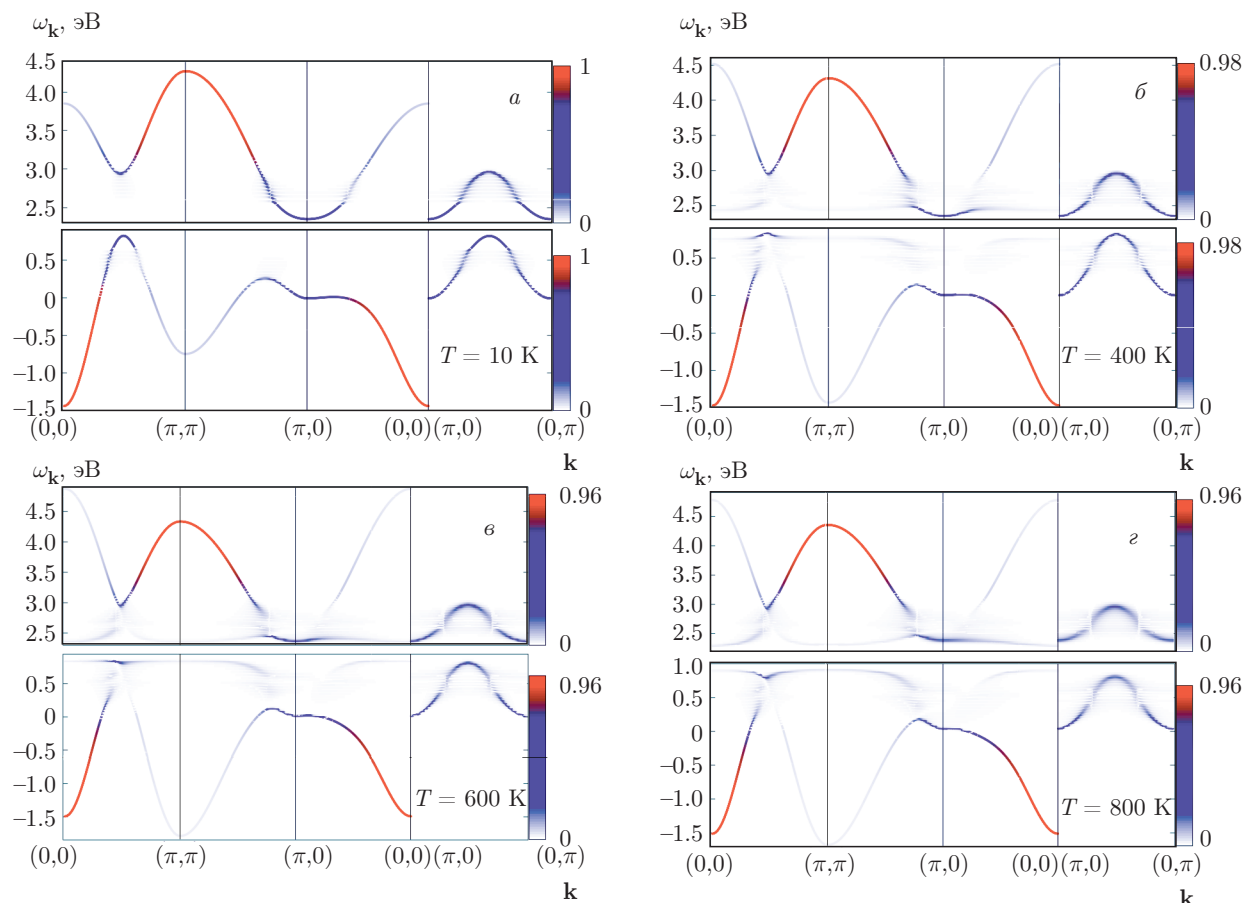


Рис. 4. (В цвете онлайн) Эволюция зонной структуры хаббардовских поляронов с ростом температуры от $T = 10$ К до $T = 800$ К в режиме слабого ЭФВ при $\lambda_d = \lambda_{pd} = 0.025$. При температурах $T = 400, 600, 800$ К явно видна плоская зона в окрестности точек $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$ и $(0, 0)$

спектральный вес. Можно разделить вклады в перестройку дисперсии при увеличении температуры от возбуждений $N-N$ без изменения номера локального состояния и возбуждений $N-N'$ с изменением номера поляронного состояния. $N-N$ -возбуждения участвуют в образовании отщепленной подзоны в верхней части валентной зоны и в нижней части зоны проводимости. Многофононные $N-N'$ -возбуждения формируют подзоны в результате расщеплений зоны хаббардовских фермионов, так же как многофононные $0-N'$ -возбуждения. Вклад $N-N$ -возбуждений в температурную зависимость электронной структуры сохраняется даже при нулевом ЭФВ. Без ЭФВ $N-N$ -возбуждения являются бесфононными, это переходы между локальными состояниями с одинаковым числом фононов. Многофононные $N-N'$ -возбуждения (переходы с изменением числа фононов) без ЭФВ имеют нулевую интенсивность из-за отсутствия перекрытия начального и конечного фононных состояний.

Возрастание температуры вызывает перестройку отщепившейся зоны и размытие валентной зоны и зоны проводимости в области существования многофононных возбуждений с ненулевым спектральным весом (рис. 4). Перестройка отщепившейся валентной зоны заключается преимущественно в росте энергии электронных возбуждений в точках $(0, 0)$ и (π, π) . Для слабоинтенсивных возбуждений в оставшейся нижней части валентной зоны в окрестности точки (π, π) энергия, наоборот, уменьшается. При температуре $T = 400$ К в точках $(0, 0)$ и (π, π) отщепленной зоны формируются плоские зоны — более интенсивная в точке (π, π) и менее интенсивная в точке $(0, 0)$ (рис. 4б). Благодаря наличию плоских зон плотность состояний при $T = 400$ К имеет пик на энергии $\omega \approx 0.763$ эВ (рис. 5, красная линия) в отличие от монотонной зависимости при $T = 10$ К (рис. 5, черная линия). При дальнейшем увеличении температуры локальный максимум в точке $(\pi/2, \pi/2)$ становится локальным минимумом, т. е.

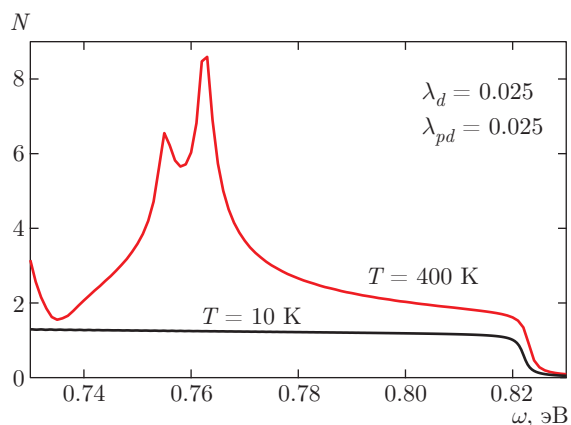


Рис. 5. (В цвете онлайн) Плотность состояний $N(\omega)$ хаббардовских поляронов на потолке валентной зоны при температурах $T = 10$ К (черная линия) и $T = 400$ К (красная линия) в режиме слабого ЭФВ. Наиболее высокий пик при $T = 400$ К обусловлен наличием плоской зоны вблизи точек $(0, 0)$ и (π, π)

отщепленная зона N - N -возбуждений «выворачивается» (см. рис. 4в, $T = 600$ К), приобретая вид, характерный для дисперсии в парамагнитной фазе со слабоинтенсивным максимумом в точке $(0, 0)$ и высокоинтенсивным максимумом в точке (π, π) (см. рис. 4г, $T = 800$ К). При этом плоская зона выходит на потолок валентной зоны. Для небольших констант ЭФВ потолок валентной зоны при всех температурах формируется когерентными возбуждениями, область некогерентных многофононных возбуждений с наибольшим спектральным весом лежит ниже по энергии. При $\lambda_d = \lambda_{pd} = 0.025$ граница области размытия почти совпадает с энергией плоской зоны когерентных возбуждений при температурах выше $T = 400$ К. В целом рост температуры приводит к увеличению ширины валентной зоны и зоны проводимости и их сдвигу, характеризующемуся уменьшением величины диэлектрической щели.

Размытие дисперсии на энергиях наиболее интенсивных многофононных возбуждений включает в себя рост величины расщеплений зон хаббардовских фермионов, уменьшение наклона дисперсионной кривой и перераспределение спектрального веса. Расщепление зоны хаббардовских фермионов на несколько подзон увеличивается в результате дополнительной гибридизации с многофононными N - N' -возбуждениями, имеющими близкие энергии с 0 - N'' -возбуждениями. При этом дисперсия каждой подзоны с ростом температуры становится слабее в окрестности точек расщепления, наклон дисперсионной кривой становится меньше, и отрезок

зоны хаббардовских фермионов постепенно превращается в плоскую зону (см. рис. 4б, в, г). Спектральный вес распределяется более равномерно по точкам в k -пространстве в каждой подзоне. Таким образом, в области энергий от 0.25 до 0.75 эВ валентной зоны (и от 2.5 до 3 эВ зоны проводимости) рост температуры превращает высокоинтенсивные когерентные возбуждения с волновыми векторами внутри определенного интервала в медленные и тяжелые поляронные квазичастицы со всеми возможными волновыми векторами. Область размытия растет с ростом температуры, при $T = 800$ К она имеет размер 0.8 эВ в валентной зоне (и 0.9 эВ в зоне проводимости).

Спектральная функция квазичастичных возбуждений

$$A(\mathbf{k}, \omega) = \left(-\frac{1}{\pi}\right) \sum_{\lambda, \sigma; m, n} \gamma_{\lambda, \sigma}^m (\gamma_{\lambda, \sigma}^n)^* \times \text{Im} \left\langle \left\langle X_{\mathbf{k}}^m \left| X_{\mathbf{k}}^{\dagger n} \right. \right\rangle \right\rangle_{\omega+i\delta} \quad (31)$$

и ее температурная зависимость существенно зависят от волнового вектора. Мы будем анализировать спектральную функцию в точке $(\pi/2, \pi/2)$ k -пространства, поскольку наиболее яркий температурный эффект — уширение пика нижней хаббардовской зоны — был получен в экспериментах по фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением именно в этой точке. При низкой температуре $T = 10$ К для $\lambda_d = \lambda_{pd} = 0.025$ спектральная функция в точке $(\pi/2, \pi/2)$ состоит из высокоинтенсивного пика 0 - 0 -возбуждения и слабоинтенсивных пиков многофононных возбуждений (рис. 6а). Рост температуры от $T = 10$ К до $T = 400$ К не приводит к существенному увеличению интенсивности многофононных возбуждений. Перераспределение спектрального веса при заполнении возбужденных локальных поляронных состояний становится заметнее с дальнейшим увеличением температуры ($T = 600$ К, рис. 6б), пик 0 - 0 теряет интенсивность, а многофононные пики, наоборот, становятся интенсивнее. Из-за перестройки отщепившейся подзоны пик 0 - 0 сближается с пиками многофононных процессов и при больших температурах попадает в область размытия валентной зоны N - N' -возбуждениями ($T = 800$ К, рис. 6в). Гибридизация 0 - 0 и N - N' -возбуждений сопровождается дополнительным перераспределением спектрального веса между ними. В результате каждому пику спектральной функции становится невозможным сопоставить конкретный франк-кондоновский процесс, квазича-

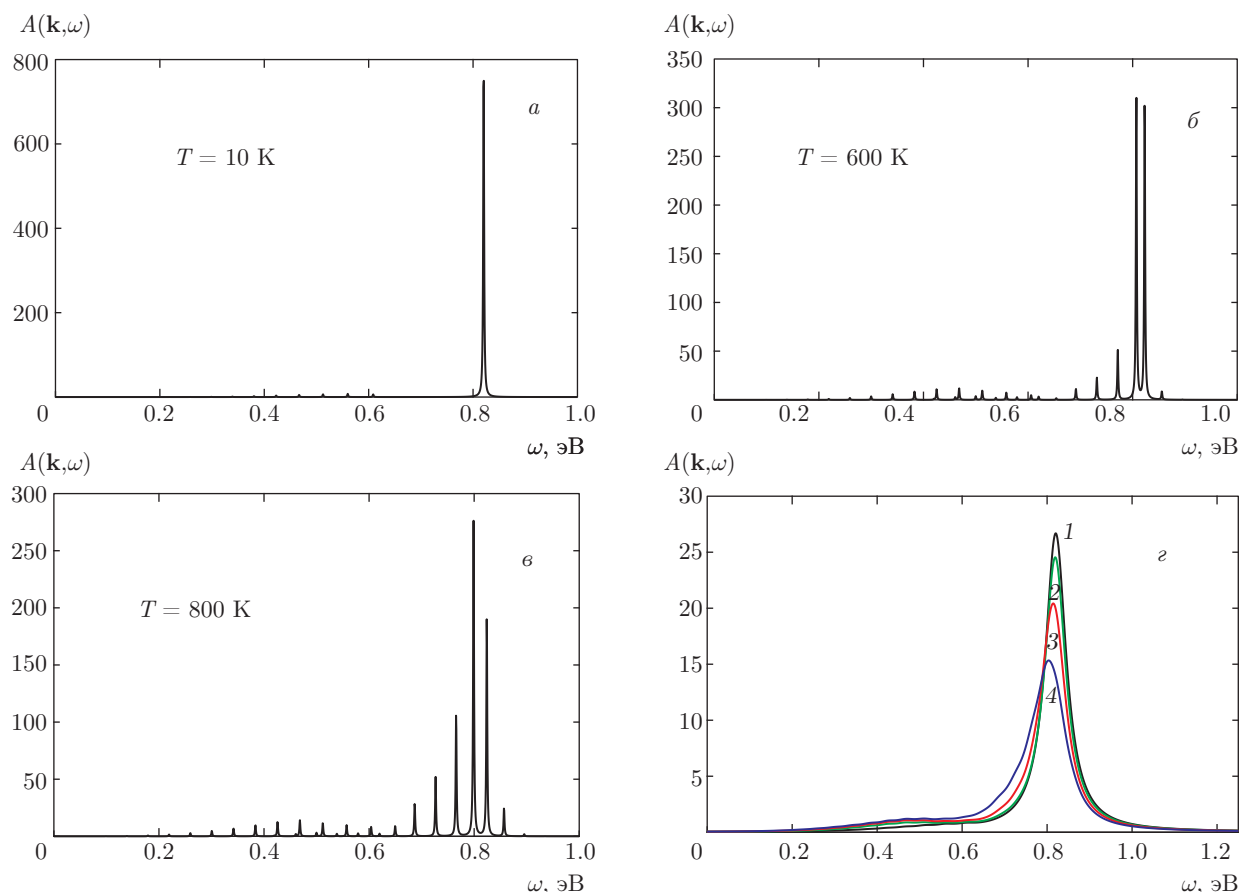


Рис. 6. (В цвете онлайн) *a–в*) Эволюция спектральной функции хаббардовских поляронов с ростом температуры от $T = 10$ К до $T = 800$ К в режиме слабого ЭФВ в точке $\mathbf{k} = (\pi/2, \pi/2)$; $\lambda_d = \lambda_{pd} = 0.025$. Расчеты проведены для ширины лоренциана $\delta = 0.001$ эВ. *з*) Уширение спектральной функции с ростом температуры при $\delta = 0.03$ эВ в этой же точке при тех же значениях λ_d и λ_{pd} : кривая 1 – $T = 10$ К, $\Gamma_{FWHM} = 0.06$ эВ; 2 – $T = 400$ К, $\Gamma_{FWHM} = 0.06$ эВ; 3 – $T = 600$ К, $\Gamma_{FWHM} = 0.07$ эВ; 4 – $T = 800$ К, $\Gamma_{FWHM} = 0.1$ эВ

стичные возбуждения являются суперпозицией различных многофоонных процессов с близкими весами. При этом спектральная функция представляет собой широкое распределение пиков. При учете конечного времени жизни квазичастичных возбуждений посредством увеличения ширины лоренциана $\delta = 0.03$ эВ распределение пиков сливается в один широкий пик. Рост температуры от $T = 10$ К до $T = 400$ К не приводит к увеличению ширины пика спектральной функции в точке $(\pi/2, \pi/2)$ (рис. 6*з*). При возрастании температуры от $T = 400$ К до $T = 800$ К полная ширина на половине высоты пика, Γ_{FWHM} , увеличивается более чем в полтора раза.

При больших значениях констант ЭФВ область расщепления широких зон хаббардовских фермионов на подзоны хаббардовских поляронов увеличивается. При $\lambda_d = \lambda_{pd} = 0.1$ зона проводимости и валентная зона расщеплены в интервале энергий

0.8 эВ (рис. 7*a*), этот интервал становится больше с ростом температуры. Спектральный вес распределен по всем слабодисперсным подзонам и по всем квазичастицам внутри каждой подзоны. Более интенсивными остаются квазичастицы в широких областях k -пространства, форма которых повторяет зоны хаббардовских фермионов при нулевых константах ЭФВ, т.е. дисперсия зоны хаббардовских фермионов сохраняется и при большом ЭФВ, если проследить ее по максимумам спектральной функции. Спектральная функция валентной зоны в точке $(\pi/2, \pi/2)$ уже при низких температурах характеризуется широким распределением слабоинтенсивных пиков квазичастиц, являющихся суперпозицией многофоонных франк-кондоновских $0-N$ -возбуждений (рис. 8*a*). Однако полная ширина на половине высоты пика спектральной функции при низкой температуре и $\lambda_d = \lambda_{pd} = 0.1$ (для шири-

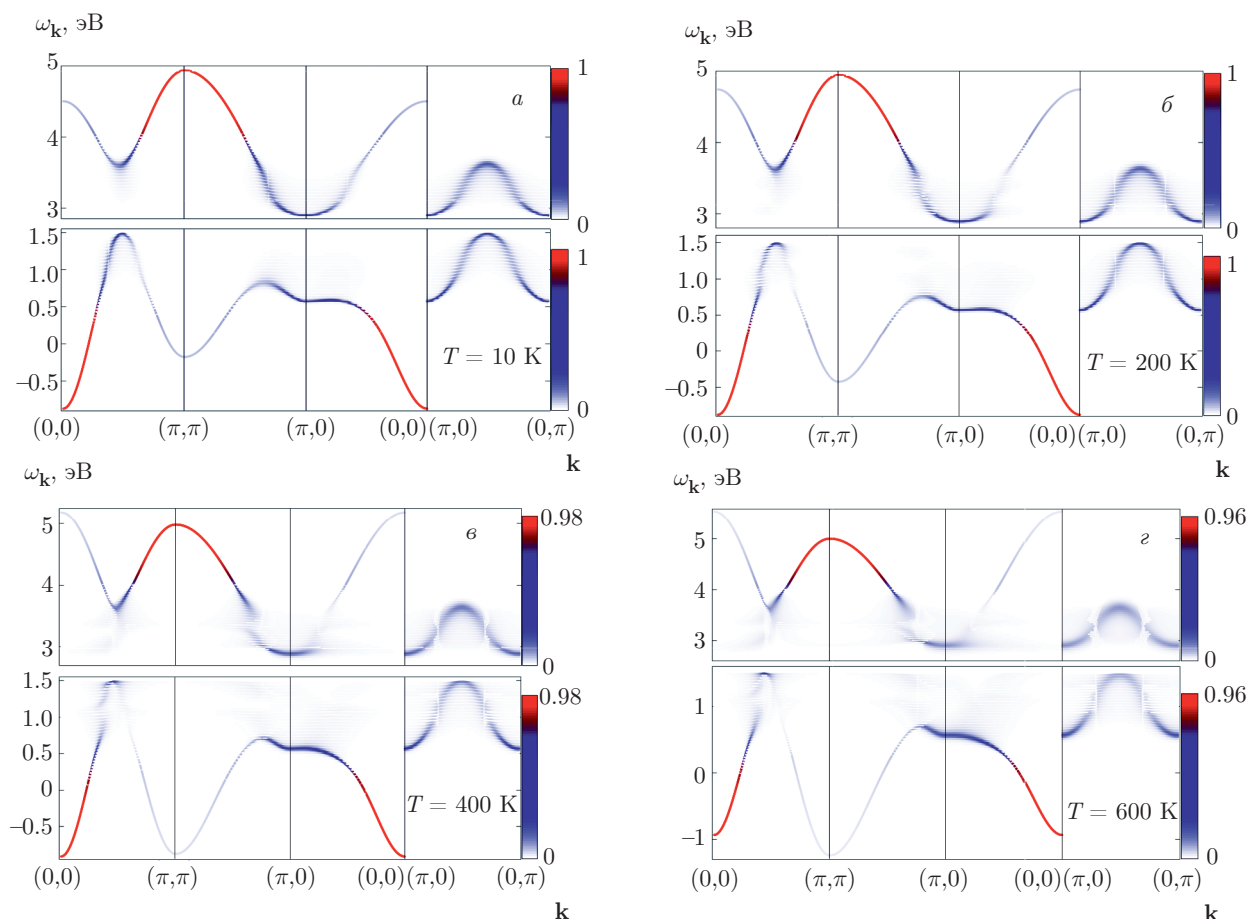


Рис. 7. (В цвете онлайн) Эволюция зонной структуры хаббардовских поляронов с ростом температуры от $T = 10$ К до $T = 600$ К в режиме сильного ЭФВ при $\lambda_d = \lambda_{pd} = 0.1$. При температурах $T = 400, 600$ К плоская зона в окрестности точек $\mathbf{k} = (0, 0)$ и $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$ распадается на множество менее интенсивных плоских подзон поляронных возбуждений

ны лоренциана $\delta = 0.03$ эВ) $\Gamma_{FWHM}^{0.1} = 0.07$ эВ слабо отличается от этой величины при константах ЭФВ $\lambda_d = \lambda_{pd} = 0.025$ ($\Gamma_{FWHM}^{0.025} = 0.06$ эВ).

С ростом температуры трансформация отщепленной зоны проявляется в виде перераспределения спектрального веса внутри хаббардовских подзон. Данная трансформация происходит на фоне перестройки хаббардовских подзон, перераспределения спектрального веса между различными подзонами и между квазичастицами внутри каждой подзоны (см. рис. 7), вызванного заполнением возбужденных локальных поляронных состояний с температурой. Для больших констант ЭФВ перераспределение спектрального веса с увеличением температуры происходит сильнее. Поэтому при высоких температурах наблюдается сильное размытие дисперсии хаббардовских зон, потолок валентной зоны (и дно зоны проводимости) состоит из слабодисперсных по-

ляронных подзон со спектральным весом, равномерно распределенным по всем точкам зоны Бриллюэна (см. рис. 7г).

Существенное перераспределение спектрального веса между хаббардовскими поляронами для больших констант ЭФВ проявляется в виде уширения распределения пиков спектральной функции и изменения формы их огибающей (рис. 8б, в). При росте температуры от 10 до 400 К происходит увеличение ширины пика, построенного для ширины лоренциана $\delta = 0.03$ эВ, почти в два раза и составляет $\Gamma_{FWHM} = 0.13$ эВ (рис. 8г). Рассчитанное значение уширения по порядку величины согласуется с уширением спектров, измеренных методом фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением: в эксперименте рост температуры от 200 до 400 К сопровождается увеличением ширины пика нижней хаббардовской зоны в два раза. В интервале темпера-

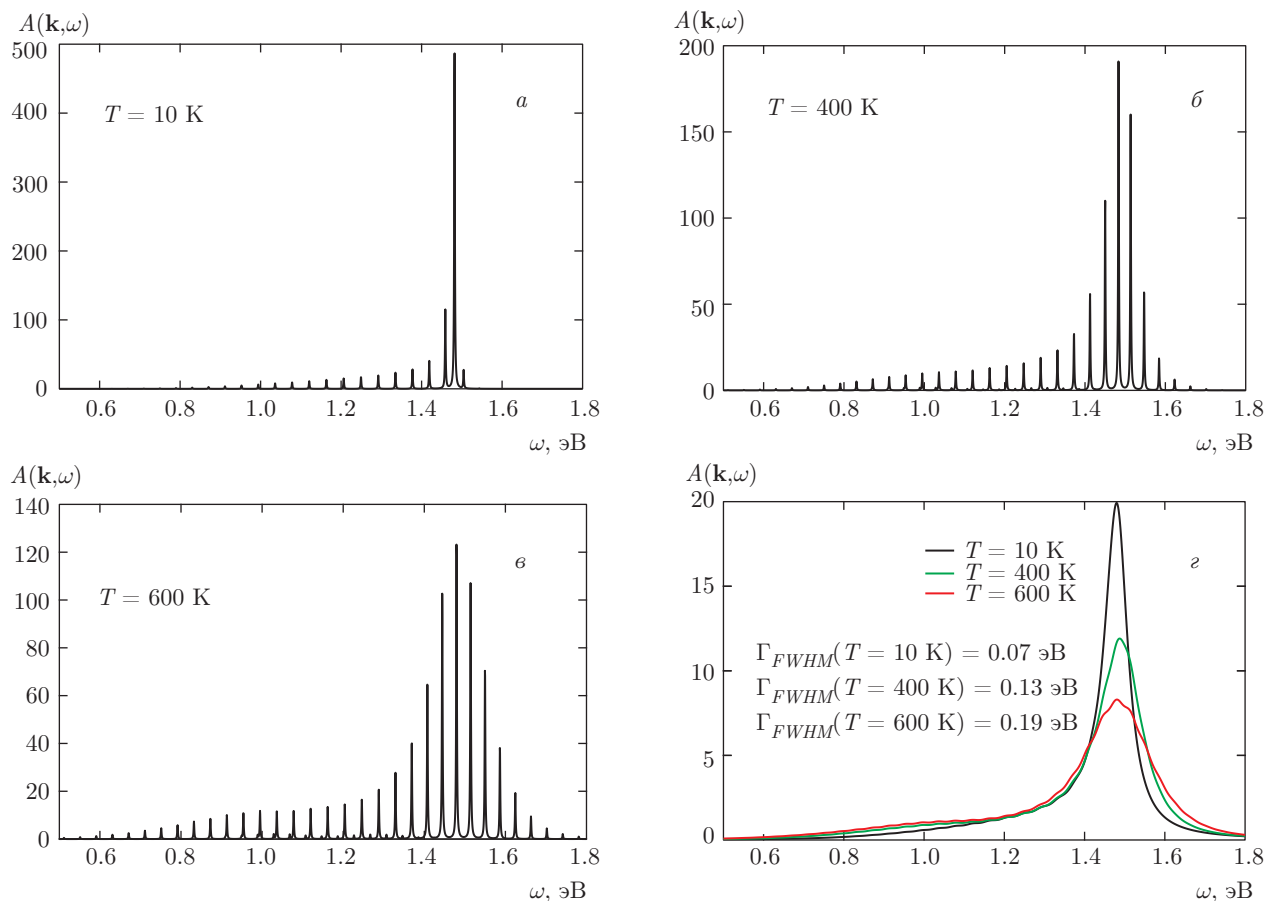


Рис. 8. (В цвете онлайн) *a–в*) Эволюция спектральной функции хаббардовских поляронов в точке $\mathbf{k} = (\pi/2, \pi/2)$ с ростом температуры от $T = 10$ K до $T = 600$ K в режиме сильного ЭФВ при $\lambda_d = \lambda_{pd} = 0.1$. Расчеты проведены для ширины лоренциана $\delta = 0.001$ эВ. *г*) Уширение спектральной функции в той же точке с ростом температуры при $\delta = 0.03$ эВ, $\lambda_d = \lambda_{pd} = 0.1$

тур от 10 до 600 K ширина пика возрастает более чем в 2.5 раза (рис. 8г). Таким образом, видно, что степень уширения и изменение формы пика с температурой в значительной степени управляются величиной ЭФВ.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе мы скорректировали формулировку поляронной версии обобщенного метода сильной связи. В рамках предложенного подхода было рассмотрено взаимное влияние электронных корреляций и электрон-фононного взаимодействия для дыхательной моды с учетом микроскопических особенностей строения вещества. В дальнейшем это позволит перейти к описанию поляронов, сформиро-

ванных в условиях одновременно сильных кулоновских и электрон-фононных взаимодействий, с помощью эффективных низкоэнергетических моделей. На основе поляронной версии обобщенного метода сильной связи рассмотрена конкуренция диагонального и недиагонального вкладов во взаимодействии коррелированных электронов CuO-плоскости с колебаниями дыхательной моды. Показано, что в процессе формирования локальных поляронных состояний 1) недиагональный вклад, обусловленный модуляцией интеграла перескока с кислорода на медь, имеет преимущественное значение; 2) кроме того, кулоновское взаимодействие подавляет эффекты ЭФВ, ослабляя в большей степени влияние диагонального вклада. Таким образом, недиагональное ЭФВ с дыхательной модой играет основную роль в формировании квазичастичных возбуждений хаббардовских поляронов.

Аналогичные выводы о роли и соотношении данных вкладов были получены также при исследовании особенностей электронной структуры рассматриваемых систем. Сильное ЭФВ приводит к потере когерентности квазичастичных возбуждений, при этом трансформация зонной структуры определяется преимущественно недиагональным вкладом.

Был продемонстрирован ряд важных эффектов. Во-первых, зонная структура хаббардовских поляронов имеет сильную температурную зависимость. Для обычных электронных зон температурные эффекты слабы, так как характерные энергии электронных возбуждений велики по сравнению с тепловой энергией. Для хаббардовских поляронов ситуация иная, так как энергия резонансов Франка – Кондона сопоставима с тепловой, что и приводит к описанной выше сильной перестройке дисперсии и спектральной функции хаббардовских поляронов.

Во-вторых, нами показано, что температурная зависимость зонной структуры сильнокоррелированных систем на основе оксидов меди характеризуется плавной эволюцией от антиферромагнитной дисперсии с потолком валентной зоны в точке $(\pi/2, \pi/2)$ при низких температурах до парамагнитной дисперсии с потолком валентной зоны в точке (π, π) при высоких температурах. При промежуточных температурах на потолке валентной зоны отщепляется узкая плоская зона, дающая острый пик в плотности состояний в окрестности комнатной температуры. Спектральные функции поляронов на потолке валентной зоны уширяются с уменьшением амплитуды при росте температуры в качественном согласии с фотоэлектронными спектрами.

Авторы признательны В. И. Зиненко и В. А. Гавричкову за полезные обсуждения. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 16-02-00098) и Программы фундаментальных исследований Президиума РАН № 12 «Фундаментальные проблемы высокотемпературной сверхпроводимости».

ЛИТЕРАТУРА

1. T. Holstein, *Ann. Phys.* **8**, 325 (1959).
2. T. Holstein, *Ann. Phys.* **8**, 343 (1959).
3. H. Frolich, *Adv. Phys.* **3**, 325 (1954).
4. A. L. Kuzemsky, A. Holas, and N. M. Plakida, *Physica B* **122**, 168 (1983).
5. T. P. Devereaux, A. Virosztek, and A. Zawadowski, *Phys. Rev. B* **51**, 505 (1995).
6. J. Song and J. F. Annett, *Phys. Rev. B* **51**, 3840 (1995).
7. N. Bulut and D. J. Scalapino, *Phys. Rev. B* **54**, 14971 (1996).
8. T. Sakai, D. Poilblanc, and D. J. Scalapino, *Phys. Rev. B* **55**, 8445 (1997).
9. A. S. Alexandrov and P. E. Kornilovitch, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 807 (1999).
10. Е. Г. Максимов, *УФН* **170**, 1033 (2000).
11. H. Fehske, J. Loos, and G. Wellein, *Phys. Rev. B* **61**, 8016 (2000).
12. J. Bonča and S. A. Trugman, *Phys. Rev. B* **64**, 094507 (2001).
13. S. Ishihara and N. Nagaosa, *Phys. Rev. B* **69**, 144520 (2004).
14. O. Rösch and O. Gunnarsson, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 146403 (2004).
15. A. S. Mishchenko and N. Nagaosa, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 036402 (2004).
16. G. Sangiovanni, O. Gunnarsson, E. Koch et al., *Phys. Rev. Lett.* **97**, 046404 (2006).
17. C. Slezak, A. Macridin, G. A. Sawatzky et al., *Phys. Rev. B* **73**, 205122 (2006).
18. N. M. Plakida and V. S. Oudovenko, *J. Supercond. Nov. Magn.* **29**, 1037 (2016).
19. С. Г. Овчинников, Е. И. Шнейдер, *ЖЭТФ* **128**, 974 (2005).
20. E. I. Shneyder, J. Spitaler, E. E. Kokorina et al., *J. Alloys Comp.* **648**, 258 (2015).
21. I. A. Makarov, E. I. Shneyder, P. A. Kozlov et al., *Phys. Rev. B* **92**, 155143 (2015).
22. P. Piekarczyk, J. Konior, and J. H. Jefferson, *Phys. Rev. B* **59**, 14697 (1999).
23. O. Gunnarsson and O. Rösch, *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 043201 (2008).
24. А. С. Мищенко, *УФН* **179**, 1259 (2009).
25. N. Gedik, D.-S. Yang, G. Logvenov et al., *Science* **316**, 425 (2007).
26. L. Pintschovius, *Phys. Stat. Sol. (b)* **242**, 30 (2005).
27. T. Cuk, D. H. Lu, X. J. Zhou et al., *Phys. Stat. Sol. (b)* **242**, 11 (2005).

28. D. Reznik, *Adv. Condens. Matter Phys.* **2010**, ID 523549 (2010).
29. C. L. Fu and A. J. Freeman, *Phys. Rev. B* **35**, 8861 (1987).
30. W. Weber and L. F. Mattheis, *Phys. Rev. B* **37**, 599(R) (1988).
31. F. Giustino, M. L. Cohen, and S. G. Louie, *Nature* **452**, 975 (2008).
32. R. E. Cohen, W. E. Pickett, and H. Krakauer, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 831 (1989).
33. Е. И. Шнейдер, С. Г. Овчинников, *Письма в ЖЭТФ* **83**, 462 (2006).
34. D. Zech, H. Keller, K. Conder et al., *Nature* **371**, 681 (1994).
35. П. И. Арсеев, Н. С. Маслова, *УФН* **180**, 1197 (2010).
36. В. А. Гавричков, С. Г. Овчинников, А. А. Борисов и др., *ЖЭТФ* **118**, 422 (2000).
37. S. G. Ovchinnikov, V. A. Gavrichkov, M. M. Korshunov et al., in *Strongly Correlated Systems (Theoretical Methods)*, ed. by A. Avella and F. Mancini, Springer-Verlag, Berlin–Heidelberg (2012), Vol. **171**, pp. 143–171.
38. B. S. Shastry, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 1288 (1989).
39. А. С. Давыдов, *Теория твердого тела*, под ред. Д. А. Миртовой, Наука, Москва (1976).
40. S. Barišić, *Phys. Rev. B* **5**, 932 (1972).
41. M. M. Korshunov, V. A. Gavrichkov, S. G. Ovchinnikov et al., *Phys. Rev. B* **72**, 165104 (2005).
42. V. I. Anisimov, D. E. Kondakov, I. A. Nekrasov et al., *Phys. Rev. B* **71**, 125119 (2005).
43. B. Wells, Z.-X. Shen, A. Matsuura et al., *Phys. Rev. Lett.* **74**, 964 (1995).
44. L. F. Feiner, J. H. Jefferson, and P. Raimondi, *Phys. Rev. B* **53**, 8751 (1993).
45. P. E. Kornilovitch, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 5382 (1998).
46. L.-C. Ku, S. A. Trugman, and J. Bonča, *Phys. Rev. B* **65**, 174306 (2002).
47. T. P. Devereaux, T. Cuk, Z.-X. Shen et al., *Phys. Rev. Lett.* **93**, 117004 (2004).
48. М. В. Еремин, М. А. Малахов, *Письма в ЖЭТФ* **100**, 362 (2014).
49. E. von Oelsen, A. Di Ciolo, J. Lorenzana et al., *Phys. Rev. B* **81**, 155116 (2010).
50. W. P. Su, J. R. Schrieffer, and A. J. Heeger, *Phys. Rev. B* **22**, 2099 (1980).
51. A. Di Ciolo, J. Lorenzana, M. Grilli et al., *Phys. Rev. B* **79**, 085101 (2009).
52. H. Mori, *Progr. Theor. Phys.* **34**, 399 (1965).
53. N. Plakida, in *Strongly Correlated Systems (Theoretical Methods)*, ed. by A. Avella and F. Mancini, Springer-Verlag, Berlin–Heidelberg (2012), Vol. **171**, pp. 173–202.
54. N. M. Plakida and V. S. Oudovenko, *ЖЭТФ* **131**, 259 (2007).
55. А. Ф. Барабанов, Р. Хайн, А. А. Ковалев и др., *ЖЭТФ* **119**, 777 (2001).
56. В. В. Вальков, Д. М. Дзедзисашвили, *ЖЭТФ* **127**, 686 (2005).
57. С. Г. Овчинников, М. М. Коршунов, Е. И. Шнейдер, *ЖЭТФ* **136**, 898 (2009).
58. С. Г. Овчинников, Ю. С. Орлов, И. А. Некрасов и др., *ЖЭТФ* **139**, 162 (2011).