

Спин-поляронная концепция в теории нормального и сверхпроводящего состояний купратов

В.В. Вальков, Д.М. Дзедзисашвили, М.М. Коровушкин, А.Ф. Барабанов

Отражено становление спин-фермионной модели купратов и формирование на её основе спин-поляронной концепции электронного строения дырочно-допированных высокотемпературных сверхпроводников медной группы. Данная концепция позволяет в едином подходе описать свойства нормальной и сверхпроводящей фаз в указанных материалах. Изложен вывод спин-фермионной модели из модели Эмери в режиме сильных электронных корреляций, демонстрирующий возникновение сильной связи между спинами ионов меди и дырками на ионах кислорода. Эта связь приводит к формированию на фоне синглетного состояния спиновой подсистемы ионов меди (квантовой спиновой жидкости) особых фермиевских квазичастиц — нелокальных спиновых поляронов. При допировании ансамбль спиновых поляронов проявляет неустойчивость по отношению к куперовскому спариванию с d-типом симметрии параметра порядка, тогда как сверхпроводящее s-спаривание не реализуется. В области оптимального допирования переход в сверхпроводящую фазу реализуется при температурах, соответствующих экспериментальным данным. Продemonстрировано, что сверхпроводящая d-фаза ансамбля спиновых поляронов не подавляется кулоновским взаимодействием дырок, находящихся на соседних ионах кислорода. Показано, что при учёте особенностей спектральных характеристик спин-поляронных квазичастиц вычисленная зависимость лондоновской глубины проникновения магнитного поля от температуры и концентрации дырок хорошо коррелирует с экспериментальными данными.

Ключевые слова: сильно коррелированные электронные системы, высокотемпературная сверхпроводимость, спиновые поляроны, межузельное кулоновское взаимодействие, лондоновская глубина проникновения

PACS numbers: 71.10. -w, 71.10.Fd, 71.27. +a, 74.20. -z, 74.20.Mn, 74.25.N-, 74.72. -h

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.2020.08.038829>

Содержание

1. Введение (673).
2. Основные многоэлектронные модели купратных сверхпроводников (675).
 - 2.1. Поиск теоретической модели.
 - 2.2. Модель Хаббарда.
 - 2.3. Многозонные p-d-модели.
 - 2.4. t-J-модель.
 - 2.5. Модель решётки Кондо.
3. Спин-фермионная модель купратов (680).

В.В. Вальков^(1,a), Д.М. Дзедзисашвили^(1,2,b),
М.М. Коровушкин^(1,c), А.Ф. Барабанов^(3,d)

⁽¹⁾ Институт физики им. Л.В. Киренского, Федеральное исследовательское учреждение "Красноярский научный центр" СО РАН, Академгородок 50/38, 660036 Красноярск, Российская Федерация

⁽²⁾ Сибирский государственный университет науки и технологий им. М.Ф. Решетнёва, просп. им. газеты "Красноярский рабочий" 31, 660037 Красноярск, Российская Федерация

⁽³⁾ Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, Калужское шоссе 14, 108840 Троицк, Москва, Российская Федерация

E-mail: ^(a) vvv@iph.krasn.ru, ^(b) ddm@iph.krasn.ru,
^(c) kmax@iph.krasn.ru, ^(d) abarab@bk.ru

Статья поступила 22 апреля 2020 г., после доработки 4 июля 2020 г.

- 3.1. Недостатки однозонных моделей.
 - 3.2. Эффективный гамильтониан модели Эмери в режиме сильных корреляций.
 - 3.3. Общие свойства и принципиальные отличия спин-фермионной модели купратов и других эффективных моделей.
 - 3.4. Усечённые формы спин-фермионной модели купратов.
 4. Концепция спинового полярона (686).
 - 4.1. Спин-поляронная природа фермиевских квазичастиц в купратах.
 - 4.2. Спиновый полярон в режиме слабой связи.
 - 4.3. Спиновый полярон в режиме сильной связи.
 5. Спин-поляронные квазичастицы в нормальной фазе купратных высокотемпературных сверхпроводников (688).
 - 5.1. Фермионные состояния в режиме сильной связи.
 - 5.2. Модификация поверхности Ферми в LSCO при дырочном допировании.
 6. Сверхпроводящая фаза спин-поляронных квазичастиц (693).
 - 6.1. Куперовская неустойчивость спиновых поляронов.
 - 6.2. Проблема межузельного кулоновского взаимодействия.
 - 6.3. Лондоновская глубина проникновения.
 7. Заключение (699).
- Список литературы (701).

1. Введение

Экспериментальные и теоретические исследования купратных сверхпроводников, проводившиеся в послед-

нее время, были направлены на выяснение особенностей их электронной структуры и на тестирование предложенных ранее механизмов сверхпроводящего спаривания. Для получения сведений по электронным свойствам этих материалов активно изучались спектральные характеристики фермиевских возбуждений в нормальной фазе дырочно-допированных купратов [1–3] и анализировался характер поведения квазичастиц в псевдощелевом состоянии [4–8]. Кроме того, обсуждались термодинамические особенности физических величин при оптимальном допировании [9], рассматривались свойства купратных сверхпроводников в промежуточном состоянии, индуцированном внешним магнитным полем [10], а также проводились исследования, связанные с проявлением зарядовых флуктуаций [11], со структурным разупорядочением [12, 13] и волной зарядовой плотности [14, 15].

Накопившиеся результаты сделали возможным теоретическое описание купратных высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) в нормальной и сверхпроводящей фазах в рамках единой концепции. В её основе лежит принятие во внимание основополагающих и хорошо установленных принципов химического и кристаллографического строения материалов. К таковым, в частности, относятся сведения об эффектах ковалентности между состояниями ионов меди и кислорода, а также о соотношениях между энергетическими параметрами, определяющими режим сильных электронных корреляций (СЭК) в купратных сверхпроводниках.

Важнейший фактор, играющий первостепенную роль в формировании всех физических свойств отмеченных материалов, связан с возникновением в результате процессов ковалентного смешивания сильной спин-фермионной связи между локализованной подсистемой спиновых моментов ионов меди и дырками, движущимися по ионам кислорода [16–19]. Такая связь формируется при учёте СЭК и является характерной для многих сверхпроводников с высокими критическими температурами. Наличие в купратных сверхпроводниках ярко выраженной квазидвумерности увеличивает роль флуктуаций, вызванных спин-фермионной связью. Отмеченные обстоятельства определяют особенности низкотемпературных свойств купратных ВТСП как в нормальной, так и сверхпроводящей фазах [20].

В работе [21] в рамках модели Эмери [22], отражающей реальную структуру CuO_2 -плоскости ВТСП, показано, что дополнительная дырка, появляющаяся в плоскости при допировании, образует сильно связанное состояние с локализованным спиновым моментом на ионе меди. Это обстоятельство дало основание полагать, что свойства купратных ВТСП могут быть описаны в рамках более простых эффективных низкоэнергетических моделей, типа t - J -модели [23]. Однако следствием относительной простоты таких моделей являлось пренебрежение рядом важных особенностей электронного строения купратов. В частности, игнорировалась реальная структура CuO_2 -плоскости, элементарная ячейка которой включает в себя два иона кислорода и один ион меди, а также не учитывалась пространственная разнесённость спиновых моментов ионов меди и кислорода.

Отмеченных недостатков лишена полученная в работах [24–30] модель, впоследствии названная спин-фермионной [31]. Однако в данном обзоре мы будем называть эту модель спин-фермионной моделью купратов

(СФМК) (см. обсуждение в разделе 3.3). СФМК следует непосредственно из модели Эмери, если, приняв во внимание реальные соотношения между параметрами исходного гамильтониана, учесть по теории возмущений эффекты ковалентного смешивания орбиталей меди и кислорода. Главным преимуществом СФМК является возможность корректного описания сильной спин-зарядовой связи, обусловленной большой величиной обменного взаимодействия между спиновыми моментами ионов меди и спинами дырок на ионах кислорода. Эта связь приводит, в частности, к спин-коррелированным перескокам, сопровождающимся процессами переворота спина. Именно в рамках СФМК была развита спин-поляронная концепция [32–36] для описания спектральных свойств купратных ВТСП в нормальной фазе.

С точки зрения концепции спинового полярона в рамках СФМК было исследовано расщепление нижней зоны локального полярона [37], что позволило, например, описать резкое падение интенсивности пиков спектра в экспериментах по фотоэмиссии с угловым разрешением (Angle Resolved Photoemission Spectroscopy — ARPES) при изменении квазиимпульса от $(\pi/2, \pi/2)$ к (π, π) или $(0, 0)$, а также возможность существования "теневого зоны" [38]. В работах [39, 40] показано, что в случае СФМК, рассматриваемой в рамках концепции спинового полярона, для описания модификации энергетического спектра и поверхности Ферми купратного сверхпроводника достаточно использовать всего один подгоночный параметр — интеграл перескока дырок, тогда как модели сильной связи включают в себя большее число зависящих от допирования подгоночных параметров.

До недавнего времени успехи спин-поляронной концепции ограничивались описанием свойств нормального состояния купратов. Положение заметно изменилось, когда было показано, что куперовская неустойчивость в ВТСП развивается не для затравочных фермионов, а в подсистеме спин-поляронных квазичастиц [41, 42].

Эффективность спин-поляронного подхода к проблеме ВТСП стала наиболее явной после того, как был решён [43] давний вопрос, известный ещё с момента появления первых теоретических работ по высокотемпературной сверхпроводимости в купратах, о нейтрализации негативного влияния кулоновского отталкивания фермионов, находящихся на ближайших узлах решётки, на реализацию сверхпроводящей фазы. Дело заключалось в том, что на расстояниях, равных параметру решётки, экранирование потенциала не работало, а реальные значения параметров кулоновского взаимодействия таковы, что, например, в наиболее популярной t - J -модели сверхпроводимость полностью подавлялась. При учёте же реальной структуры CuO_2 -плоскости в ансамбле спин-поляронных квазичастиц оказалось, что фурье-образ межзельного кулоновского взаимодействия дырок, находящихся на ближайших ионах кислорода, из-за симметричных свойств выпадает из уравнения для куперовского спаривания спиновых поляронов в d -канале и, таким образом, не влияет на сверхпроводящее d -спаривание [43]. При этом существенную роль играл учёт сильной спин-фермионной связи, приводящей к трансформации затравочного взаимодействия между кислородными дырками к взаимодействию между спин-поляронными квазичастицами.

Дальнейшее развитие этого направления показало, что сверхпроводящая фаза с *s*-типом симметрии параметра порядка не реализуется ни при каких реальных значениях параметров системы [44].

Следует отметить, что формирование сложной фермиевской квазичастицы может происходить не только посредством связывания электрона с локализованными спинами, но и в результате коррелированного движения электронов с фононной подсистемой. Для ВТСП это может иметь важное значение, поскольку в окрестности критической температуры колебания решётки значительны и число фононов велико.

Работы, связанные с теоретическим исследованием влияния электрон-фононного взаимодействия на критическую температуру, спектральные свойства фермиевских квазичастиц и кинетические характеристики купратных сверхпроводников, проводились в нескольких направлениях. В одном из них считалось, что в рассматриваемых сильно коррелированных системах электрон-фононное взаимодействие также является сильным. Исходя из этого предположения в работах [45–47] были предложены варианты решения задачи одновременного учёта отмеченных сильных взаимодействий.

Другое направление работ основывалось не только на предположении о сильной электрон-фононной связи, но и на предположении о высокой плотности коррелированных фермионов. При этом оказывалось, что в системе формируются большие биполярны и делокализованные носители. В таком подходе удалось объяснить высокоэнергетические аномалии в спектрах ARPES [48], а также зарядовое упорядочение [49].

В системах с сильной электрон-фононной связью актуальным представляется развитие теории Элиашберга [50] в направлении выхода за рамки адиабатического приближения [51].

В данном обзоре при обсуждении спин-поляронной концепции электронного строения дырочно-допированных купратов эффекты электрон-фононного взаимодействия учитываться не будут. Решение задачи о фермиевской квазичастице, сформированной при учёте как электрон-фононного, так и спин-фермионного взаимодействий, является делом ближайшего будущего. К настоящему времени расширение области приложения спин-поляронного подхода проведено в направлении развития теории электромагнитных явлений, происходящих в купратах [52].

Целью настоящего обзора являются изложение концепции спинового полярона и представление совокупности результатов исследования свойств купратных сверхпроводников в рамках этой концепции. В разделе 2 рассматриваются основные модели для описания физических свойств купратов (модель Хаббарда, многозонные *p*–*d*-модели, *t*–*J*-модель, модель решётки Кондо) и по мере рассмотрения выявляются предпосылки возникновения СФМК. В разделе 3 подробно излагается вывод СФМК из *p*–*d*-модели Эмери в режиме СЭК, а также обсуждаются общие свойства и принципиальные отличия СФМК от других вариантов эффективных моделей, учитывающих сильную спин-фермионную связь в купратах. Раздел 4 посвящён изложению концепции спин-поляронной природы фермиевских квазичастиц в купратных сверхпроводниках. В разделе 5 рассматриваются свойства нормальной фазы спин-поляронных квазичастиц: энергетическая структура, спектральные характе-

ристики, модификация поверхности Ферми при допировании. В разделе 6 описывается совокупность результатов по сверхпроводящей фазе спиновых поляронов. В частности, анализируется устойчивость сверхпроводящего *d*-спаривания относительно учёта кулоновского отталкивания дырок, находящихся на соседних ионах кислорода, а также рассматривается задача о вычислении лондоновской глубины проникновения магнитного поля в купратный сверхпроводник, в котором в качестве носителей заряда выступают спин-поляронные квазичастицы. В заключении (раздел 7) обсуждаются полученные результаты.

2. Основные многоэлектронные модели купратных сверхпроводников

2.1. Поиск теоретической модели

Хорошо известно, что в основе микроскопической теории сверхпроводимости, созданной в 1957 г. Бардином, Купером и Шриффером (БКШ) [53], лежит гипотеза Купера о неустойчивости основного состояния электронного газа со сколь угодно слабым притяжением между частицами по отношению к образованию связанных состояний (модель БКШ). Межэлектронное притяжение, превосходящее кулоновское отталкивание, в большинстве сверхпроводников своим происхождением обязано взаимодействию электронов с колебаниями кристаллической решётки, приводящему к формированию области избыточного положительного заряда, окружающего данный электрон.

Ещё в 1964 г. в работах Литтла [54] и Гинзбурга [55] высказывалось предположение о возможном существовании ВТСП. Литтл впервые задался вопросом о том, почему критическая температура известных тогда сверхпроводников невысока. Литтл указал возможный путь увеличения критической температуры сверхпроводящего перехода T_c до более высоких значений, предложив заменить электрон-фононное взаимодействие, приводящее к сверхпроводимости в модели БКШ, взаимодействием электронов проводимости со связанными электронами (экситонами), энергия которых гораздо больше энергии фононов. В 1986 г. Беднорц и Мюллер [56] обнаружили сверхпроводимость в оксиде лантана-бария-меди ($\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$) с рекордно высокой для того времени критической температурой перехода $T_c \approx 30$ К.

Это открытие привлекло значительное внимание к ВТСП — интенсивность исследований и количество публикаций по этой теме достигли небывалого масштаба. Число публикаций по проблеме ВТСП, появившихся после 1986 г., существенно превышает полное число всех предшествующих публикаций по сверхпроводимости начиная с её открытия Камерлингом-Оннесом в 1911 г. Более того, после обнаружения сверхпроводимости в иттриевых медно-оксидных соединениях $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ группой Ву [57] с $T_c \approx 90$ К и ртутных соединениях [58, 59] с $T_c \approx 135$ – 160 К проблема ВТСП из чисто научной превратилась в практически значимую ввиду возможности применения явления ВТСП в технических устройствах.

С теоретической точки зрения сравнительно нетрудно на основе обычного фононного механизма объяснить сверхпроводимость в допированном La_2CuO_4 (LSCO) с

температурой перехода $T_c \approx 30$ К. В то же время фоновый механизм вряд ли может быть применён для описания сверхпроводящей фазы в ртутных и висмутовых ВТСП, где критическая температура превышает 90 К. Этот факт побудил многих исследователей приступить к поиску альтернативного механизма спаривания и вызвал среди них интенсивную дискуссию о выборе эффективной теоретической модели, призванной описать физические свойства ВТСП.

2.2. Модель Хаббарда

Первой моделью, привлечённой для описания свойств купратных сверхпроводников, стала предложенная в 1963 г. модель Хаббарда [60], которая является одной из фундаментальных моделей физики конденсированного состояния. Модель Хаббарда представляет собой частный случай общей модели взаимодействующих электронов, зонная структура которых описывается в методе сильной связи [61, 62]. В модели Хаббарда предполагается, что на каждом ионе актуальным для исследуемой физической проблемы является только один орбитально-невырожденный уровень, который и принимается во внимание. Существование других квантовых состояний игнорируется на основе предположения об их большой энергетической удалённости. Учёт квантовых переходов между ионами приводит к формированию зоны сильной связи.

Гамильтониан модели Хаббарда содержит два главных параметра: t — матричный элемент перескока между ближайшими узлами, U — параметр кулоновского отталкивания электронов с противоположными спинами на одном узле. В представлении вторичного квантования гамильтониан выражается в виде

$$\hat{H} = \sum_{f\sigma} (\varepsilon - \mu) \hat{n}_{f\sigma} + \sum_{f,m\sigma} t_{fm} a_{f\sigma}^\dagger a_{m\sigma} + U \sum_f \hat{n}_{f\uparrow} \hat{n}_{f\downarrow}, \quad (1)$$

где $a_{f\sigma}^\dagger$ ($a_{f\sigma}$) — оператор рождения (уничтожения) электрона с проекцией спина $\sigma = \pm 1/2$ на узле f , ε — одноузельная энергия электрона, μ — химический потенциал системы, $\hat{n}_{f\sigma} = a_{f\sigma}^\dagger a_{f\sigma}$ — оператор числа частиц на узле f .

Данная модель характеризуется ещё одним важным параметром — электронной концентрацией n (число электронов на узле решётки), которая изменяется от 0 до 2. Случай половинного заполнения ($n = 1$) является выделенным, поскольку при определённых соотношениях между параметрами t и U может возникнуть диэлектрическое состояние с дальним магнитным порядком. При больших значениях U появление двух электронов на одном узле становится энергетически невыгодным и исходная зона расщепляется на две хаббардовские подзоны с щелью в центре полосы. Таким образом, при половинном заполнении уровень Ферми попадает в энергетическую щель и основное состояние становится диэлектрическим. Электроны локализируются в узлах решётки и ведут себя как магнитные моменты со спином $S = 1/2$, поэтому система становится антиферромагнитным (АФМ) диэлектриком [63].

Модель Хаббарда способна описывать как локализованные ($U \gg t$), так и коллективизированные ($U \ll t$) электронные состояния. В промежуточном случае $U \approx t$ система сочетает в себе две противоположные тенденции: локализацию и делокализацию состояний. Электрические и магнитные свойства систем, описываемых мо-

делью Хаббарда, зависят от тонкого баланса этих конкурирующих тенденций [64]. Преобладание одной из них над другой, согласно Мотту [65], и определяет конечный результат: превосходство параметра перескока t делает систему металлом, тогда как превосходство параметра кулоновского отталкивания U — наоборот, диэлектриком. Поэтому переход металл–диэлектрик по отношению t/U называют мотт-хаббардовским.

Хорошо известно, что модель Хаббарда помимо фазового перехода металл–диэлектрик содержит переходы парамагнетик–ферромагнетик и парамагнетик–антиферромагнетик [66, 67]. В случае больших величин U модель адекватно учитывает СЭК, которые могут приводить не только к магнитному, но и к сверхпроводящему порядку. В 1987 г. Андерсон [23] высказал предположение о том, что модель Хаббарда может оказаться ключом к пониманию необычного поведения ВТСП-материалов. В его работе подсистема спиновых моментов ионов меди рассматривалась по сценарию "резонирующих валентных связей", а ансамбль зарядовых возбуждений, появляющийся при допировании, интерпретировался как фермиевская подсистема, проявляющая куперовскую неустойчивость. Возникающий при таком подходе механизм формирования сверхпроводящей фазы имел электронную природу и приводил к высоким значениям T_c .

При анализе нефоновых механизмов сверхпроводимости в рамках модели Хаббарда исследователи использовали возможность построения теории возмущений в двух предельных случаях: 1) борновского приближения слабой связи, $U \ll W$ ($W = 2zt$, где z — число ближайших соседей) и произвольной плотности носителей заряда; 2) приближения сильной связи, $U \gg W$, и малой плотности носителей. В одной из первых работ [68] были исследованы условия реализации механизма сверхпроводимости Кона–Латтинжера [69], предполагающего возникновение куперовской неустойчивости в системах с чисто отталкивательным взаимодействием [69–76], в двумерной модели Хаббарда в пределе слабой связи при малых электронных плотностях. Предел слабой связи $U \ll W$ в двумерной (2D) и трёхмерной (3D) моделях Хаббарда вблизи половинного заполнения проанализирован в работах [77–82]. Результатом отмеченных работ являлось построение фазовой диаграммы 2D-модели Хаббарда при малых и промежуточных числах заполнения, отражающей результат конкуренции различных типов симметрии параметра порядка. Фазовая диаграмма, полученная в первых двух порядках теории возмущений, показала, что в области малых концентраций носителей, $0 < n < 0,52$, реализуется сверхпроводящее d_{xy} -спаривание. При промежуточных плотностях, $0,52 < n < 0,58$, основному состоянию соответствует сверхпроводящая фаза с r -типом симметрии параметра порядка, а при $n > 0,58$ возникает $d_{x^2-y^2}$ -тип сверхпроводимости. Фазовая диаграмма 2D-модели Хаббарда в противоположном пределе сильной связи $U \gg W$ и малой плотности носителей построена в работах [83, 84].

Другое решение проблемы сверхпроводящего спаривания с высокими T_c предложено в работе [85], где показано, что ансамбль фермионов, описываемых моделью Хаббарда в предельном режиме СЭК ($U \rightarrow \infty$), в области низкой концентрации дырок проявляет куперовскую неустойчивость в s -канале. Новый сценарий сверх-

проводящего спаривания основывался на кинематическом взаимодействии, которое инициируется в ансамбле фермионов Хаббарда из-за квазифермиевских антикоммутационных соотношений между хаббардовскими операторами [86]. Кинематический механизм куперовской неустойчивости также имел электронную природу и обеспечивал высокие критические температуры. Учёт межузельного кулоновского взаимодействия между фермионами в рамках модели Шубина–Вонсовского [87–89] понижал температуру сверхпроводящего перехода [90–92] (см. раздел 6.2 и штриховые кривые на рис. 13) и приводил к температурам, соответствующим экспериментальным данным.

Наиболее полно состояние теоретических исследований в модели Хаббарда отражено в книгах Изюмова [93–95], а также в обзорах [96–99].

При попытке описания физических свойств ВТСП исследователи столкнулись со сложностью, связанной с необходимостью учёта ионов двух сортов: Cu^{2+} (конфигурация $3d^9$) и O^{2-} (конфигурация $2p^6$). Таким образом, модель, которая адекватно описывала бы электронную структуру купратов, должна включать в себя параметры, учитывающие энергии d-электронов меди и p-электронов кислорода, перекрытие d- и p-волновых функций электронов на соседних узлах решётки, энергии одноузельного отталкивания электронов меди и кислорода, а также энергию их межузельного кулоновского отталкивания. В результате возникла необходимость формулировки более реалистичной, по сравнению с моделью Хаббарда, теоретической модели для описания физики медь-кислородных плоскостей.

2.3. Многозонные p–d-модели

После анализа кристаллической структуры и фазовой диаграммы купратов центр тяжести исследований сместился в сторону изучения модельных гамильтонианов, описывающих движение электронов в CuO_2 -плоскостях [22]. Такое упрощение подкреплялось наличием сильных медь-кислородных связей [100–103]. Было ясно, что некоторые особенности фазовой диаграммы (например, существование конечной неелевской температуры) могут быть объяснены только при учёте связи между плоскостями. Однако ожидалось, что подобные детали можно изучить уже после того, как станут понятны особенности электронных свойств, связанных с 2D-характером движения фермионов.

Выяснилось, что даже при таком упрощении исследование фермионных ансамблей для отдельных CuO_2 -плоскостей остаётся сложной проблемой, поскольку ионы меди Cu^{2+} имеют девять электронов на пяти d-орбиталях, а ионы кислорода O^{2-} обладают тремя заполненными p-орбиталями. Во всех структурах ВТСП вырождение d-орбиталей, обусловленное симметрией изолированных атомов относительно вращений в трёхмерном пространстве, снимается из-за нарушения этой симметрии в решётке. Вычисления [100, 102] показали, что орбитали меди и кислорода разнесены по энергии (рис. 1). При этом наибольшей энергией обладает $d_{x^2-y^2}$ -орбиталь, и в отсутствие допирования на ней находится одна дырка. Другие орбитали с более низкими энергиями целиком заполнены, и в первом приближении при построении гамильтониана ими можно пренебречь.

Используя эти аргументы, Эмери в 1987 г. предложил трёхзонную модель, описывающую систему дырок в

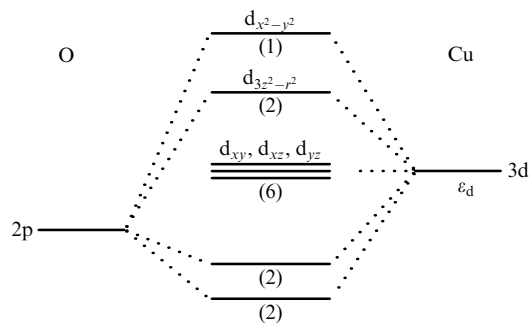


Рис. 1. Связь между ионом Cu^{2+} и двумя ионами O^{2-} . Рассматриваются только d-электроны меди и p_x- и p_y-орбитали кислорода. Числа в скобках определяют заселённость различных уровней в недопированной структуре [104].

медь-кислородных плоскостях. В настоящее время она известна как p–d-модель Эмери [22]. Исходя из важности учёта процессов с переносом заряда Варма с соавторами [105] сформулировали аналогичный подход. В представлении операторов вторичного квантования гамильтониан модели Эмери можно записать следующим образом:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{int}}, \quad (2)$$

$$\hat{H}_0 = \sum_f (\varepsilon_d \hat{n}_f^d + U_d \hat{n}_f^d \hat{n}_f^d) + \sum_l \varepsilon_p \hat{n}_l^p + \sum_{f\delta} V_{pd} \hat{n}_f^d \hat{n}_{f+\delta}^p, \quad (3)$$

$$\hat{H}_{\text{int}} = \hat{U}_p + \hat{T}_{pp} + \hat{V}_{pp} + \hat{T}_{pd}, \quad (4)$$

$$\hat{T}_{pd} = t_{pd} \sum_{f\delta\sigma} \vartheta(\delta) (d_{f\sigma}^\dagger p_{f+\delta,\sigma} + \text{h.c.}),$$

$$\hat{T}_{pp} = \sum_{l\Delta\sigma} t_{pp}(\Delta) p_{l\sigma}^\dagger p_{l+\Delta,\sigma},$$

$$\hat{U}_p = U_p \sum_l \hat{n}_l^p \hat{n}_l^p,$$

$$\hat{V}_{pp} = \sum_{l'(l \neq l')} V_{pp}(l-l') \hat{n}_l^p \hat{n}_{l'}^p.$$

Здесь оператор \hat{H}_0 описывает систему дырок, находящихся на ионах меди и кислорода. В \hat{H}_0 включены слагаемые, соответствующие учёту кулоновского взаимодействия двух дырок, которые находятся на одном ионе меди. Энергия этого взаимодействия обозначена через U_d . Последнее слагаемое в \hat{H}_0 соответствует учёту кулоновского взаимодействия между дырками, находящимися на ближайших ионах меди и кислорода. Параметр V_{pd} определяет интенсивность такого взаимодействия.

Оператор \hat{H}_{int} отражает процессы ковалентного смешивания (\hat{T}_{pd}), прямые перескоки дырок между ближайшими ионами кислорода (\hat{T}_{pp}), хаббардовское отталкивание двух дырок, находящихся на одном ионе кислорода (\hat{U}_p), а также межузельное кулоновское отталкивание дырок, находящихся на ионах кислорода (\hat{V}_{pp}).

В выражении (2) $d_{f\sigma}^\dagger (d_{f\sigma})$ и $p_{l\sigma}^\dagger (p_{l\sigma})$ — операторы рождения (уничтожения) d- и p-дырок с проекцией спина $\sigma = \pm 1/2$ на ионе меди, положение которого нумеруется индексом f , и на ионе кислорода, находящемся в узле с номером l , соответственно. Посредством δ обозначена величина одного из четырёх векторов, связывающих ион

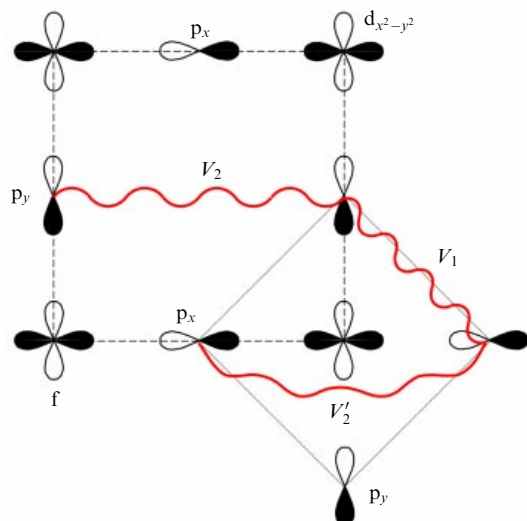


Рис. 2. Структура CuO_2 -плоскости. V_1 — кулоновское взаимодействие дырок, находящихся на ближайших ионах кислорода, V_2 и V'_2 — кулоновские отталкивания дырок, находящихся на следующих за ближайшими ионах кислорода. Чёрные (белые) участки соответствуют положительному (отрицательному) знаку лепестка орбитали.

меди с номером f и ион кислорода с номером $l = f + \delta$ в CuO_2 -плоскости: $\delta = \{\pm x/2, \pm y/2\}$, где $x = (a, 0)$ и $y = (0, a)$, a — параметр элементарной ячейки (рис. 2). Операторы числа частиц на ионах меди и кислорода определяются выражениями $\hat{n}_f^d = \sum_{\sigma} \hat{n}_{f\sigma}^d = \sum_{\sigma} d_{f\sigma}^{\dagger} d_{f\sigma}$ и $\hat{n}_l^p = \sum_{\sigma} \hat{n}_{l\sigma}^p = \sum_{\sigma} p_{l\sigma}^{\dagger} p_{l\sigma}$ соответственно; ε_d и ε_p — затравочные одноузельные энергии дырок на ионах меди и кислорода. Параметры U_p и V_{pp} отвечают энергиям кулоновского отталкивания дырок на одном и на разных ионах кислорода соответственно; t_{pd} — интеграл перескока дырки с иона кислорода на ион меди. Функция $\vartheta(\delta)$ учитывает влияние фаз орбиталей меди и кислорода на процессы гибридизации. Для показанных на рис. 2 профилей орбиталей функция $\vartheta(\delta)$ при изменении δ принимает следующие значения: $\vartheta(\delta) = \mp 1$ при $\delta = \pm x/2$ или $\delta = \pm y/2$. Интеграл перескока дырок между ближайшими орбиталями кислорода определяется как $t_{pp}(A) = t_p(A)$. Его знак определяется функцией $\rho(A)$, где A — величина вектора, соединяющего ближайшие ионы кислорода. При выбранной последовательности фаз орбиталей кислорода $\rho(A) = 1$ при $A = \pm(x+y)/2$ и $\rho(A) = -1$, если $A = \pm(x-y)/2$.

Гамильтониан Эмери является гамильтонианом многозонной теории металлов в представлении сильной связи. При больших значениях параметров Хаббардовского отталкивания он описывает систему с СЭК. Ввиду этого модель Эмери иногда называют трёхзонной или расширенной моделью Хаббарда.

Важным параметром модели является разность энергий дырок на ионах меди и кислорода $\Delta_{pd} = \varepsilon_p - \varepsilon_d$. Если $\Delta_{pd} > 0$, то в недопированном случае, когда на каждую ячейку приходится одна дырка, d-орбиталь иона меди при $t_{pd} = 0$ является занятой, а p-орбитали ионов кислорода — пустые. При допировании новые дырки будут занимать кислородные орбитали, если $U_d > \Delta_{pd}$. Это полностью согласуется с результатами экспериментов по спектроскопии электронных потерь (Electron Energy Loss Spectroscopy — EELS) [106].

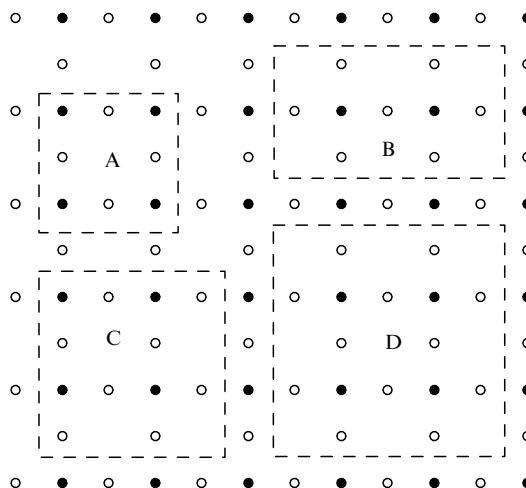


Рис. 3. Кластеры, используемые для точной диагонализации гамильтониана Эмери. Число атомов в кластерах $N_a = 8, 9, 12, 16$ соответственно для кластеров А, В, С, D. Тёмные кружки — атомы Cu, светлые — атомы O [114].

Значения энергетических параметров модели Эмери получены из вычислений зонной структуры несколькими группами [107–109]. В настоящее время наиболее часто используются следующие значения параметров [107, 110] (в [эВ]):

$$\begin{aligned} \Delta_{pd} &= 3,6, \quad t_{pd} = 1,3, \quad t_{pp} = 0,65, \\ U_d &= 10,5, \quad U_p = 4, \quad V_{pd} = 1,2. \end{aligned} \quad (5)$$

Из-за кулоновских взаимодействий модель Эмери сложна для теоретического анализа. Наличие четырёх затравочных вершин значительно ограничивает возможности применения различных форм теории возмущений при рассмотрении модели в общем виде. Отсутствие точных решений модели Эмери и затруднения, возникающие при попытках её разумного упрощения, стимулировали применение компьютерных методов анализа. Численные расчёты проводились в основном с помощью метода Монте-Карло и метода точной диагонализации конечных кластеров. Метод Монте-Карло [111, 112] давал возможность изучать сравнительно большие кластеры из $N_a = 50–100$ атомов [113], но точность расчёта резко уменьшалась с понижением температуры. Поэтому наиболее интересный случай $T \leq T_c \approx 100$ К выпадал из рассмотрения [114]. Метод точной диагонализации конечных кластеров [115, 116] свободен от этого недостатка: он позволяет исследовать как основное ($T = 0$), так и возбуждённое состояние системы. Слабым местом этого метода является ограничение на размер кластеров, накладываемое объёмом памяти и быстродействием компьютеров. Тем не менее данный метод вполне приемлем для качественного понимания свойств систем с СЭК. На рисунке 3 изображены медь-кислородные кластеры, основное состояние которых исследовалось в ряде работ для различных значений параметров гамильтониана Эмери: А [115, 117], В, D [116], С [118, 119], А, В, С, D [120]. Из этих четырёх кластеров лишь один кластер (С) с $N_a = 12$ обладает симметрией CuO_2 -плоскости и допускает периодические граничные условия. Кластер максимального размера, для которого выпол-

нялась точная диагонализация трёхзонной $p-d$ -модели, — это Cu_4O_{12} (кластер D).

Позднее в результате рассмотрения электронной структуры оксидов меди с учётом специфики их химической связи и СЭК [121–123] было отмечено, что кроме $3d_{x^2-y^2}$ -орбиталей меди и $2p_x$ - и $2p_y$ -орбиталей кислорода, которые учитываются в трёхзонной $p-d$ -модели, необходимо также учитывать другие орбитали меди (см. рис. 1). Заметную (10–15 %) заселённость $3d_{3z^2-r^2}$ -орбиталей меди во всех ВТСП p -типа выявили EELS-эксперименты [124, 125] и эксперименты по спектроскопии поглощения поляризованных рентгеновских лучей (Polarized X-ray-Absorption Spectroscopy — XAS) [126, 127].

Авторы [108] теоретически продемонстрировали важность $3d_{3z^2-r^2}$ -орбиталей меди. Оценив значения параметров $p-d$ -модели, они вычислили состояния CuO_4 -кластера, рассмотрев все 12 p -орбиталей и 5 d -орбиталей, и сравнили результаты с экспериментальными данными. Было обнаружено, что орбитали $3d_{3z^2-r^2}$, $3d_{xy}$, $3d_{xz}$ и $3d_{yz}$ вносят заметный вклад в формирование электронных состояний. Авторы [108] отметили, что наиболее важными являются $3d_{3z^2-r^2}$ -орбитали, поскольку они стабилизируются связями с атомами апического кислорода [128].

Предложен ряд механизмов сверхпроводимости, в которых $3d_{3z^2-r^2}$ -орбиталь играет существенную роль. В работах [129, 130] сформулирован электронный механизм спаривания — экситонный механизм Гайдидея–Локтева–Вебера [64]. В работе [131] показано, что совместное действие хундовского спаривания и сверхобменного взаимодействия между дырками на $3d_{x^2-y^2}$ -орбитали приводит к эффективному притяжению между квазичастицами, которые появляются на $3d_{3z^2-r^2}$ -орбитали при допировании.

В дальнейшем появились экспериментальные доказательства того, что апический кислород играет важную роль в электронной структуре купратов и может влиять на их сверхпроводящие свойства. Например, в некоторых структурах обнаружен значительный изотоп-эффект для апического кислорода [132, 133], а также явная корреляция между максимумом температуры T_c различных купратов и их $\text{Cu}-\text{O}_z$ -связью [134]. Этот факт привёл некоторых исследователей к заключению, что для ещё более реалистичного описания электронной структуры необходимо также принять во внимание $2p_z$ -орбиталь на апическом кислороде. В результате был сделан вывод, что минимальной реалистичной моделью медь-кислородных плоскостей является пятizonная $p-d$ -модель [129, 135], которая включает в себя две d -орбитали: $3d_{x^2-y^2}$ и $3d_{3z^2-r^2}$, а также $2p_x$ - и $2p_y$ -орбитали на каждом ионе кислорода и $2p_z$ -орбиталь на апическом кислороде [61].

2.4. $t-J$ -модель

Поскольку многозонные $p-d$ -модели содержат в себе несколько параметров, что усложняет их теоретический анализ, были предприняты попытки свести их к более простым моделям. Жанг и Райс [21] первыми достигли в этом успеха, следуя рассуждениям, изложенным ниже.

Рассмотрим ион меди, окружённый четырьмя ионами кислорода (CuO_4 -кластер). Добавляемая при допировании дырка попадает на ион кислорода в симметричное или антисимметричное состояние по отношению к центральной дырке на меди. Таким образом, дырка на кис-

лороде может образовать сильную связь с дыркой на меди и сформировать спиновое синглетное или триплетное состояние. Авторы [21] показали, что вблизи атомного предела во втором порядке теории возмущений спиновый синглет имеет более низкую (на 3–4 эВ) энергию, чем остальные возможные двухдырочные состояния. При допировании дырки попадают в это синглетное состояние (синглет Жанга–Райса), и, казалось бы, можно работать в синглетном подпространстве без нарушения физики задачи. В результате движение дырки осуществляется по квадратной решётке ионов меди, тогда как ионы кислорода больше не присутствуют в эффективной модели явно. Жанг и Райс [21] заключили, что эффективным гамильтонианом, описывающим физику трёхзонной модели, является гамильтониан так называемой $t-J$ -модели [63], представляющей собой эффективный низкоэнергетический вариант модели Хаббарда в пределе $t/U \ll 1$ [136, 137]. Гамильтониан этой модели без трёхцентровых слагаемых (см. ниже) в представлении вторичного квантования выражается в виде

$$\hat{H} = \sum_f (\varepsilon - \mu) \hat{n}_f + \sum_{f m \sigma} t_{f m} (1 - \hat{n}_{f \bar{\sigma}}) a_{f \sigma}^\dagger a_{m \sigma} (1 - \hat{n}_{m \bar{\sigma}}) + \sum_{f m} J_{f m} \left(\mathbf{S}_f \mathbf{S}_m - \frac{\hat{n}_f \hat{n}_m}{4} \right), \quad (6)$$

где $\hat{n}_f = \sum_\sigma \hat{n}_{f \sigma}$ — оператор числа электронов n_f со спином $\sigma = \pm 1/2$ на узле f , $t_{f m}$ — матричный элемент перескока, $a_{f \sigma}^\dagger (a_{f \sigma})$ — оператор рождения (уничтожения) электрона со спином σ на узле f , $J_{f m} = 2t_{f m}^2/U$ — эффективный обменный интеграл, U — параметр хаббардовского отталкивания электронов, \mathbf{S}_f — оператор спина $S = 1/2$ на узле f . Факторы $1 - \hat{n}_{f \bar{\sigma}}$ описывают запрет для электрона со спином σ находиться на узле f , на котором уже есть электрон со спином $\bar{\sigma} \equiv -\sigma$. Таким образом, $t-J$ -модель описывает движение электронов по незанятым узлам решётки. Исключение состояний с парой электронов на узле эквивалентно появлению эффективного обменного взаимодействия электронов на соседних узлах с обменным интегралом АФМ-знака.

Следует отметить, что при выводе гамильтониана $t-J$ -модели (6) из модели Хаббарда (1) в режиме СЭК возникают помимо обменных слагаемых так называемые трёхцентровые слагаемые [41, 138–144], имеющие тот же порядок малости, что и обменные слагаемые, и описывающие спин-коррелированные перескоки. С учётом этих слагаемых соответствующая модель называется $t-J^*$ -моделью. Трёхцентровые слагаемые играют существенную роль при описании сверхпроводящей d -фазы в купратах [41, 140–144]. Также следует отметить, что $t-J$ -модель может быть обобщена за счёт как одноузельного, так и межузельного кулоновских взаимодействий в рамках $t-J-U$ - и $t-J-U-V$ -моделей соответственно [145–148].

Исключительную популярность $t-J$ -модель приобрела после появления идеи Андерсона [23] о том, что электронные свойства ВТСП могут описываться гамильтонианом (6). Обзор теоретических исследований нормальных и сверхпроводящих свойств купратов в рамках $t-J$ -модели представлен в работах [7, 63, 67, 110]. Вопрос о полном и последовательном выводе эффективной однозонной модели из трёхзонной и многозонной $p-d$ -моделей подробно рассматривался авторами [149–158] в рамках кластерной формы теории возмущений.

2.5. Модель решётки Кондо

В качестве ещё одного варианта эффективного низкоэнергетического гамильтониана трёхзонной $p-d$ -модели при исследовании свойств купратных сверхпроводников часто используется [32–36, 41, 159, 160] гамильтониан модели решётки Кондо, или $s-d(f)$ -обменной модели [94, 95, 161–163]:

$$\hat{H}_K = \sum_{fmx} t_{fm} c_{fx}^\dagger c_{mx} + J \sum_{fz\beta} c_{fz}^\dagger \sigma_{z\beta} c_{f\beta} S_f + \frac{1}{2} \sum_{fm} I_{fm} S_f S_m, \quad (7)$$

которая учитывает не только обменное взаимодействие J между фермионами и локализованными спинами, но и гейзенберговское АФМ-взаимодействие между локализованными спинами с константой обмена I_{fm} . В гамильтониане (7) $c_{fx}^\dagger (c_{fx})$ — операторы рождения (уничтожения) квазичастицы на узле с индексом f и проекцией спина α , t_{fm} — интеграл перескока фермиона с узла f на узел m , S_f — оператор локализованного спина $S = 1/2$ на узле f , а $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ — вектор, составленный из матриц Паули.

Предельные случаи модели решётки Кондо соответствуют другим теоретическим моделям, часто используемым в физике систем с СЭК [164]. В отсутствие допирования модель решётки Кондо сводится к АФМ-модели Гейзенберга со спином $S = 1/2$ (иногда в литературе модель решётки Кондо называют моделью решётки Кондо–Гейзенберга), способной описывать физику недопированных купратов [165–170]. При больших J имеет место формирование синглетов Жанга–Райса (см. раздел 2.3) и низкоэнергетическая динамика обобщённой модели решётки Кондо может отражаться $t-J$ -моделью [21]. В случае присутствия кислород-кислородных перескоков модель решётки Кондо может быть сведена к обобщённой $t-J$ -модели, включающей перескоки фермионов во вторую и третью координационные сферы квадратной решётки, а также перескоки с переворотом спина [171]. При близком к нулю гейзенберговском взаимодействии модель решётки Кондо эквивалентна обычной модели Кондо [172].

В разделе 3 показано, что гамильтониан модели решётки Кондо (7) может быть последовательно получен из гамильтониана модели Эмери [173]. Однако для этого должны быть отброшены эффективные спин-коррелированные перескоки, играющие важную роль при формировании спин-фермионной квазичастицы. Последнее означает, что для адекватного описания свойств дырочно-допированных купратных сверхпроводников гамильтониан (7) должен быть существенно расширен.

3. Спин-фермионная модель купратов

3.1. Недостатки однозонных моделей

Несмотря на значительные успехи, достигнутые при описании физических свойств купратных сверхпроводников в рамках модели Хаббарда и $t-J$ -модели [7, 63, 67, 110], вопрос о правомерности сведения к ним модели Эмери оставался открытым и спорным. Эмери и Рейтер [174] показали, что в трёхзонной модели синглет Жанга–Райса перекрывается с триплетом на границах зоны Бриллюэна. Это приводит к элементарным возбуждениям, имеющим заряд и спин, в отличие от синглетов,

формирующихся в эффективной однозонной $t-J$ -модели. Авторы [174] привели аргументы в пользу того, что ионы кислорода играют существенную роль в формировании свойств дырочного ансамбля в CuO_2 -плоскостях, поэтому их не следует исключать из явного рассмотрения. Результат Эмери и Рейтера основывался на анализе точного решения на фоне ферромагнитного взаимодействия, а вывод заключался в том, что $t-J$ -модель не полностью отражает физику трёхзонной $p-d$ -модели. Жанг и Райс [175] и Эмери и Рейтер [176] продолжили обмен идеями по этому вопросу, однако так и не достигли согласия, хотя дальнейшие кластерные расчёты [177] в рамках трёхзонной $p-d$ -модели, казалось бы, подтверждали, что синглет Жанга–Райса хорошо отделён по энергии от остальных вышележащих двухдырочных состояний.

Авторы работы [178] показали, что зарядовые степени свободы приводят к новым физическим эффектам тогда, когда кулоновское взаимодействие между дырками на ионах меди и кислорода сравнимо по величине с энергией гибридизации и разницей энергий уровней меди и кислорода Δ_{pd} . В данном случае наличие двух сортов ионов является решающим фактором, поэтому трёхзонную модель нельзя сводить к эффективной однозонной. В работе [178] отмечалось, что одной из главных особенностей трёхзонной модели является существование коллективных возбуждений (резонансов переноса заряда) и неустойчивостей внутриячеечного характера, которые могут обуславливать механизм ВТСП.

По существу, Жанг и Райс, строго продемонстрировав в работе [21] значительный выигрыш в энергии связывающей орбитали, далее обосновывают эквивалентность $t-J$ - и $p-d$ -моделей лишь посредством качественных рассуждений. В цитированных работах [149–158], претендующих на строгость доказательства данного утверждения, в действительности делается большое количество приближений, связанных либо с отбрасыванием дальних взаимодействий, либо с пренебрежением значительной частью одноячеечных состояний. Однако стоит заметить, что при строгом выводе эффективного гамильтониана модели Эмери в режиме СЭК константа спин-фермионной связи и спин-коррелированных перескоков оказывается самыми большим параметром эффективной модели. В связи с этим дальнейшая трактовка указанных взаимодействий в рамках обычных пертурбативных подходов, использованных авторами [149–158], представляется необоснованной.

Концепция спинового полярона [32–36], напротив, исходит из того, что сильная спин-фермионная связь, возникающая в эффективном гамильтониане модели Эмери, должна учитываться точно. Раздел 3.2 посвящён подробному выводу эффективного гамильтониана модели Эмери — спин-фермионной модели купратов (СФМК) — и анализу возникающих во втором порядке по параметру $p-d$ -гибридизации спин-фермионных взаимодействий.

3.2. Эффективный гамильтониан модели Эмери в режиме сильных корреляций

Как отмечалось, в недопированном случае купраты при низких температурах являются АФМ-диэлектриками. Такой фазе соответствует основное состояние гамильтониана Эмери (2), если энергетические параметры удовле-

творяют условиям

$$A_{pd} > 0, \quad \frac{|t_{pd}(\delta)|}{A_{pd}} \ll 1, \quad \frac{|t_{pd}(\delta)|}{U_d - A_{pd} - 2V_{pd}} \ll 1. \quad (8)$$

Положительная величина щели с переносом заряда $A_{pd} = \varepsilon_p - \varepsilon_d$ обеспечивает нахождение дырок преимущественно на ионах меди с реализацией состояний со спином $S = 1/2$. Второе неравенство устанавливает слабую интенсивность процессов ковалентного смешивания d-состояний на ионах меди и p-состояний на ионах кислорода.

При выполнении третьего неравенства (8) реализуется режим СЭК, в котором становится энергетически невыгодным нахождение двух дырок на одном ионе меди. Поэтому в отсутствие допирования формируется диэлектрическая фаза Мотта–Хаббарда, а при допировании дополнительная дырка появляется на p-орбитали иона кислорода. Однако вследствие гибридизации этой орбитали с d-орбиталью ближайшего иона меди возникают виртуальные переходы дополнительной дырки в высокэнергетические состояния с двумя дырками ионов меди. Такие переходы приводят к эффективному взаимодействию дырки на кислороде с локализованными спинами на ионах меди, что разрушает дальний магнитный порядок. Корректный учёт отмеченных процессов может быть осуществлён посредством построения эффективного гамильтониана.

Неравенства (8) позволяют рассматривать процессы ковалентного смешивания p-орбиталей ионов кислорода и d-орбиталей ионов меди в рамках теории возмущений. Регулярный способ реализации такой программы заключается в построении эффективного гамильтониана \hat{H}_{eff} и последующем развитии теории купратных сверхпроводников на его основе. Целесообразность введения \hat{H}_{eff} связана с тем, что в нём отмеченные процессы p–d-гибридизации, сопровождаемые переходами ионов меди в состояния с двумя дырками, а также в состояния этих ионов без дырок, проявляются посредством возникновения эффективных взаимодействий. При этом существенно, что для подсистемы ионов меди гамильтониан \hat{H}_{eff} действует только на классе гомеополярных состояний, идентифицируемых значениями проекции спина. Такая редукция гильбертова пространства позволяет не только упростить последующие вычисления, но и получить на основе физической интерпретации возникающих эффективных взаимодействий наглядные представления о принципиальных особенностях низкоэнергетического спектра элементарных возбуждений.

Для нахождения \hat{H}_{eff} используют метод унитарных преобразований Шриффера–Вольфа [179] либо операторную форму теории возмущений [180, 181]. При применении второго подхода вычисления проводятся достаточно просто, если перейти к атомному представлению. С этой целью введём четыре базисных состояния иона меди, находящегося на узле f : $|f; 0\rangle$ — состояние без дырки, $|f; \alpha\rangle = d_{f\alpha}^\dagger |f; 0\rangle$ — состояние с одной дыркой, имеющей проекцию спина α , $|f; 2\rangle = d_{f\uparrow}^\dagger d_{f\downarrow}^\dagger |f; 0\rangle$ — состояние с двумя дырками.

Операторы Хаббарда в базисе этих состояний определяются обычным образом:

$$X_f^{pq} = |f; p\rangle \langle q; f|, \quad (9)$$

где p и q — индексы одноионных состояний. Применяя хорошо известное представление операторов вторичного квантования через операторы Хаббарда:

$$d_{f\alpha} = X_f^{0\alpha} + 2\alpha X_f^{22}, \quad \alpha = \pm \frac{1}{2}, \quad \bar{\alpha} \equiv -\alpha, \quad (10)$$

запишем гамильтониан Эмери (2) в виде, удобном для использования операторной формы теории возмущений. В атомном представлении оператор \hat{H}_0 (3) определяется выражением

$$\hat{H}_0 = \sum_{f\alpha} \varepsilon_d X_f^{z\alpha} + \sum_f (2\varepsilon_d + U_d) X_f^{22} + \sum_f \varepsilon_p (\hat{n}_{f+x/2}^p + \hat{n}_{f+y/2}^p) + V_{pd} \sum_{f\delta} \left(\sum_\alpha X_f^{z\alpha} + 2X_f^{22} \right) \hat{n}_{f+\delta}^p. \quad (11)$$

В операторе взаимодействия (4) изменит вид лишь слагаемое \hat{T}_{pd} :

$$\hat{T}_{pd} = \sum_{f\delta\alpha} t_{pd} \vartheta(\delta) (X_f^{z0} + 2\alpha X_f^{2\bar{\alpha}}) p_{f+\delta, \alpha} + \text{h.c.} \quad (12)$$

Используя условия (8) и применяя операторную форму теории возмущений, получаем формальное представление для эффективного гамильтониана в виде ряда по степеням параметра t_{pd} :

$$\hat{H}_{\text{eff}} = P\hat{H}P + \hat{H}^{(2)} + \hat{H}^{(3)} + \hat{H}^{(4)} + \dots, \quad (13)$$

где проекционный оператор

$$P = \prod_f (X_f^{\uparrow\uparrow} + X_f^{\downarrow\downarrow}) \quad (14)$$

определяется через диагональные операторы Хаббарда $X_f^{z\alpha} = |f; \alpha\rangle \langle \alpha; f|$, которые обладают проекционным свойством $(X_f^{z\alpha})^2 = X_f^{z\alpha}$. Видно, что оператор P осуществляет проецирование на подпространство, из которого исключены как состояния с двумя дырками на ионах меди, так и состояния, не содержащие ни одной дырки на этих ионах.

Слагаемое нулевой степени по $t_{pd}(\delta)$ описывает систему дырок на кислороде, которая в этом приближении является изолированной от подсистемы дырок ионов меди,

$$P\hat{H}P = N\varepsilon_d + \sum_{lx} \tilde{\varepsilon}_p \hat{n}_{lx} + \hat{U}_p + \hat{V}_{pp} + \hat{T}_{pp}. \quad (15)$$

Появление слагаемого $N\varepsilon_d$ обусловлено тем, что на классе гомеополярных состояний ионов меди оператор \hat{n}_f становится единичным оператором. Через N обозначено число элементарных ячеек в CuO_2 -плоскости. Перенормировка энергии для кислородной дырки $\tilde{\varepsilon}_p = \varepsilon_p + 2V_{pd}$ происходит из-за взаимодействия этой дырки, находящейся на ионе кислорода, с двумя дырками, которые формируют гомеополярные состояния двух ближайших ионов меди.

Оператор $\hat{H}^{(2)}$, содержащий только квадратичные по $t_{pd}(\delta)$ слагаемые, определяется выражением

$$\hat{H}^{(2)} = -P\hat{T}_{pd}(\hat{H}_0 - E_0)^{-1}\hat{T}_{pd}P. \quad (16)$$

Применяя алгебру операторов Хаббарда $X_f^{nm} X_f^{pq} = \delta_{np} X_f^{nq}$, после несложных вычислений находим явный

вид $\hat{H}^{(2)}$ в узельном представлении:

$$\hat{H}^{(2)} = -\frac{4Nt_{pd}^2}{4p_d + V_{pd}} + \hat{\tau} + \hat{J}. \quad (17)$$

Первое слагаемое в правой части (17) определяет вклад в энергию связи недопированной системы, обусловленный ковалентными эффектами. Второе слагаемое,

$$\hat{\tau} = \frac{\tau}{2} \sum_{f\delta\delta'\alpha} \vartheta(\delta)\vartheta(\delta') p_{f+\delta,\alpha}^+ p_{f+\delta',\alpha}, \quad (18)$$

описывает перемещение дырок, приводящее к размыванию уровней орбиталей кислорода. При этом ширина возникающей зоны задаётся величиной

$$\tau = \frac{t_{pd}^2}{4p_d} \left(1 - \frac{4p_d}{U_d - 4p_d - 2V_{pd}} \right). \quad (19)$$

Третье слагаемое в (17) устанавливает обменную связь между подсистемой локализованных спинов и дырками на кислороде:

$$\hat{J} = \frac{J}{4} \sum_{f\delta\delta'\alpha\beta} \vartheta(\delta)\vartheta(\delta') p_{f+\delta,\alpha}^{\dagger} \mathbf{S}_f \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} p_{f+\delta',\beta}, \quad (20)$$

где обменный параметр

$$J = \frac{4t_{pd}^2}{4p_d} \left(1 + \frac{4p_d}{U_d - 4p_d - 2V_{pd}} \right). \quad (21)$$

Оператор \hat{J} описывает как спин-коррелированные перескоки дырок между ионами кислорода, так и обменное взаимодействие дырки на ионе кислорода со спинами на ближайших ионах меди. Здесь \mathbf{S}_f — векторный оператор локализованного спина на узле f , а векторный оператор $\boldsymbol{\sigma}$ составлен из матриц Паули: $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z)$.

Слагаемые эффективного гамильтониана третьего порядка теории возмущений обычно не учитываются, поскольку они обладают дополнительной малостью как по концентрации кислородных дырок, так и по параметру ковалентного смешивания. Поэтому в области низкого допирования вкладом таких слагаемых можно пренебречь.

Среди вкладов четвёртого порядка наибольшее значение имеют слагаемые нулевой степени по концентрации кислородных носителей. Эти вклады приводят, как известно, к формированию обменного взаимодействия АФМ-типа в подсистеме локализованных спинов. После несложных вычислений получается оператор, описывающий гейзенберговское обменное взаимодействие:

$$\hat{I} = \frac{I}{2} \sum_{f\delta} \mathbf{S}_f \mathbf{S}_{f+2\delta}, \quad (22)$$

в котором обменный интеграл определяется выражением

$$I = \frac{4t_{pd}^4}{(4p_d + V_{pd})^2} \left(\frac{1}{U_d} + \frac{1}{4p_d} \right). \quad (23)$$

Для получения более простого в физическом отношении вида операторов $\hat{\tau}$ и \hat{J} перейдём к квазиимпульсному представлению. Приняв во внимание, что на одну элементарную ячейку CuO_2 -плоскости приходится две орби-

тали (p_x и p_y), запишем преобразование Фурье в виде

$$p_{f\pm x/2,\alpha} \equiv a_{f\pm x/2,\alpha} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \exp \left[ik \left(f \pm \frac{x}{2} \right) \right] a_{k\alpha}, \quad (24)$$

$$p_{f\pm y/2,\alpha} \equiv b_{f\pm y/2,\alpha} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \exp \left[ik \left(f \pm \frac{y}{2} \right) \right] b_{k\alpha}.$$

Тогда входящая в определение операторов $\hat{\tau}$ и \hat{J} комбинация операторов вторичного квантования примет вид

$$\begin{aligned} \sum_{\delta} \vartheta(\delta) p_{f+\delta,\alpha} &= a_{f+x/2,\alpha} + b_{f+y/2,\alpha} - a_{f-x/2,\alpha} - b_{f-y/2,\alpha} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \exp(ikf) 2i \left(a_{k\alpha} \sin \frac{k_x}{2} + b_{k\alpha} \sin \frac{k_y}{2} \right). \end{aligned} \quad (25)$$

Собирая слагаемые (13) вместе, получаем гамильтониан СФМК [24–31]:

$$\hat{H} = \hat{H}_h + \hat{J} + \hat{I} + \hat{U}_p + \hat{V}_{pp}, \quad (26)$$

$$\hat{H}_h = \sum_{k\alpha} \left[\xi_{k_x} a_{k\alpha}^{\dagger} a_{k\alpha} + \xi_{k_y} b_{k\alpha}^{\dagger} b_{k\alpha} + t_k (a_{k\alpha}^{\dagger} b_{k\alpha} + b_{k\alpha}^{\dagger} a_{k\alpha}) \right],$$

$$\hat{J} = \frac{J}{N} \sum_{fkq\alpha\beta} \exp [if(q-k)] u_{k\alpha}^{\dagger} \mathbf{S}_f \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} u_{q\beta},$$

$$\hat{I} = \frac{I}{2} \sum_{f\delta} \mathbf{S}_f \mathbf{S}_{f+2\delta},$$

$$\hat{U}_p = \frac{U_p}{N} \sum_{pkq} (a_{p+q\uparrow}^{\dagger} a_{k-q\downarrow}^{\dagger} a_{k\downarrow} a_{p\uparrow} + b_{p+q\uparrow}^{\dagger} b_{k-q\downarrow}^{\dagger} b_{k\downarrow} b_{p\uparrow}),$$

$$\hat{V}_{pp} = \frac{4V_1}{N} \sum_{pkq} \cos \frac{q_x}{2} \cos \frac{q_y}{2} a_{p+q,\alpha}^{\dagger} b_{k-q,\beta}^{\dagger} b_{k\beta} a_{q\alpha} +$$

$$+ \frac{1}{N} \sum_{p,k,q} \left\{ [V_2' \exp(iq_x) + V_2 \exp(-iq_y)] a_{p-q,\alpha}^{\dagger} a_{k+q,\beta}^{\dagger} a_{k\beta} a_{q\alpha} + \right.$$

$$\left. + [V_2' \exp(iq_y) + V_2 \exp(-iq_x)] b_{p+q,\alpha}^{\dagger} b_{k-q,\beta}^{\dagger} b_{k\beta} b_{q\alpha} \right\}.$$

В гамильтониане (26) оператор \hat{H}_h в представлении химического потенциала описывает свободные дырки на ионах кислорода, оператор \hat{J} отражает взаимодействие этих дырок со спинами ионов меди, оператор \hat{I} соответствует обменному взаимодействию между локализованными спинами ионов меди. При записи этих выражений использованы функции

$$\xi_{k_{x(y)}} = \varepsilon_p + 2V_{pd} + \tau(1 - \cos k_{x(y)}) - \mu, \quad (27)$$

$$t_k = (2\tau - 4t) \sin \frac{k_x}{2} \sin \frac{k_y}{2}, \quad (28)$$

где μ — химический потенциал системы. Функция t_k описывает как процессы гибридизации во втором порядке теории возмущений (параметр τ), так и прямые перескоки дырок между ионами кислорода (параметр t_{pp} в исходной модели Эмери (2) здесь для краткости обозначен как t).

Подчёркнём, что в СФМК связь подсистемы локализованных спинов с подсистемой дырок на кислороде

описывается оператором \hat{J} при учёте реальной структуры CuO_2 -плоскости. Это означает, что принимаются во внимание p_x - и p_y -орбитали в каждой элементарной ячейке. Формальное отражение данного обстоятельства проявляется в том, что входящие в \hat{J} операторы u_{kx} записываются в виде суперпозиции

$$u_{kx} = a_{kx} \sin \frac{k_x}{2} + b_{kx} \sin \frac{k_y}{2}. \quad (29)$$

Оператор \hat{U}_p описывает хаббардовское отталкивание дырок на ионах кислорода. Последнее слагаемое гамильтониана СФМК соответствует учёту межузельного кулоновского взаимодействия. Здесь слагаемое с параметром V_1 описывает отталкивание дырок, находящихся на ближайших ионах кислорода. Из-за особенности строения CuO_2 -плоскости взаимодействие дырки, находящейся на узле с номером l , с другой дыркой, находящейся на узле l' , следующем за ближайшим, зависит как от положения узла l , так и от направления вектора $\mathbf{r}_{ll'}$ (см. рис. 2). С этим обстоятельством связано наличие двух параметров, V_2 и V'_2 , в операторе \hat{V}_{pp} .

Характерной особенностью гамильтониана (26) является $\text{SU}(2)$ -инвариантный вид оператора спин-фермионного взаимодействия \hat{J} . Именно в такой форме оператор \hat{J} записан в одной из основополагающих работ Эмери и Рейтера [174]. Гамильтониан СФМК в импульсном представлении рассматривался ранее в работе [182] при исследовании спектра фермиевских квазичастиц в $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ в самосогласованном борновском приближении. В отмеченных работах, однако, не принимались во внимание операторы кулоновского взаимодействия \hat{U}_p и \hat{V}_{pp} .

3.3. Общие свойства и принципиальные отличия спин-фермионной модели купратов и других эффективных моделей

Как отмечено в разделе 3.2, СФМК была сформулирована практически сразу после открытия купратных ВТСП и получила широкое применение при описании их физических свойств [24–30]. Заметим, что специального названия в то время эта модель не носила, однако в 1998 г. в работе [31] модель с гамильтонианом (26) впервые была названа спин-фермионной.

С другой стороны, в начале 1990-х годов в работах [183–185] был развит полуфеноменологический подход, позволивший на основе спин-флуктуационного механизма куперовского спаривания объяснить высокие значения критической температуры d -волновой сверхпроводимости. Подробно этот механизм на основе модели с гамильтонианом

$$\hat{H} = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k \varphi_{k\sigma}^\dagger \varphi_{k\sigma} + \frac{1}{2N} \sum_{kq\alpha\beta} g(q) \varphi_{k+q,\alpha}^\dagger \mathbf{S}_{-q} \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} \varphi_{k\beta} \quad (30)$$

обсуждается в обзоре [186]. При анализе свойств системы в рамках гамильтониана (30) предполагалось, что статистические свойства спин-флуктуирующего оператора \mathbf{S} задаются посредством спин-спиновой корреляционной функции (тензора динамической восприимчивости $\chi_{ij}(q, \omega)$) [184].

Модель с гамильтонианом (30) получила название спин-фермионной модели (СФМ) в 1996 г. в работе [187].

При дальнейшем развитии теории в рамках этой модели [188–196] использовался эффективный гамильтониан, учитывающий низкоэнергетические возбуждения и обменное взаимодействие между спиновыми моментами:

$$\hat{H} = \sum_{kx} v_F(k - k_F) c_{kx}^\dagger c_{kx} + \sum_q \chi_0^{-1}(q) \mathbf{S}_q \mathbf{S}_{-q} + \frac{g}{\sqrt{N}} \sum_{kq\alpha\beta} c_{k+q,\alpha}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} c_{k\beta} \mathbf{S}_{-q}. \quad (31)$$

Эта модель описывает фермионы в так называемых горячих точках, которые возникают на пересечении поверхности Ферми с границей АФМ-зоны Бриллюэна и взаимодействуют посредством обменных магнитных флуктуаций, имеющих максимум в точке $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$.

Таким образом, в конце XX в. в теории сильно коррелированных систем сложилась ситуация, в которой как минимум две модели были независимо названы спин-фермионными. По этой причине в настоящем обзоре во избежание путаницы мы будем называть модель с гамильтонианом (26) СФМК, а для модели (31) будем использовать аббревиатуру СФМ. В данном разделе мы рассмотрим общие свойства, а также укажем на принципиальные различия этих моделей.

Как отмечалось авторами [188–192, 194–196], один из способов вывода СФМ основывается на применении преобразования Стратоновича–Хаббарда с целью преобразования четырёхфермионного взаимодействия в гамильтониане хаббардовского типа. Возникающая в результате такой процедуры спин-фермионная связь приводит во втором порядке по константе связи к эффективному взаимодействию между фермионами.

При формулировке модели авторы [188–192, 194–196] использовали экспериментальный факт, согласно которому АФМ-неустойчивость в системе взаимодействующих фермионов обусловлена главным образом фермионами с энергиями, сравнимыми с шириной фермионной зоны W . С другой стороны, куперовское спаривание индуцируется фермионами, находящимися в окрестности поверхности Ферми, если температура куперовской неустойчивости $T_{\text{ins}} \ll W$. Эта разнесённость масштабов позволяет изучать куперовскую неустойчивость в рамках эффективной низкоэнергетической модели, в которой высокоэнергетические фермиевские степени свободы (ответственные за антиферромагнетизм) уже проинтегрированы.

Таким образом, параметрами модели (31) являются скорость Ферми v_F , константа спин-фермионной связи g (вблизи половинного заполнения имеющая величину порядка хаббардовского параметра U), а также спиновая корреляционная длина ξ , определённая посредством статической спиновой восприимчивости, $\chi_0(\mathbf{q}) = \chi_0 \xi^2 / [1 + (\mathbf{q} - \mathbf{Q})^2 \xi^2]$, которая имеет пик в точке \mathbf{Q} зоны Бриллюэна (предполагается, что динамическая часть спиновой восприимчивости обусловлена взаимодействием с низкоэнергетическими фермионами и поэтому не входит в модель).

Из сказанного следует, что как в СФМК, так и в СФМ рассматривается ансамбль фермионов на 2D-решётке, которые взаимодействуют со спиновой подсистемой. Это является общим свойством обеих моделей. Однако в остальном различие между ними значительно.

Поскольку определяющую роль в различиях двух моделей играют операторы \hat{H}_h и \hat{J} , рассмотрим их более подробно. С этой целью запишем в представлении Ванье оператор обменной связи СФМ:

$$\hat{J}_{sf} = g \sum_{f\alpha\beta} c_{f\alpha}^\dagger \mathbf{S}_f \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} c_{f\beta}. \quad (32)$$

Видно, что в СФМ обменная связь между подсистемой локализованных спинов и коллективизированными фермионами учитывается только в том случае, когда спин и дырка находятся в одной ячейке. Фактически это есть то взаимодействие, которое определяет хорошо известную $s-d(f)$ -обменную модель Вонсовского.

Для упрощения дальнейшего сравнения СФМК и СФМ исключим в первой прямые перескоки дырок между ионами кислорода. Кроме того, откажемся сначала и от учёта кулоновского взаимодействия в подсистеме дырок кислорода. Эффективный гамильтониан модели Эмери в виде, не учитывающем кулоновские взаимодействия \hat{V}_{pd} , \hat{U}_p и \hat{V}_{pp} , использовался при изучении свойств купратных сверхпроводников в работах [26, 27, 159, 160].

Проведя каноническое преобразование

$$\varphi_{k\alpha} = v_{k_x} a_{k\alpha} + v_{k_y} b_{k\alpha}, \quad (33)$$

$$\psi_{k\alpha} = -v_{k_y} a_{k\alpha} + v_{k_x} b_{k\alpha},$$

в котором

$$v_{k_x} = \frac{\sin(k_x/2)}{v_k}, \quad v_{k_y} = \frac{\sin(k_y/2)}{v_k}, \quad (34)$$

$$v_k = \sqrt{1 - \frac{\cos k_x + \cos k_y}{2}},$$

получим диагональный вид оператора:

$$\hat{H}_h = \sum_{k\alpha} \varepsilon_p \psi_{k\alpha}^\dagger \psi_{k\alpha} + \sum_{k\alpha} \tau_k \varphi_{k\alpha}^\dagger \varphi_{k\alpha}. \quad (35)$$

Видно, что смешивание исходных дырочных состояний приводит к двум типам фермионов. Для одного из них энергетический спектр остаётся бездисперсным, а для другого задаётся выражением

$$\tau_k = \tau(2 - \cos k_x - \cos k_y). \quad (36)$$

Оператор \hat{J} в новом представлении приобретает вид обменной связи между локализованными спинами и только той подсистемой коллективизированных фермионов, которая описывается состояниями $\varphi_{k\alpha}^\dagger|0\rangle$ (φ -состояния),

$$\hat{J}_\varphi = \frac{J}{N} \sum_{f\alpha q\beta} \exp[if(q-k)] v_k v_q \varphi_{k\alpha}^\dagger \mathbf{S}_f \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} \varphi_{q\beta}. \quad (37)$$

Переходя к представлению Ванье для связывающих $\varphi_{k\alpha}$ -орбиталей и несвязывающих $\psi_{k\alpha}$ -орбиталей,

$$\varphi_{k\alpha} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_f \exp(-ikf) \varphi_{f\alpha}, \quad (38)$$

$$\psi_{k\alpha} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_f \exp(-ikf) \psi_{f\alpha},$$

получим, что оператор \hat{J}_φ имеет следующую структуру:

$$\begin{aligned} \hat{J}_\varphi &= 2Jv^2(0) \sum_f \mathbf{S}_f \mathbf{s}_f + 2J \sum_{f \neq f'} v_{ff'}^2 \mathbf{S}_f \mathbf{s}_{f'} + \\ &+ Jv(0) \sum_{f \neq f'} v_{ff'} (\varphi_{f\alpha}^\dagger \mathbf{S}_f \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} \varphi_{f'\beta} + \text{h.c.}) + \\ &+ J \sum_{f \neq f_1 \neq f_2} v_{ff_1} v_{ff_2} \varphi_{f_1\alpha}^\dagger \mathbf{S}_f \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} \varphi_{f_2\beta}. \end{aligned} \quad (39)$$

Первое слагаемое в правой части (39) по форме совпадает со взаимодействием (32) СФМ. Однако в СФМК это взаимодействие является сильным и требует такого подхода, при котором одноузельные корреляции должны учитываться строго. Для демонстрации этого обстоятельства вычислим энергию обменного расщепления между триплетным и синглетным состояниями, образующимися в том случае, когда в ячейке с номером f находится фермион в состоянии $\varphi_{f\alpha}^\dagger|0\rangle$.

Из выражения для \hat{J}_φ следует, что обменная связь в пределах одной ячейки определяется как

$$\hat{J}_\varphi(0) = 2Jv^2(0) \mathbf{S} \mathbf{s}, \quad (40)$$

где \mathbf{S} — векторный оператор локализованного спина $S = 1/2$, \mathbf{s} — векторный оператор спина дырки, $v(0)$ — величина одноячеечной перенормировки,

$$v(0) = \frac{1}{N} \sum_k v_k = 0,96. \quad (41)$$

Используя значения параметров модели Эмери (5), получаем

$$\Delta E_J = 2Jv^2(0) = 5,38 \text{ эВ}. \quad (42)$$

Такая большая величина обменного расщепления указывает на наличие сильной спин-фермионной связи, которая является одной из отличительных особенностей СФМК. Поэтому первоочередной задачей при использовании СФМК становится корректный учёт этой связи. Решение такой задачи осуществляется посредством перехода к квазичастицам, в которых спин-фермионные корреляции спинов с ближайшим окружением кислородных дырок учитываются точно. Это приводит к формированию спин-поляронных квазичастиц, которые определяют свойства нормальной фазы купратов (см. раздел 5), а также существенно сказываются на механизме куперовской неустойчивости и симметричных свойствах сверхпроводящего состояния (см. раздел 6).

Второе слагаемое в правой части (39) учитывает обменное взаимодействие локализованных спинов и спинов дырок, находящихся в разных элементарных ячейках.

Особого внимания заслуживает третье слагаемое выражения (39), отражающее процессы переноса дырки с узла f' на узел f , в котором эта дырка сильно коррелирует с локализованным спином, описываемым оператором \mathbf{S}_f . В результате возникают так называемые спин-коррелированные перескоки [159, 173, 197–199], при которых спин переносимой дырки изменяет или не изменяет свою проекцию в строгом соответствии с изменением или не изменением проекции локализованного спина. Существенно, что матричный элемент спин-коррелированного перескока между ближайшими узлами не является ма-

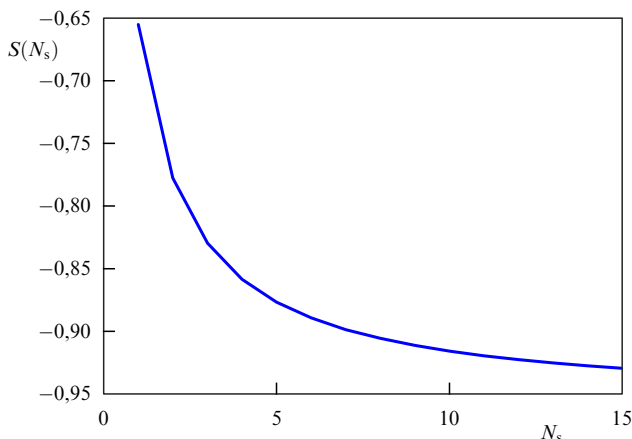


Рис. 4. Зависимости $S(N_s)$ от номера координационной сферы, до которой проводится суммирование коэффициентов $v(R)$.

лым — имеет величину $\sim 0,2$ эВ. Именно поэтому спин-коррелированные перескоки играют существенную роль при формировании правильной зависимости спектра фермиевских возбуждений.

Последнее слагаемое в (39) описывает такие спин-коррелированные перескоки, для которых все три оператора относятся к разным ячейкам.

В приведённых выражениях скорость убывания интенсивности эффективных взаимодействий определяется зависимостью функции $v_{ff'} = (1/N) \sum_k \exp[ik(f-f')]v_k$ от расстояния между ячейками f и f' . В связи с этим заметим, что, хотя значение $v_0 = 0,96$ существенно больше значения $v_a = -0,14$, это вовсе не означает, что параметры v_R быстро спадают при возрастании R . В действительности после быстрого уменьшения v_R на первом шаге далее начинает проявляться замедление скорости убывания. Поскольку с возрастанием номера координационной сферы увеличивается и число её узлов, оправданность заведомого пренебрежения перескоками между узлами из дальних координационных сфер неочевидна. В этом можно убедиться, если воспользоваться точным "правилом сумм":

$$\sum_R v_R = v_0 + \sum_{R \neq 0} v_R = 0. \quad (43)$$

Введём величину

$$S(N_s) = \sum_{R \neq 0}^{R \leq N_s} v_R, \quad (44)$$

которая обозначает сумму коэффициентов v_R для координационных сфер начиная с первой и до координационной сферы с номером N_s включительно. Из определения (44) и правила сумм (43) следует, что при $N_s \rightarrow \infty$ сумма $S(N_s) \rightarrow -v_0 = -0,96$.

На рисунке 4 показано поведение функции $S(N_s)$ при изменении номера координационной сферы от $N_s = 1$ до $N_s = 15$. Видно, что после начального быстрого стремления суммы к своему асимптотическому значению происходит переход к её медленному убыванию. Это означает, что с возрастанием R вклад дальних координационных сфер остаётся заметным.

Таким образом, прямые расчёты подтверждают, что переход к однозонному описанию достигается ценой перехода к гамильтониану, в котором необходимо учи-

тывать спин-коррелированные перескоки между узлами, находящимися на больших межатомных расстояниях. В результате сравнения двух моделей можно сделать следующие выводы.

Во-первых, в СФМК обменное взаимодействие между спинами ионов меди и дырками на кислороде является сильным. Таким образом, первостепенной задачей становится корректный учёт этой сильной связи. Решение задачи осуществляется переходом к квазичастицам, в которых спин-фермионные корреляции спинов с ближайшим окружением дырок на кислороде учитываются точно. Это приводит к формированию спин-поляронных квазичастиц, для которых в дальнейшем рассматривается куперовское спаривание. Причём характеристики энергетического спектра определяются через исходные параметры модели Эмери. Напротив, в СФМ спин-фермионное взаимодействие рассматривается в режиме слабой связи и фермиевский спектр моделируется из сравнения с экспериментальными данными.

Во-вторых, существенное различие двух моделей связано с тем, что в СФМК присутствуют слагаемые, описывающие спин-коррелированные перескоки. Установлено [159, 173, 197–199], что спин-коррелированные перескоки носят дальнедействующий характер и учёт именно этих процессов играет важную роль при описании экспериментально наблюдаемого минимума в точке $(\pi/2, \pi/2)$ зоны Бриллюэна для квазимульсальной зависимости спектра фермиевских возбуждений в нормальной фазе. При этом правильный энергетический спектр получается не за счёт введения дополнительных параметров модели, влияющих на вид спектра, а в результате использования тех же самых параметров исходной модели Эмери.

В-третьих, различие между двумя моделями становится ещё более значительным, если учитываются прямые перескоки дырок между ионами кислорода и кулоновское взаимодействие. В этом случае переход к однозонному описанию становится проблематичным уже только потому, что при учёте прямых перескоков в игру вступают фермиевские степени свободы, относящиеся ко второй зоне. Однако более сильный аргумент неадекватности однозонного описания связан с кулоновским взаимодействием дырок, находящихся на ближайших узлах кислорода. Дело в том, что, как показано в разделе 6.2, при использовании СФМК для описания сверхпроводящей фазы возникает важный эффект, проявляющийся в том, что отмеченное кулоновское взаимодействие не подавляет сверхпроводящего d-спаривания. Оказалось, что данный эффект имеет симметричную природу, поэтому существенным является учёт реальной структуры CuO_2 -плоскости, когда элементарная ячейка содержит два иона кислорода и один ион меди. При попытке перехода к однозонному описанию реальная структура решётки не работает, что приводит к искажению эффективного кулоновского взаимодействия. Поэтому важный эффект нейтрализации негативного влияния кулоновского взаимодействия исчезает и сверхпроводимость подавляется.

Таким образом, несмотря на формальное сходство СФМК и СФМ, между ними имеются отмеченные выше существенные различия. Причина этого расхождения связана с тем, что в СФМК учитываются особенности кристаллографического строения CuO_2 -плоскостей, а возникающие эффективные взаимодействия строго вы-

водятся на основе использования параметров малости в режиме СЭК при учёте основных взаимодействий базовой модели Эмери.

3.4. Усечённые формы спин-фермионной модели купратов

Из вида оператора \hat{J}_ϕ (39) в узельном представлении следует, что СФМК можно рассматривать как обобщение модели решётки Кондо с гамильтонианом \hat{H}_K (7). Расширение модели решётки Кондо обусловлено учётом спин-фермионных взаимодействий из дальних координационных сфер (в \hat{H}_K это взаимодействие локально), а также учётом спин-коррелированных перескоков.

Несмотря на то что модель решётки Кондо включает в себя спин-фермионную связь в предельно простом виде, в ряде работ [164, 185, 200–205] решётку Кондо также называли спин-фермионной моделью. Многие исследования, использующие представление о спиновом поляроне как о "правильной" квазичастице (в том числе в купратных ВТСП), основывались именно на модели с гамильтонианом (7) [32–36, 41].

Подчеркнём ещё раз, что решётка Кондо, как и t - J -модель, оказывается недостаточной для адекватного описания низкотемпературных свойств дырочно-допированных купратных сверхпроводников. Основное расхождение с СФМК возникает из-за необоснованного отбрасывания в гамильтониане \hat{H}_K (7) дальних спин-коррелированных перескоков. Другое существенное отличие связано с отсутствием в \hat{H}_K кулоновских взаимодействий: учёт этих взаимодействий при выводе СФМК в узельном представлении приводит к появлению дополнительных слагаемых, имеющих дальнедействующий характер [155, 206]. С этим обстоятельством связано добавление в гамильтониан модели решётки Кондо (7) оператора кулоновского взаимодействия [41].

4. Концепция спинового полярона

4.1. Спин-поляронная природа фермиевских квазичастиц в купратах

Установление механизма куперовской неустойчивости в ВТСП представляется невозможным без понимания структуры квазичастиц и природы их взаимодействий в нормальной фазе. Важную информацию о свойствах квазичастиц дают результаты исследования топологии и эволюции поверхности Ферми при допировании ВТСП [20, 39]. ARPES-данные однозначно свидетельствуют о неприменимости модели жёсткой зоны при описании наблюдаемой модификации поверхности Ферми с увеличением концентрации дырок в системе [1, 207–210]. Отличия энергетических спектров оптимально допированных купратов от спектров недопированных соединений приводят к выводу о том, что адекватное описание динамики фермиевских возбуждений в ВТСП не может считаться достигнутым, если не удастся правильно отразить эволюцию спектральной плотности квазичастиц $A(\mathbf{k}, \omega)$, наблюдаемую при допировании.

На сегодняшний день результаты ARPES-исследований недопированных материалов [1, 211–215] указывают на реализацию изотропного дна зоны в окрестности точки $N = (\pi/2, \pi/2)$ в квазиимпульсном пространстве. В оптимально допированных купратах обнаружены область плоской зоны, имеющей форму протя-

жённой седловой точки в направлении $(0, \pi/2) \rightarrow (0, \pi)$ зоны Бриллюэна [207, 216–221] (при малом и промежуточном допировании область плоской зоны наблюдается и в направлении $(0, \pi) \rightarrow (\pi/2, \pi)$), большая поверхность Ферми с центром в точке $M = (\pi, \pi)$, и так называемая "теневая зона" (shadow band) [38] (теневая поверхность Ферми, напоминающая основную ферми-поверхность, но смещённую на АФМ-вектор $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$). Кроме того, в области промежуточного допирования наблюдается псевдощелевое поведение вблизи точек $X = \{(\pi, 0), (0, \pi)\}$ с энергией $\sim 0,1$ эВ [212, 222–224].

В работе [39] показано, что многие результаты ARPES в широком интервале допирования могут быть объяснены естественным образом в рамках концепции спинового полярона [32].

Начальная идея этой концепции состоит в том, что элементарное возбуждение в допированном 2D-антиферромагнетике может быть представлено как "голая" частица (электрон или дырка), окружённая некоторой деформацией спиновой диэлектрической подложки [33]. Одевание фермиона в "шубу" из спиновых возбуждений — парамагнонов — происходит вследствие взаимодействия спиновых и зарядовых степеней свободы: обменного взаимодействия фермионов с отдельной спиновой подсистемой, как в модели решётки Кондо и СФМК, либо между спинами фермионов из одной и той же подсистемы, как, например, в t - J -модели. В зависимости от величины спин-фермионного взаимодействия можно выделить два режима формирования спин-поляронной квазичастицы: режим сильной связи и режим слабой связи. Остановимся на этих режимах подробнее.

4.2. Спиновый полярон в режиме слабой связи

Ранние работы по спин-поляронной теории основывались на описанных выше t - J -модели и s - $d(f)$ -обменной модели, а также их модификациях. Главное различие между ними состоит в том, что t - J -модель является однозонной, т.е. одни и те же частицы включают в себе как фермиевские, так и спиновые степени свободы. При этом s - $d(f)$ -обменная модель состоит из двух подсистем: электроны проводимости индуцируют фермиевскую динамику, тогда как локализованные электроны обуславливают магнитные свойства. В обеих моделях основными параметрами являются интеграл перескока t , определяющий ширину зоны W , и обменный интеграл J . Режим слабой связи характеризуется малой величиной обменного взаимодействия по сравнению с кинетической энергией квазичастицы: $J \ll t$. Соответственно в режиме слабой связи обменное взаимодействие рассматривается как возмущение, а поправки к собственной энергии спин-поляронной квазичастицы строятся по степеням J .

Простейший вариант реализации концепции спинового полярона в рассматриваемом режиме слабой связи предложен в работах [26, 160] в рамках модели решётки Кондо с гамильтонианом (7). Подход основывался на представлении Гольштейна–Примакова для спиновых операторов и последующей диагонализации методом преобразований Боголюбова. При этом в качестве основного состояния системы в работах [26, 160] рассматривалось неелевское состояние, а изучение свойств полученного эффективного гамильтониана проводилось с помощью стандартных теоретико-полевых методов.

В недавней в работе [225] похожая идея, связанная с введением магнонных бозе-операторов в рамках модели

решётки Кондо, реализована на основе диаграммного анализа эффективных электрон-электронных взаимодействий через спиновые флуктуации (с максимумом на векторе $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$). Поскольку во втором порядке эти взаимодействия имеют стандартный вид, возникающий при описании связи носителя заряда с возбуждениями бозевского типа, эффективный гамильтониан модели решётки Кондо в работе [225] был записан в виде

$$\hat{H} = \sum_{kx} \xi_k c_{kx}^\dagger c_{kx} + g \sum_{k,q} (b_q^\dagger + b_{-q}) c_{k,x}^\dagger c_{k+q,Q,x} + \Omega \sum_q b_q^\dagger b_q, \quad (45)$$

где ξ_k — фурье-образ интеграла перескока t_{fm} , g — некоторая эффективная константа связи, Ω — резонансная частота спин-волновых возбуждений в окрестности волнового вектора \mathbf{Q} , $b_q^\dagger (b_q)$ — операторы рождения (уничтожения) спин-волновых возбуждений с волновым вектором \mathbf{q} . Далее на основе гамильтониана (45) в приближении усреднённого импульса (momentum average approximation) [226] в работе [225] были проанализированы псевдоцелое поведение, а также переход от полярона большого радиуса к полярону малого радиуса.

Особенность описания спин-поляронных квазичастиц в рамках t - J -модели, как отмечено в разделе 2, связана с тем, что в ней одни и те же фермионы обуславливают как зарядовые, так и спиновые степени свободы. По этой причине обменное взаимодействие в t - J -модели описывает связь непосредственно между носителями заряда (электронами или дырками). Кроме того, важное значение в t - J -модели имеет кинематическое взаимодействие, обусловленное СЭК [62, 85, 92, 227, 228].

Общая идея теоретических подходов, развиваемых для описания спектральных свойств купратов в рамках t - J -модели, основана на представлении операторов Хаббарда $X_m^{\alpha 0} = a_{m\alpha}^\dagger (1 - \hat{n}_{m\bar{\alpha}})$, подчиняющихся сложным коммутационным соотношениям, в виде произведения двух обычных операторов вторичного квантования: фермиевского и бозевского. При этом спиновый индекс принимает на себя только один из этих операторов и именно он описывает спиновые степени свободы. Второй, "бесспиновый", оператор, отвечающий вспомогательным (slave) частицам, описывает зарядовые степени свободы. Если бесспиновым является бозе-оператор, то представление называется слейв-бозонным, а если — ферми-оператор, то — слейв-фермионным.

Слейв-бозонное представление использовалось при исследовании спектральных свойств t - J -модели в работах [229–234], а слейв-фермионное — в работах [63, 235–239].

К классу слейв-фермионных представлений относится также представление, в котором вместо бозевского оператора используется спиновый оператор [240–243]. Спин-фермионное представление в явном виде реализует идею о спин-зарядовом разделении в системах с СЭК. В обзоре [63] подробно описывается метод вспомогательных частиц и обсуждаются некоторые результаты, полученные применением этого метода к t - J -модели.

Формализм вспомогательных частиц, использованный в цитированных выше работах для описания спектральных свойств купратных сверхпроводников со спином магнитоактивного иона $S = 1/2$, может быть обобщён для системы с более сложной структурой гамильтониана. Так, в недавней работе [244] при исследовании

особенностей фотоэмиссионного спектра в Ca_2RuO_4 в рамках спин-поляронного подхода спин-фермионное представление применено для гамильтониана t - J -модели с сильным анизотропным взаимодействием между спинами рутения величиной $S = 1$.

Значительная трудность применения метода вспомогательных частиц связана с необходимостью учёта так называемого констрейнта (от англ. constraint — ограничение) — условия, позволяющего отсеять нефизические состояния, которые неизбежно возникают в данном подходе. Констрейнт используется для ограничения базиса гильбертова пространства состояний на каждом узле решётки. Однако на практике он учитывается лишь в среднем по всему кристаллу, что представляется достаточно грубым приближением.

Следует отметить, что в подавляющем большинстве работ по спин-поляронной тематике, выполненных в рамках метода вспомогательных частиц, в качестве основного состояния выбирается состояние с дальним АФМ-порядком. Это вполне оправданно, в особенности для систем, которые по степени допирования находятся близко к АФМ-области фазовой T - x -диаграммы, где АФМ-флуктуации достаточно сильны. При значительной степени допирования магнитная подсистема пребывает в состоянии квантовой спиновой жидкости, и на фоне именно этого сильно коррелированного состояния следует строить фермиевские спин-поляронные возбуждения.

4.3. Спиновый полярон в режиме сильной связи

Режиму сильной связи отвечает соотношение между обменным интегралом и параметром перескока $J \gg t$. Для систем, описываемых в рамках s - $d(f)$ -обменной модели или модели решётки Кондо, это означает, что локальная обменная связь между носителем тока и локализованным спином должна учитываться точно, а перескоки носителей следует рассматривать как возмущение. Такой подход к формированию локального магнитного полярона хорошо известен в теории магнитных полупроводников [245], хотя сама идея была развита значительно ранее в работе [246].

В приложении к купратным ВТСП концепция спинового полярона, основанная на сильной спин-фермионной связи, развивалась в рамках как модели решётки Кондо [32–36, 41], так и СФМК [39, 40, 42–44, 52, 197]. В указанных работах предполагалось, что описание магнитной подсистемы спиновых моментов ионов меди в CuO_2 -плоскости может быть получено на основе 2D-АФМ-фрустрированной модели Гейзенберга с $S = 1/2$. Из экспериментов по рамановскому [247–251] и нейтронному [252] рассеянию известно, что АФМ-взаимодействие между ближайшими спинами ионов меди в LSCO составляет $I \approx 0,13$ эВ, что значительно превышает величину межплоскостного обмена. Однако уже при сравнительно слабом дырочном допировании дальний АФМ-порядок исчезает во всём диапазоне температур. Такое поведение достаточно хорошо моделируется посредством введения фрустрации [253]. Кластерные расчёты указывают на наличие достаточно большого параметра фрустрации даже для недопированного LSCO [254]. Количественное рассмотрение спиновой подсистемы в работах [39, 197] проводилось в рамках сферически-симметричного самосогласованного подхода [255–257]. Необходимо отметить, что при любой конечной

температуре, а также при достаточной фрустрации в спиновой подсистеме именно сферически-симметричное (SU(2)-инвариантное) состояние является наиболее реалистичным.

В принципе характеристики локального спинового полярона могут быть определены из решения кластерной задачи [34, 35]. После выбора самых низколежащих по энергии состояний малого кластера можно описать движение локального спинового полярона на фоне АФМ-упорядочения.

Однако более эффективный подход к описанию спектральных характеристик спин-поляронных квазичастиц, предложенный в работах [39, 197], основан на проекционной технике Цванцига – Мори [19, 258–262]. Учёт сильных спин-зарядовых корреляций в рамках данного подхода достигается посредством расширения базисного набора фермиевских операторов, в который помимо исходных операторов рождения и уничтожения дырок на $p_{x(y)}$ -орбиталях ионов кислорода (см. (26)) включаются мультипликативные операторы, определяемые как произведение спиновых и фермиевских операторов, относящихся к соседним узлам. Составление уравнений движения для введённого набора базисных операторов с последующим применением проекционной техники позволяет строго учесть ближние спин-фермионные корреляции, поскольку для базисных мультипликативных операторов не используется процедура расщепления. В результате спектр фермиевских возбуждений приобретает зависимость от спин-фермионных корреляций, которые существенно сказываются на концентрационной зависимости ферми-контура.

При нулевой температуре движение локального спинового полярона должно зависеть от наличия или отсутствия дальнего магнитного порядка в спиновой подсистеме. Это означает, что следующим важным шагом в развитии рассматриваемой концепции является учёт взаимодействия локального спинового полярона со спиновыми волнами с квазиимпульсом $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$. Поэтому возникает необходимость введения так называемого сложного спинового полярона [33]. Сложный спиновый полярон представляет собой движущийся на фоне АФМ-упорядочения локальный полярон, окружённый облаком спиновых флуктуаций с квазиимпульсом, близким к \mathbf{Q} [36]. Структура низколежащего спектра сложного спинового полярона определяется расщеплением нижней зоны локального полярона.

В корректности используемого в рамках спин-поляронной концепции проекционного метода для функций Грина можно убедиться посредством сравнения результатов при нулевой температуре [263] со спектральной функцией голой дырки $A_h(\mathbf{k}, \omega)$, получаемой в рамках самосогласованного борновского приближения для локального спинового полярона [31]. Можно увидеть, что получаемый в рамках этого приближения квазичастичный пик и его интенсивность хорошо воспроизводятся нижней зоной сложного полярона в приближении проекционного метода. Что касается верхних зон, соответствующих возбуждённым состояниям, то они эффективно описывают некогерентную часть $A_h(\mathbf{k}, \omega)$.

В завершение этого раздела отметим, что концепция спинового полярона может быть реализована также в рамках диаграммной техники с сильной связью [264], основанной на кумулятивном разложении функций Грина. На основе данного подхода спин-поляронные воз-

буждения исследованы в однозонной модели Хаббарда [265], в $t-t'-t''-U$ -модели [266] и модели Эмери (при $t_{pp} = 0$) [267]. Кроме того, недавно для описания спин-поляронных квазичастиц в рамках СФМК предложен ещё один вариант диаграммной техники [268], названной авторами "пучковой".

5. Спин-поляронные квазичастицы в нормальной фазе купратных высокотемпературных сверхпроводников

Изучение свойств фермиевских состояний, возникающих при дырочном допировании купратов, является одной из основных задач физики ВТСП. Эти свойства определяют особенности нормальной фазы и влияют на механизм высокотемпературной сверхпроводимости.

В разделах 5.1, 5.2 обсуждаются природа формирования спин-поляронных состояний дырочно-допированных купратов и модификация поверхности Ферми ансамбля спин-поляронных квазичастиц при увеличении концентрации дырок. Решение задачи о спиновом поледроне и изучение статистических свойств ансамбля таких квазичастиц проводится в рамках СФМК (26).

5.1. Фермионные состояния в режиме сильной связи

Для обоснования спин-поляронной природы фермиевских квазичастиц, возникающих в CuO_2 -плоскости при слабом допировании, в работе [42] на основе вариационного метода рассматривалось решение уравнения Шрёдингера для одной дырки. При этом учитывалось, что в соответствии с теоремой Мермина – Вагнера [269] в отсутствие допирования 2D-подсистема локализованных спиновых моментов при сколь угодно малой температуре находится в основном состоянии $|G\rangle$ без дальнего магнитного порядка. При обменном взаимодействии АФМ-типа это состояние характеризуется свойствами [270]

$$S_{\text{tot}}^2 |G\rangle = 0 |G\rangle, \quad \langle G | S_f^{x,y,z} | G \rangle = 0, \quad S_{\text{tot}} = \sum_f S_f. \quad (46)$$

Предположение о синглетном характере состояния рассматриваемой 2D-системы при конечной температуре связано с результатом работы [271], в которой математически строго показано, что основное состояние системы сколь угодно большого, но конечного числа локализованных спинов, находящихся в узлах квадратной решётки и взаимодействующих между собой АФМ-образом, является синглетным (теорема Маршалла).

Принимая во внимание симметричные свойства гамильтониана, получаем, что для каждого неприводимого представления группы трансляций k состояние $|\psi_{k\alpha}\rangle$ с одной дыркой с проекцией спина α может быть выражено в виде

$$|\psi_{k\alpha}\rangle = \sum_j z_{jk} A_{jk\alpha}^\dagger |G\rangle, \quad (47)$$

где операторы $A_{jk\alpha}^\dagger$ представляют собой как обычные операторы рождения дырки в подсистеме ионов кислорода, так и комбинации произведений оператора рождения дырки на операторы, относящиеся к локализованной подсистеме (см. ниже).

Из условия стационарности функционала энергии при дополнительном условии $\langle \psi_{k\alpha} | \psi_{k\alpha} \rangle = 1$ с помощью ме-

года Лагранжа в работе [42] показано, что энергии возбуждений $\varepsilon_k = E_k - E_G$ (здесь E_k и E_G — энергии состояний $|\psi_{k\alpha}\rangle$ и $|G\rangle$ соответственно) и коэффициенты \varkappa_{jk} определяются однородной системой линейных уравнений

$$\sum_j [D_{ij}(k) - \varepsilon_k K_{ij}(k)] \varkappa_{jk} = 0, \quad (48)$$

где

$$D_{ij}(k) = \langle G | \{ [A_{ik\alpha}, \hat{H}], A_{jk\alpha}^\dagger \} | G \rangle, \quad (49)$$

$$K_{ij}(k) = \langle G | \{ A_{ik\alpha}, A_{jk\alpha}^\dagger \} | G \rangle. \quad (50)$$

Появляющаяся в CuO_2 -плоскости дырка из-за сильной спин-фермионной связи подвергается значительному воздействию со стороны подсистемы локализованных спинов. Это определяет необходимость корректного описания спин-фермионных корреляций и приводит к расширению набора базисных операторов, позволяющих адекватно описывать спин-поляронные квазичастицы. Численные расчёты [42] показали, что оптимальное с точки зрения достижения наименьшей энергии при минимальном наборе базисных операторов описание состояний однодырочного сектора может быть достигнуто, если ограничиться тремя операторами:

$$\begin{aligned} A_{1k\alpha} &\equiv a_{k\alpha}, & A_{2k\alpha} &\equiv b_{k\alpha}, \\ A_{3k\alpha} &\equiv L_{k\alpha} = \frac{1}{N} \sum_{j\beta} \exp [if(q-k)] \mathbf{S}_f \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} u_{q\beta}. \end{aligned} \quad (51)$$

Как показано ниже, главную роль в базисе (51) играет третий оператор, который "завязывает" спиновую и фермиевскую подсистемы.

Операторы (51) для каждого k и α определяют три состояния: $A_{jk\alpha}^\dagger |G\rangle$ ($j = 1, 2, 3$). Ортогональность этих состояний легко установить, учитывая условия (46): $\langle G | A_{ik\alpha} A_{jq\alpha}^\dagger | G \rangle = \delta_{ij} \delta_{kq} \delta_{\alpha\alpha'} K_{ij}(k)$.

Вычислив матричные элементы (49) и (50), определим через их отношение следующие функции ($K_{ij} = \delta_{ij} K_{ii}$):

$$\begin{aligned} \xi_{x(y)} &= \frac{D_{11}(k)}{K_{11}(k)} = \frac{D_{22}(k)}{K_{22}(k)} = \xi_{k_{x(y)}}, \\ t_k &= D_{12}(k) = D_{21}(k) = (2\tau - 4t) \sin \frac{k_x}{2} \sin \frac{k_y}{2}, \\ J_{x(y)} &= \frac{D_{1(2),3}(k)}{K_{33}(k)} = J \sin \frac{k_{x(y)}}{2}, \\ \xi_L(k) &= \frac{D_{33}(k)}{K_{33}(k)} = \tilde{\varepsilon}_p - \mu - 2t + \frac{5\tau}{2} - J + \\ &+ \left[(\tau - 2t)(-C_1 \gamma_{1k} + C_2 \gamma_{2k}) + \frac{\tau(-C_1 \gamma_{1k} + C_3 \gamma_{3k})}{2} + \right. \\ &+ \left. \frac{JC_1(1 + 4\gamma_{1k}) - IC_1(\gamma_{1k} + 4)}{4} \right] K_k^{-1}, \quad (52) \\ K_{11}(k) &= K_{22}(k) = 1, \quad K_k = K_{33}(k) = \frac{3}{4} - C_1 \gamma_{1k}, \end{aligned}$$

где γ_{jk} — инварианты квадратной решётки, $\gamma_{1k} = (\cos k_x + \cos k_y)/2$, $\gamma_{2k} = \cos k_x \cos k_y$, $\gamma_{3k} = (\cos 2k_x + \cos 2k_y)/2$.

При вычислении матричных элементов (49) и (50) принималось во внимание, что подсистема локализо-

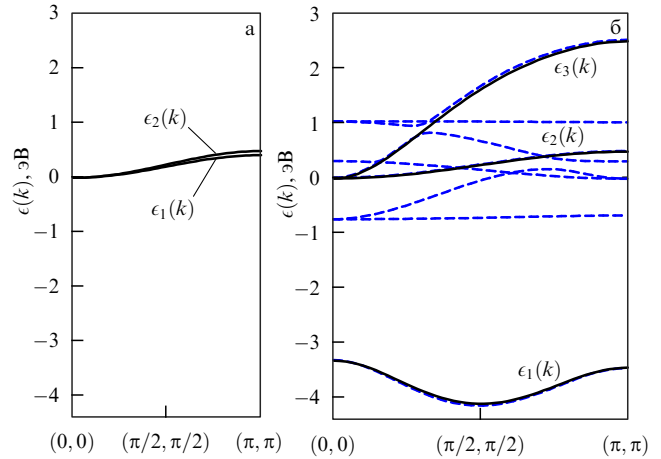


Рис. 5. Зависимости энергий однодырочных состояний от квазиимпульса вдоль главной диагонали зоны Бриллюэна для набора параметров $\tau = 0,11$, $J = 2,86$, $t = 0,1$, $I = 0,02$ (все в [эВ]) и значений спиновых корреляторов $C_1 = -0,255$, $C_2 = 0,075$, $C_3 = 0,064$. (а) Энергетический спектр $\varepsilon_j(k)$, полученный при учёте двух операторов: $a_{k\alpha}$ и $b_{k\alpha}$. (б) Энергии однодырочных состояний $\varepsilon_k(k)$, рассчитанные в базисе трёх операторов (51) (сплошные кривые) и в базисе восьми операторов (54) (штриховые кривые). Нижние ветви спектра, совпадающие для обоих базисов, (51) и (54), соответствуют спин-поляронным состояниям [42].

ванных спинов на ионах меди находится в состоянии квантовой спиновой жидкости, которое обладает сферической симметрией в спиновом пространстве [255–257]. В этом случае возникающие в (52) спиновые корреляционные функции $C_j = \langle S_0 S_{r_j} \rangle$ удовлетворяют соотношениям

$$C_j = 3 \langle S_0^x S_{r_j}^x \rangle = 3 \langle S_0^y S_{r_j}^y \rangle = 3 \langle S_0^z S_{r_j}^z \rangle, \quad (53)$$

где r_j — координата иона меди в координационной сфере с номером j . При этом $\langle S_j^x \rangle = \langle S_j^y \rangle = \langle S_j^z \rangle = 0$. Зависимости корреляторов C_j от уровня допирования находились совместно в рамках сферически-симметричного самосогласованного подхода для фрустрированного антиферромагнетика [270]. Выбор значений корреляторов C_j подробнее обсуждается в разделе 5.2.

Представленные на рис. 5 и 6 результаты расчётов демонстрируют важность учёта сильной спин-зарядовой связи, а также спин-поляронный характер нижней ветви спектра однодырочных состояний. На рисунке 5а показана квазиимпульсная зависимость (вдоль главной диагонали зоны Бриллюэна) энергетического спектра однодырочных состояний, возникающего при использовании только двух операторов, $a_{k\alpha}$ и $b_{k\alpha}$. Фактически эти ветви описывают спектр дырок, не взаимодействующих с подсистемой спиновых моментов ионов меди.

Добавление в вариационную процедуру третьего оператора, $L_{k\alpha}$, приводит к важным качественным изменениям, главное из которых связано с появлением отщеплённой ветви с минимумом в точке, близкой к $(\pi/2, \pi/2)$. Это видно из полученного в базисе трёх операторов спектра однодырочных состояний, показанного на рис. 5б сплошными кривыми. Понижение энергии таких однодырочных состояний обусловлено слагаемым гамильтониана $\sim J$, описывающим как обменное взаимодействие между дыркой и ближайшими ионами меди, так и спин-

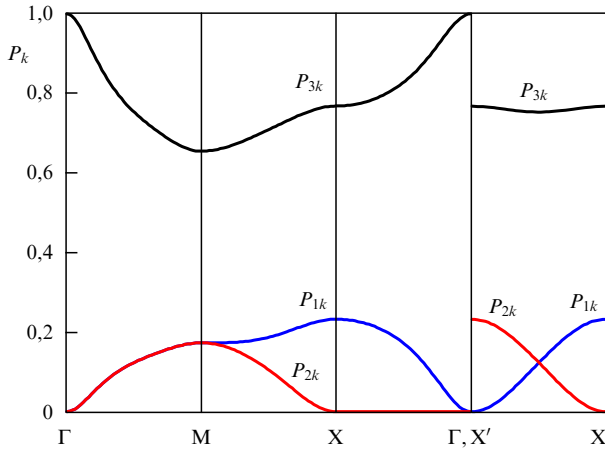


Рис. 6. Парциальные вклады базисных состояний в однодырочное состояние, соответствующее нижней ветви спектра на рис. 5б. Значения параметров модели такие же, как и на рис. 5. Здесь точки зоны Бриллюэна $\Gamma = (0, 0)$, $M = (\pi, \pi)$, $X = (0, \pi)$, $X' = (\pi, 0)$ [42].

коррелированные перескоки. Включение в базис операторов, явно учитывающих эту сильную спин-фермионную корреляцию, и обеспечивает значительный выигрыш в энергии. При этом также происходит перенормировка двух затравочных ветвей спектра.

Физическая причина появления спин-поляронных состояний аналогична возникновению состояний спинового полярона в точно решаемой задаче об одном электроны с перевёрнутым спином в ферромагнитной матрице при АФМ-типе $s-d$ -обменной связи между спином электрона и локализованным спиновым моментом [272].

При изменении квазиимпульса в других направлениях зоны Бриллюэна отмеченные качественные модификации спектра однодырочных состояний сохраняются. Важно отметить, что эффект отщепления нижней спин-поляронной зоны сохраняется при увеличении числа базисных операторов. Для демонстрации этого факта на рис. 5б приведены результаты вариационного вычисления фермиевского спектра в рамках базиса, состоящего из восьми операторов:

$$\tilde{A}_{jk} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_f \exp(-ikf) \tilde{A}_{jf}, \quad j = 1, \dots, 8, \quad (54)$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{A}_{1(2)f} &= c_{f+g_{x(y)}/2}, & \tilde{A}_{3(4)f} &= \tilde{S}_f c_{f+g_{x(y)}/2}, \\ \tilde{A}_{5(6)f} &= \tilde{S}_f c_{f-g_{x(y)}/2}, & \tilde{A}_{7(8)f} &= \mathbf{S}_f \mathbf{S}_{f+g_{x(y)}} c_{f+g_{x(y)}/2}. \end{aligned}$$

Первые два оператора этого базиса совпадают с соответствующими операторами базиса (51). Каждый из четырёх операторов \tilde{A}_{jk} с $j = 3, \dots, 6$ описывает корреляцию локализованного спина с дыркой, локализованной на одном из четырёх ближайших к этому спину ионов кислорода. Последние два оператора, \tilde{A}_{7k} и \tilde{A}_{8k} , описывают корреляцию дырки на ионе кислорода сразу с двумя спинами на ближайших к ней ионах меди. Результаты вычисления восьми ветвей фермиевского спектра представлены на рис. 5б штриховыми кривыми. Существенно, что дисперсионная зависимость нижней ветви спин-поляронного спектра практически не изменяется. Таким образом, базис из трёх операторов (51) является

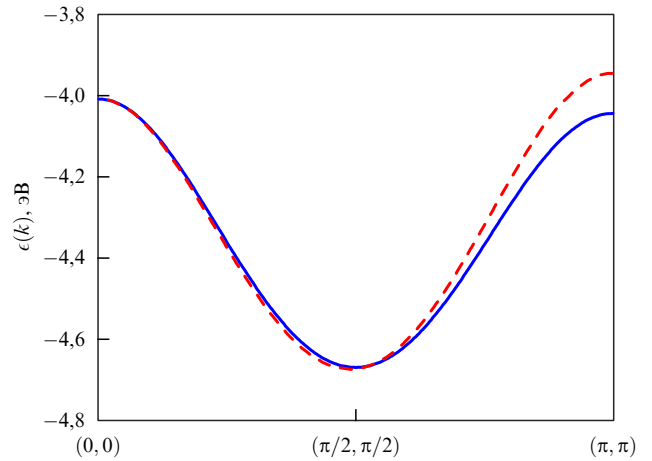


Рис. 7. Зависимости энергий спинового полярона от квазиимпульса ϵ_{1k} и $\epsilon_{sp}(k)$ вдоль главной диагонали зоны Бриллюэна, полученные в результате точного решения дисперсионного уравнения (55) (сплошная кривая) и в результате расчёта по формуле (56) (штриховая кривая). Значения параметров те же, что и на рис. 5.

достаточным для описания низкоэнергетической части спектра фермиевских квазичастиц с высокой точностью. Этот спектр определяется решениями дисперсионного уравнения

$$\det_k(\omega) = (\omega - \xi_x)(\omega - \xi_y)(\omega - \xi_L) - 2J_x J_y t_k K_k - (\omega - \xi_y) J_x^2 K_k - (\omega - \xi_x) J_y^2 K_k - (\omega - \xi_L) t_k^2 = 0. \quad (55)$$

Нижняя ветвь ϵ_{1k} значительно отделена от двух верхних зон, ϵ_{2k} и ϵ_{3k} , поэтому при малых уровнях допирования x динамика дырок на ионах кислорода определяется исключительно зоной ϵ_{1k} .

Для характерных значений энергетических параметров СФМК можно получить приближённое аналитическое выражение для спектра спин-поляронной квазичастицы:

$$\epsilon_{sp}(k) = \frac{\tau_k + A_k/K_k}{2} - \sqrt{\frac{(\tau_k - A_k/K_k)^2}{4} + 16J^2 K_k v_k^2}, \quad (56)$$

в котором энергетические и ренормировочные функции квазиимпульса задаются выражениями (34) и (36), а также

$$\begin{aligned} A_k &= J(-3 + C_1 + 8C_1\gamma_{1k}) + \tau W_k - IC_1(4 + \gamma_{1k}) + \\ &+ t \left(-\frac{3}{2} + 4C_1\gamma_{1k} - 2C_2\gamma_{2k} \right), \\ W_k &= \frac{15}{8} - 4C_1\gamma_{1k} + C_2\gamma_{2k} + \frac{1}{2} C_3\gamma_{3k}. \end{aligned} \quad (57)$$

На рисунке 7 показаны квазиимпульсные зависимости спин-поляронного спектра ϵ_{1k} , найденного из дисперсионного уравнения (55), и $\epsilon_{sp}(k)$, определяемого выражением (56). Видно, что с хорошей точностью зависимости совпадают.

Весовые вклады P_{1k} и P_{2k} затравочных дырочных состояний $a_{k\alpha}^\dagger |G\rangle$ и $b_{k\alpha}^\dagger |G\rangle$ определяются выражениями $P_{1k} = |\varkappa_{1k}|^2$, $P_{2k} = |\varkappa_{2k}|^2$. Для весового вклада P_{3k} спин-поляронного базисного состояния получаем $P_{3k} = K_k |\varkappa_{3k}|^2$. На рисунке 6 показаны результаты расчётов

[42] для значений введённых парциальных вкладов для квазиимпульсов, лежащих на четырёх направлениях зоны Бриллюэна. Видно, что значения P_{3k} в несколько раз превышают значения P_{1k} и P_{2k} . Это доказывает спин-поляронную природу однодырочного состояния, соответствующего нижней отщеплённой ветви энергетического спектра.

5.2. Модификация поверхности Ферми в LSCO при дырочном допировании

В работе [40] на основе СФМК продемонстрирована эффективность спин-поляронного подхода на примере описания ARPES-результатов и модификации поверхности Ферми при допировании в LSCO [210]. В частности, авторами [40] исследована область концентраций от $x = 0,03$, при котором LSCO является недодопированным диэлектриком, до $x = 0,3$, при котором LSCO переходит в состояние нормального металла. Показано [40], что спин-поляронная концепция позволяет воспроизвести тонкие особенности эволюции ферми-поверхности LSCO в нодальном направлении при изменении уровня допирования x . Определяющую роль при этом сыграли спин-коррелированные перескоки носителей и изменение с допированием обратной магнитной корреляционной длины.

Известно, что подгонка моделей сильной связи к экспериментальным данным требует большого числа подгоночных параметров. Например, авторам работы [210] для достижения удовлетворительного согласия между ферми-поверхностью, рассчитанной в приближении среднего поля, и ферми-поверхностью, восстановленной из экспериментальных данных, потребовалось для каждой концентрации дырок подбирать свой набор из четырёх параметров: трёх интегралов перескока, t_1, t_2, t_3 , и величины сдвига энергии ε_0 . В работах [40, 197] показано, что в СФМК в рамках концепции спинового полярона модификация энергетического спектра и поверхности Ферми обуславливается лишь сильной корреляцией между подсистемой локализованных спиновых ионов меди, находящихся в состоянии квантовой спиновой жидкости, и подсистемой кислородных дырок, а также изменением корреляционных характеристик этой жидкости при допировании. В частности, в работе [40] использовался всего один подгоночный параметр — интеграл перескока дырок t , который подбирался на основе сравнения с экспериментальными данными [210] по LSCO.

В работе [42] построение спектра фермиевской квазичастицы с учётом сильной связи между подсистемой локализованных спинов ионов меди и спином кислородной дырки проведено на основе вариационного метода. При этом фактически рассматривалась только одна дырка. В случае конечного числа дырок спектр фермиевских возбуждений удобно вычислять с помощью проекционной техники Цванцига–Мори [19, 258–262], которая в сочетании с формализмом запаздывающих функций Грина даёт возможность рассчитывать необходимые термодинамические средние и, как показано в разделе 6, позволяет описывать сверхпроводящее спаривание в ансамбле спиновых поляронов.

В рамках проекционной техники выбирается минимальный базис операторов A_{jf} ($j = 1, \dots, n$), который, как предполагается, достаточен для адекватного описания квазичастичного возбуждения в системе. Далее вво-

дятся двухвременные запаздывающие функции Грина

$$G_{ij}(k, t) = \langle\langle A_{ik}(t) | A_{jk}^\dagger(0) \rangle\rangle = -i\theta(t) \langle\langle A_{ik}(t), A_{jk}^\dagger(0) \rangle\rangle, \quad (58)$$

$$i, j = 1, \dots, n,$$

где оператор A_{jk} — фурье-образ оператора A_{jff} . Уравнения движения для фурье-образов введённых функций Грина имеют вид

$$\omega \langle\langle A_{ik} | A_{jk}^\dagger \rangle\rangle_\omega = K_{ij}(k) + \langle\langle \Phi_{ik} | A_{jk}^\dagger \rangle\rangle_\omega, \quad (59)$$

где $\Phi_{ik} = [A_{ik}, \hat{H}]$, $K_{ij}(k) = \langle\langle \{A_{ik}, A_{jk}^\dagger\} \rangle\rangle$. Далее каждое слагаемое правых частей уравнений (59) должно быть спроецировано на подпространство, представляющее собой линейную оболочку, образованную набором базисных операторов. Другими словами, процесс разложения оператора Φ_{ik} сводится к вычислению проекционной составляющей по следующему алгоритму:

$$\Phi_{ik} \rightarrow \sum_l \frac{\langle\langle \Phi_{ik}, A_{lk}^\dagger \rangle\rangle}{\langle\langle \{A_{ik}, A_{lk}^\dagger\} \rangle\rangle} A_{lk}. \quad (60)$$

Как показано в разделе 5.1, для корректного учёта сильной спин-зарядовой связи в системе принципиальным является введение в базисный набор операторов наряду с $a_{k\alpha}$ и $b_{k\alpha}$ оператора $L_{k\alpha}$. После введения фурье-образов функций Грина G_{ij} ($j = 1, 2, 3$):

$$G_{11} = \langle\langle a_{k\uparrow} | a_{k\uparrow}^\dagger \rangle\rangle_\omega, \quad G_{21} = \langle\langle b_{k\uparrow} | a_{k\uparrow}^\dagger \rangle\rangle_\omega, \quad G_{31} = \langle\langle L_{k\uparrow} | a_{k\uparrow}^\dagger \rangle\rangle_\omega, \quad (61)$$

замкнутая система уравнений, полученная в рамках проекционной техники, может быть записана в виде

$$\begin{aligned} (\omega - \xi_x)G_{1j} &= \delta_{1j} + t_k G_{2j} + J_x G_{3j}, \\ (\omega - \xi_y)G_{2j} &= \delta_{2j} + t_k G_{1j} + J_y G_{3j}, \\ (\omega - \xi_L)G_{3j} &= \delta_{3j} K_k + (J_x G_{1j} + J_y G_{2j}) K_k. \end{aligned} \quad (62)$$

Функции Грина G_{i2} и G_{i3} ($i = 1, 2, 3$) определяются аналогичным образом с тем отличием, что на месте $a_{k\uparrow}^\dagger$ стоят операторы $b_{k\uparrow}^\dagger$ и $L_{k\uparrow}^\dagger$ соответственно.

При записи системы уравнений (62) используются функции (52). Заметим, что в выражениях (59) и (60) угловые скобки означают термодинамическое усреднение по ансамблю Гиббса, тогда как в определениях (49) и (50) аналогичных матриц усреднение производится по основному состоянию системы $|G\rangle$. Тем не менее оказывается, что в режиме малой плотности результаты расчётов обоими способами совпадают и даются выражениями (52).

Энергетический спектр квазичастиц, который определяется полюсами функции Грина

$$G_{ij}(k, \omega) = \sum_{n=1}^3 \frac{z_{(i,j)}^n(k)}{\omega - \epsilon_{nk}}, \quad i, j = 1, 2, 3, \quad (63)$$

где $z_{(i,j)}^n(k)$ — вычеты функции Грина, и может быть вычислен из дисперсионного уравнения (55), представлен на рис. 8. Как отмечалось в разделе 5.1, для купратных ВТСП актуальной является только нижняя поляронная зона с дисперсией ϵ_{1k} , поскольку химический потенциал μ лежит в этой зоне, а две другие зоны, с ϵ_{2k} и ϵ_{3k} , отделены от ϵ_{1k} значительной энергетической щелью.

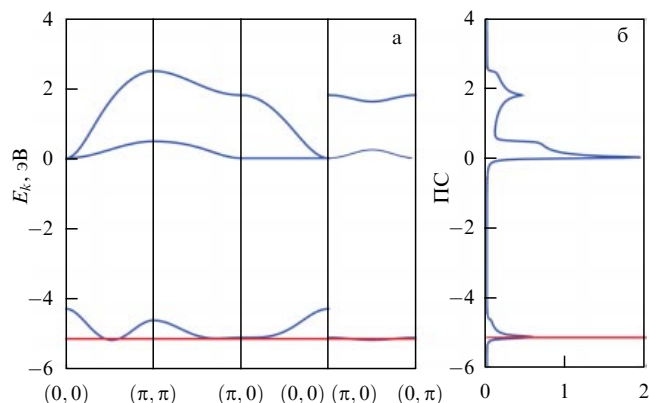


Рис. 8. (В цвете онлайн.) Энергетическая структура (а) и плотность состояний (ПС) (б) спин-фермионной модели в нормальной фазе, рассчитанные для набора параметров $t_{pd} = 1,3$, $A_{pd} = 3,6$, $U_d = 10,5$, $V_{pd} = 1,2$, $U_p = V_1 = V_2 = 0$, $t = 0,12$ (все параметры в [эВ]) и уровня допирования $x = 0,12$. Нижняя ветвь ϵ_{1k} соответствует спин-поляронным возбуждениям. Красная линия показывает положение химического потенциала μ .

Таблица. Значения уровня допирования x и соответствующие им значения параметра фрустрации p и спиновых корреляционных функций [40, 270]

x	p	C_1	C_2	C_3
0,03	0,15	-0,287	0,124	0,0950
0,07	0,21	-0,255	0,075	0,0640
0,15	0,25	-0,231	0,036	0,0510
0,22	0,275	-0,214	0,009	0,0450
0,30	0,30	-0,194	-0,0222	0,0457

Исследование модификации плотности фермиевских состояний [273], вызываемой изменением величины интеграла перескока дырок на ионах кислорода, показало, что уменьшение t приводит к сдвигу особенности ван Хова спин-поляронной зоны, представленной на рис. 8. Это, в частности, вызывает смещение максимума концентрационной зависимости сверхпроводящей критической температуры в сторону меньших дырочных плотностей (см. раздел 6).

Существенный момент используемого подхода заключается в том, что корреляционные функции C_1 , C_2 и C_3 , входящие в функции (52), а также щель $\Delta_Q(p)$ в спектре магнитных возбуждений в окрестности точки $Q = (\pi, \pi)$ зоны Бриллюэна находятся совместно в рамках сферически-симметричного самосогласованного подхода для фрустрированного антиферромагнетика [255–257, 270]. При этом Δ_Q линейно связана с обратной магнитной корреляционной длиной ξ^{-1} . С другой стороны, согласно данным по нейтронному рассеянию и ядерному магнитному резонансу (см., например, [274, 275]), величина ξ^{-1} определяется уровнем допирования x и для LSCO возрастает в несколько раз с увеличением x в интервале $x = 0,03–0,3$. В соответствии с этим принятые нами значения фрустраций (см. таблицу) отвечают случаю, в котором спиновая щель увеличивается в 2,5 раза при возрастании параметра фрустрации от $p = 0,15$ до $p = 0,3$. В таблице также представлены рассчитанные согласно упомянутой методике спиновые корреляторы для пяти значений параметра p , которые соотносятся с пятью значениями уровня допирования x .

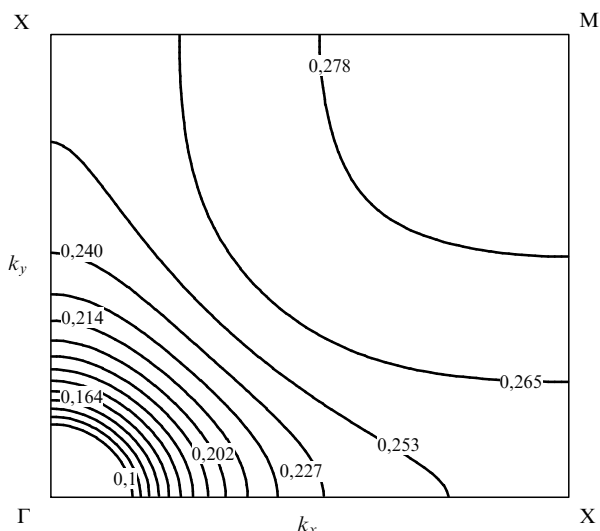


Рис. 9. Линии постоянных значений спектральной плотности голы дырки $n_{h, \sigma}(k)$ для нижней поляронной зоны в первой четверти квазимпульсного пространства при уровне допирования $x = 0,15$. Числами указаны значения $n_{h, \sigma}(k)$ [40].

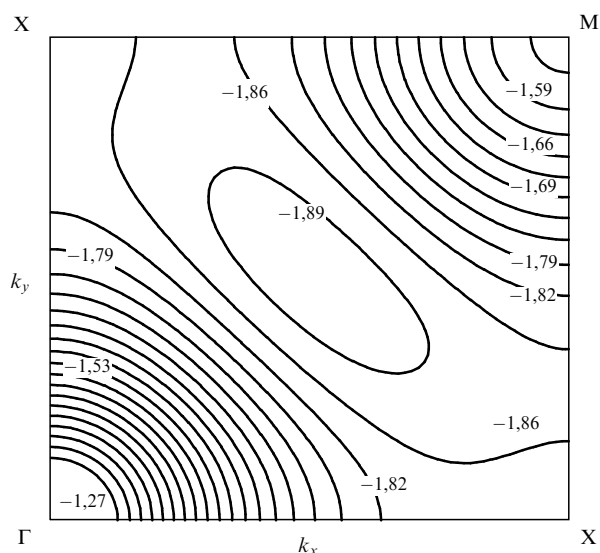


Рис. 10. Линии постоянных значений энергии в нижней поляронной зоне $\epsilon_1(k) = \text{const}$ в первой четверти k -пространства при уровне допирования $x = 0,15$. Числами указаны значения $\epsilon_1(k)$ в [эВ] [40].

Для LSCO энергию Ферми можно определить из условия равенства числа голых дырок n_h уровню допирования x . Число n_h при интересующих нас малых значениях x равно проинтегрированной по зоне Бриллюэна и просуммированной по спину α спектральной плотности: $n_{h, \alpha}(k) = z_{(1,1)}^1(k) + z_{(2,2)}^1(k)$.

На рисунке 9 представлено распределение значений спектральной плотности по зоне Бриллюэна. В точке $\Gamma = (0, 0)$ величина $n_{h, \alpha}(k) = 0$, но при отходе от этой точки спектральный вес быстро возрастает и при приближении к антинодальной $X-X$ -линии выходит на насыщение.

Для демонстрации формирования области плоской зоны в окрестности X -точек k -пространства на рис. 10 приводится нижняя спин-поляронная зона с помощью линий уровня $\epsilon_{1k} = \text{const}$, рассчитанных при $x = 0,15$.

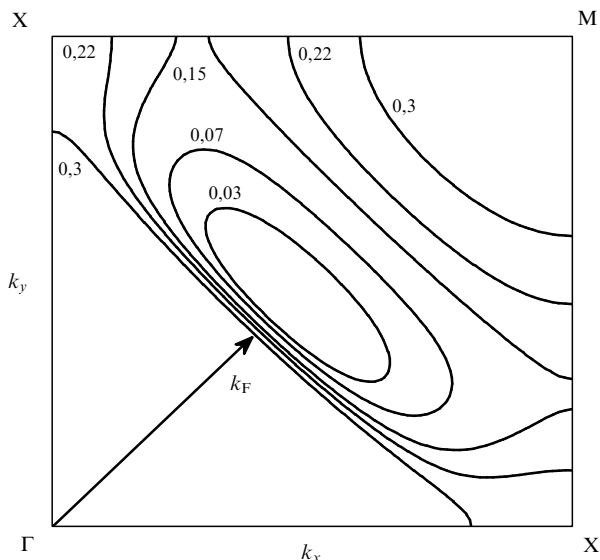


Рис. 11. Поверхности Ферми в первом квадранте зоны Бриллюэна для пяти значений уровней допирования x , указанных рядом с соответствующими ферми-контурами [40].

Факт существования плоской зоны в этой области установлен во многих работах [207, 216–221], в частности в работе [210] при $x \leq 0,15$. Результаты расчётов, приведённые на рис. 10, позволяют оценить эффективную массу спин-поляронных квазичастиц, которая, как видно из рисунка, сильно анизотропна. Так, в нодальном направлении (Γ – M) вычисления приводят к значению массы $m_{\Gamma-M} = 1,25m_e$, где m_e — масса свободного электрона. В антинодальном (X – X)-направлении эффективная масса $m_{X-X} = 9,4m_e$.

Представленные на рис. 9 и 10 контуры $n_{h,\sigma}(k) = \text{const}$ и $\epsilon_{1k} = \text{const}$ рассчитывались при значении параметра прямых кислород-кислородных перескоков $t = 0,094$ эВ. Этот единственный подгоночный параметр подбирался из требования согласования топологии поверхности Ферми с ARPES-данными [210]. Важно отметить, что одно и то же значение t использовалось для описания поверхности Ферми при всех пяти уровнях допирования x , приведённых в таблице. Ферми-поверхности, рассчитанные совместно со спиновыми корреляторами для указанных пяти значений x , представлены на рис. 11. Видно, что при уровне допирования $x \approx 0,16$ происходит смена электронного типа топологии поверхности Ферми дырочным, что согласуется с экспериментальными данными [210]. Для характеристики поверхности Ферми авторы [210] ввели импульс Ферми k_F , равный расстоянию от точки $\Gamma = (0, 0)$ зоны Бриллюэна до точки пересечения ферми-поверхности с нодальной линией, определили зависимость k_F от уровня допирования и продемонстрировали трансформацию электронной топологии поверхности Ферми в дырочную при переходе через критическое значение уровня допирования.

Сравнение концентрационных зависимостей k_F , теоретически рассчитанных и измеренных в работе [210], приведено на рис. 12. Видно, что слабая экспериментальная зависимость $k_F(x)$ хорошо воспроизводится в рамках спин-поляронного подхода: максимальное расхождение между экспериментальными и теоретическими значениями k_F не превышает 4 %.

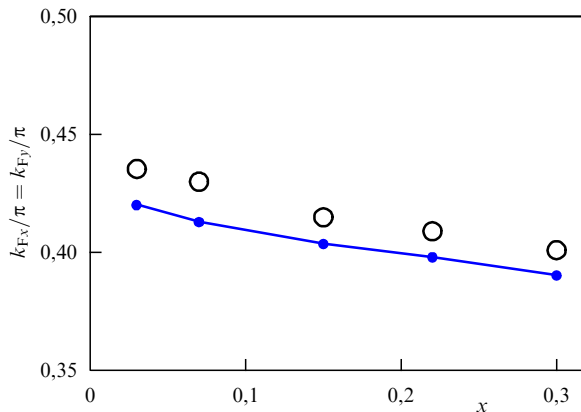


Рис. 12. Зависимость импульса Ферми k_F от уровня допирования x . Сплошная линия соединяет рассчитанные в рамках спин-поляронного подхода значения k_F . Светлыми кружками обозначены представленные в [210] экспериментальные значения k_F [40].

6. Сверхпроводящая фаза спин-поляронных квазичастиц

6.1. Куперовская неустойчивость спиновых поляронов

Успехи применения концепции спинового полярона при описании свойств нормального состояния купратов сделали актуальным вопрос о реализации сверхпроводящей фазы в условиях, когда куперовская неустойчивость развивается не для затравочных фермионов, а в подсистеме спиновых поляронов [276]. В работе [41] показано, что ансамбль спин-поляронных квазичастиц, возникающий в простейшей модели купратных сверхпроводников — 2D-решётке Кондо в режиме СЭК, обладает куперовской неустойчивостью с $d_{x^2-y^2}$ -типом симметрии параметра порядка. В роли константы куперовского спаривания выступал интеграл обменного взаимодействия между локализованными спинами. Показано, что трёхцентровые взаимодействия в спин-поляронном ансамбле, находящемся в спин-жидкостной фазе подсистемы локализованных спинов, в отличие от взаимодействий в $t-J^*$ -модели [140, 141], способствуют куперовскому спариванию и обеспечивают реализацию сверхпроводящей фазы с высокими критическими температурами.

Позднее в работе [42] теория сверхпроводимости ансамбля спиновых поляронов была развита в СФМК, что явилось важным этапом развития концепции спинового полярона. Для анализа сверхпроводящей фазы к базисному набору трёх операторов (51) было добавлено ещё три оператора ($\bar{\alpha} = -\alpha$):

$$a_{-k\bar{\alpha}}^\dagger, b_{-k\bar{\alpha}}^\dagger, L_{-k\bar{\alpha}}^\dagger. \tag{64}$$

Учёт этих трёх операторов позволил ввести аномальные термодинамические средние. Было продемонстрировано, что сильная спин-фермионная связь, возникающая в результате гибридационного смешивания состояний ионов меди и кислорода в исходной модели Эмери, не только оказывает влияние на формирование спин-поляронных квазичастиц, но и обеспечивает эффективное притяжение между ними через обменное взаимодействие. Это индуцирует куперовскую неустойчивость с d -волновым спариванием в системе спиновых поляро-

нов. В рамках такого подхода была построена фазовая $T-x$ -диаграмма [42], хорошо коррелирующая с экспериментальными данными по купратным сверхпроводникам (см. в разделе 6.2 на рис. 15 кривую 1).

Необходимо отметить, что в работе [42] теория сверхпроводимости строилась без учёта влияния межузельных кулоновских взаимодействий фермионов. Проблема учёта этих взаимодействий, имеющая первостепенное значение для реалистичного описания сверхпроводящего спаривания в купратных сверхпроводниках, рассмотрена в рамках спин-поляронной концепции в разделе 6.2.

6.2. Проблема межузельного кулоновского взаимодействия

Наряду с необходимостью корректного описания сильной спин-зарядовой связи в купратах обозначилась ещё более важная задача, связанная с учётом межузельного кулоновского отталкивания дырок на кислороде. Дело в том, что куперовская неустойчивость, рассматриваемая в модели Хаббарда [85], t - J -модели [19, 63, 186] или t - J^* -модели [139–141], испытывает сильное подавление, как только принимается во внимание кулоновское отталкивание между частицами, находящимися на ближайших узлах квадратной решётки.

Для сверхпроводящей фазы с s -типом симметрии параметра порядка, индуцированной сравнительно сильным кинематическим механизмом Зайцева [85, 90–92], куперовское спаривание сохраняется и при включении достаточно больших V , как показано на рис. 13. Уравнение самосогласования, определяющее температуру сверхпроводящего перехода в этом случае, имеет вид

$$1 + V \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} (\cos q_x + \cos q_y)^2 \Phi_{\mathbf{q}} = 4t_1 \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} (\cos q_x + \cos q_y) \Phi_{\mathbf{q}}. \quad (65)$$

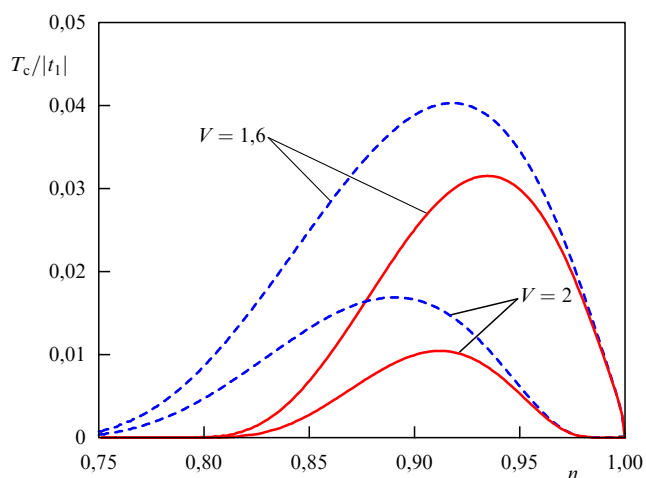


Рис. 13. (В цвете онлайн.) Зависимости температуры перехода в сверхпроводящую s -фазу от концентрации электронов n в t - V -модели, полученные для двух значений V при учёте (красные сплошные кривые) и без учёта (синие штриховые кривые) эффекта индуцирования зоны флуктуационных состояний [277], обусловленного влиянием сильных межузельных кулоновских корреляций [278].

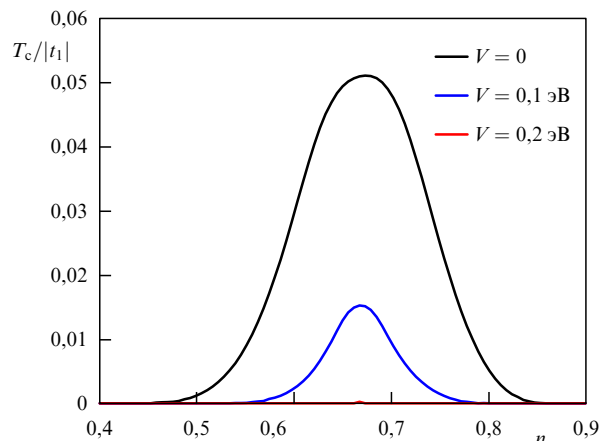


Рис. 14. (В цвете онлайн.) Зависимости температуры перехода в сверхпроводящую фазу от концентрации электронов в t - J -модели при $J = 2|t_1|/U = 0,24$, полученные для трёх значений V .

где $\Phi_{\mathbf{q}} = [1/(2E_{\mathbf{q}})] \tanh [E_{\mathbf{q}}/(2T_c)]$. Однако сверхпроводящее s -спаривание не наблюдается в купратах экспериментально.

Для сверхпроводящей фазы с d -типом симметрии параметра порядка, которая реализуется в купратах в действительности [279–282], при учёте межузельного отталкивания фермионов ситуация более драматична. В силу того что параметр кулоновского отталкивания V аддитивно входит в константу связи в уравнении для T_c

$$1 = \frac{J - V}{N} \sum_{\mathbf{q}} (\cos q_x - \cos q_y)^2 \Phi_{\mathbf{q}}, \quad (66)$$

для полного подавления сверхпроводимости, как видно из рис. 14, достаточно включения сравнительно слабых V . В результате для компенсации сильного отталкивательного вклада, обусловленного межузельным взаимодействием дырок, приходилось дополнительно учитывать вклады, связанные с электрон-фононными, спин-флуктуационными и зарядово-флуктуационными процессами [228, 283–285]. Заметим, что в указанных работах выбиралась величина кулоновского взаимодействия между дырками в разных ячейках $V = 0,2$ эВ, что значительно меньше величины спин-флуктуационного спаривания за счёт кинематического взаимодействия $g_{sf} = 1,5$ эВ, и лишь поэтому сверхпроводящая d -фаза сохранялась.

Таким образом, необходимая для объяснения эксперимента сверхпроводящая d -фаза значительно подавлялась кулоновским отталкиванием дырок, находящихся на ближайших узлах. Необходимо отметить, что используемая иногда аргументация, связанная с экранированием кулоновского взаимодействия, в данном случае представлялась малоубедительной, поскольку речь шла об отталкивании дырок, находящихся на ближайших расстояниях [286]. Слабая эффективность экранирования в ВТСП отмечалась также в работе [105] и связывалась с низкой концентрацией дырок на ионах кислорода.

Проблема нейтрализации кулоновского отталкивания дырок на кислороде потребовала пересмотра теорий куперовской неустойчивости в ВТСП. В связи с этим уместно отметить, что аналогичная проблема в своё время существовала и в теории классических сверхпроводников. Её решение стало возможным после того, как

было показано [287, 288], что электрон-фононное взаимодействие в некоторой области импульсного пространства инициирует эффективное притяжение между фермионами, которое может компенсировать затравочное отталкивание.

Важным результатом, полученным при развитии теории сверхпроводимости в рамках спин-поляронной концепции [42], явилось как раз решение проблемы межузельного кулоновского взаимодействия V_1 дырок на ближайших ионах кислорода. В работе [42] показано, что в купратных ВТСП нейтрализация негативного влияния межузельного кулоновского взаимодействия дырок на куперовскую неустойчивость в d -канале происходит в результате влияния двух факторов. Первый из них связан с рассмотрением реальной кристаллографической структуры CuO_2 -плоскости, для которой фурье-образ межузельного взаимодействия имеет вид $V_q = 4V_1 \cos(q_x/2) \cos(q_y/2)$ и отвечает симметрии подрешётки кислорода [186]. Второй фактор обусловлен сильной связью между локализованными спинами ионов меди и дырками на ионах кислорода. Как отмечалось в разделе 6.1, данный фактор приводит к развитию куперовской неустойчивости в ансамбле спин-поляронных квазичастиц [42]. При этом кулоновское отталкивание между голыми дырками с фурье-образом V_q перенормируется во взаимодействии между спин-поляронными квазичастицами таким образом, что импульсная зависимость этого эффективного взаимодействия становится соответствующей структуре подрешётки ионов меди, а не кислорода. В результате возникает ситуация, в которой эффективное отталкивание между спиновыми поляронами выпадает из ядра интегрального уравнения для сверхпроводящего параметра порядка с $d_{x^2-y^2}$ -типом симметрии.

В работе [43], а также в её развитии [289] при вычислении энергетической структуры и анализе условий развития куперовской неустойчивости в СФМК использовались хорошо установленные значения параметров (5) модели Эмери [107, 110]. При использовании этого набора для величины обменной связи между локализованными спинами меди и спинами дырок на ионах кислорода достигалось соотношение $J = 3,38 \text{ эВ} \gg \tau \approx 0,10 \text{ эВ}$. Для интеграла перескока дырок между ионами кислорода бралось значение $t = 0,12 \text{ эВ}$, а величина константы обменного взаимодействия между спинами ионов меди выбиралась равной $I = 0,136 \text{ эВ}$, что согласуется с экспериментальными данными по купратным сверхпроводникам. Параметры кулоновского отталкивания дырок, находящихся на ближайших и следующих за ближайшими ионах кислорода, выбирались равными $V_1 = 1 - 2 \text{ эВ}$ [290] и $V_2 = V'_2 = 0,5 - 1 \text{ эВ}$ [289, 291] соответственно.

Замкнутая система уравнений для нормальных, G_{ij} (61), и аномальных, F_{ij} , функций Грина ($j = 1, 2, 3$)

$$\begin{aligned} F_{11} &= \langle\langle a_{-k\downarrow}^\dagger | a_{k\uparrow}^\dagger \rangle\rangle_\omega, \\ F_{21} &= \langle\langle b_{-k\downarrow}^\dagger | a_{k\uparrow}^\dagger \rangle\rangle_\omega, \\ F_{31} &= \langle\langle L_{-k\downarrow}^\dagger | a_{k\uparrow}^\dagger \rangle\rangle_\omega, \end{aligned} \quad (67)$$

полученная в рамках проекционного метода, имеет вид [289]

$$\begin{aligned} (\omega - \xi_x)G_{1j} &= \delta_{1j} + t_k G_{2j} + J_x G_{3j} + \Delta_{1k} F_{1j} + \Delta_{2k} F_{2j}, \\ (\omega - \xi_y)G_{2j} &= \delta_{2j} + t_k G_{1j} + J_y G_{3j} + \Delta_{3k} F_{1j} + \Delta_{4k} F_{1j}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (\omega - \xi_L)G_{3j} &= \delta_{3j} K_k + (J_x G_{1j} + J_y G_{2j}) K_k + \frac{\Delta_{5k}}{K_k} F_{3j}, \\ (\omega + \xi_x)F_{1j} &= \Delta_{1k}^* G_{1j} + \Delta_{3k}^* G_{2j} - t_k F_{2j} + J_x F_{3j}, \\ (\omega + \xi_y)F_{2j} &= \Delta_{2k}^* G_{1j} + \Delta_{4k}^* G_{2j} - t_k F_{1j} + J_y F_{3j}, \\ (\omega + \xi_L)F_{3j} &= \frac{\Delta_{5k}^*}{K_k} G_{3j} + (J_x F_{1j} + J_y F_{2j}) K_k. \end{aligned} \quad (68)$$

Для F_{i2} и F_{i3} ($i = 1, 2, 3$) берутся те же обозначения относительно второго индекса, что и для нормальных функций Грина (61). При записи системы уравнений (68) использованы функции (52).

Компоненты сверхпроводящего параметра порядка связаны с аномальными средними следующим образом:

$$\begin{aligned} \Delta_{1k} &= -\frac{2}{N} \sum_q \left[\frac{U_p}{2} + V_2 \cos(k_y - q_y) + V'_2 \cos(k_x - q_x) \right] \times \\ &\quad \times \langle a_{q\uparrow} a_{-q\downarrow} \rangle, \\ \Delta_{2k} &= -\frac{4V_1}{N} \sum_q \phi_{k-q} \langle a_{q\uparrow} b_{-q\downarrow} \rangle, \\ \Delta_{3k} &= -\frac{4V_1}{N} \sum_q \phi_{k-q} \langle b_{q\uparrow} a_{-q\downarrow} \rangle, \\ \Delta_{4k} &= -\frac{2}{N} \sum_q \left[\frac{U_p}{2} + V_2 \cos(k_x - q_x) + V'_2 \cos(k_y - q_y) \right] \times \\ &\quad \times \langle b_{q\uparrow} b_{-q\downarrow} \rangle, \\ \Delta_{5k} &= \frac{1}{N} \sum_q \left[I_{k-q} (\langle L_{q\uparrow} L_{-q\downarrow} \rangle - C_1 \langle u_{q\uparrow} u_{-q\downarrow} \rangle) + 8IC_1 \langle u_{q\uparrow} u_{-q\downarrow} \rangle \right] + \\ &\quad + \frac{J}{N} \sum_q \left[-2\gamma_{1q} \langle L_{q\uparrow} L_{-q\downarrow} \rangle + \left(\frac{3}{2} - 4C_1 \gamma_{1k} \right) \langle u_{q\uparrow} u_{-q\downarrow} \rangle \right] + \\ &\quad + \frac{2}{N} \sum_q (\xi(q_x) s_{q,x} + t_q s_{q,y}) \langle a_{q\uparrow} L_{-q\downarrow} \rangle + \\ &\quad + \frac{2}{N} \sum_q (\xi(q_y) s_{q,y} + t_q s_{q,x}) \langle b_{q\uparrow} L_{-q\downarrow} \rangle - \\ &\quad - \frac{U_p}{N} \sum_q \left[\left(\frac{3}{8} - \frac{C_1}{2} \cos k_x \right) \langle a_{q\uparrow} a_{-q\downarrow} \rangle + \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{3}{8} - \frac{C_1}{2} \cos k_y \right) \langle b_{q\uparrow} b_{-q\downarrow} \rangle \right] - \\ &\quad - \frac{V_1}{N} \sum_q \left[\left(\frac{3}{4} - 2C_1 \gamma_{1k} + C_2 \gamma_{2k} \right) s_{q,x} s_{q,y} + \right. \\ &\quad \left. + C_2 \sin k_x \sin(k_y) \phi_q \right] (\langle a_{q\uparrow} b_{-q\downarrow} \rangle + \langle b_{q\uparrow} a_{-q\downarrow} \rangle) - \\ &\quad - \frac{1}{N} \sum_q \left\{ V_2 (C_1 \cos k_y - C_2 \gamma_{2k}) \cos q_y + \right. \\ &\quad \left. + V'_2 \left[-\frac{3}{8} + C_1 \cos k_x - \frac{C_3}{2} \cos(2k_x) \right] \cos q_x \right\} \langle a_{q\uparrow} a_{-q\downarrow} \rangle - \\ &\quad - \frac{1}{N} \sum_q \left\{ V_2 (C_1 \cos k_x - C_2 \gamma_{2k}) \cos q_x + \right. \\ &\quad \left. + V'_2 \left[-\frac{3}{8} + C_1 \cos k_y - \frac{C_3}{2} \cos(2k_y) \right] \cos q_y \right\} \langle b_{q\uparrow} b_{-q\downarrow} \rangle. \end{aligned} \quad (69)$$

Здесь $I_k = 4I\gamma_{1k}$ и введены функции $s_{k,x} = \sin(k_x/2)$, $s_{k,y} = \sin(k_y/2)$, $\phi_k = \cos(k_x/2) \cos(k_y/2)$.

Поскольку актуальным для купратов режимом является режим слабого допирования, возникающие в результате расщепления средних вклады в выражениях (69), пропорциональные корреляторам типа плотность – плотность, здесь не рассматриваются.

Для анализа условий возникновения куперовской неустойчивости в работе [289] необходимые аномальные функции Грина выражались через параметры Δ_{lk}^* ($l = 1, \dots, 5$). Затем с помощью спектральной теоремы [292] были найдены выражения для аномальных средних и получена замкнутая система однородных интегральных уравнений для компонент сверхпроводящего параметра порядка. Эта система уравнений использовалась для нахождения критической температуры перехода ансамбля спиновых поляронов в сверхпроводящее состояние с заданными типами симметрии параметра порядка. Из системы следовало, что ядра интегральных уравнений имеют расщеплённый вид, а её решение надо искать в виде

$$\begin{aligned} \Delta_{1k} &= B_{11} + B_{12} \cos k_x + B_{13} \cos k_y, \\ \Delta_{2k} &= B_{21} \phi_k + B_{22} s_{k,x} s_{k,y}, \\ \Delta_{3k} &= B_{31} \phi_k + B_{32} s_{k,x} s_{k,y}, \\ \Delta_{4k} &= B_{41} + B_{42} \cos k_x + B_{43} \cos k_y, \\ \Delta_{5k} &= B_{51} + B_{52} \cos k_x + B_{53} \cos k_y + \\ &+ B_{54} \cos k_x \cos k_y + B_{55} \sin k_x \sin k_y + \\ &+ B_{56} \cos(2k_x) + B_{57} \cos(2k_y), \end{aligned} \quad (70)$$

где 17 амплитуд B определяют вклад соответствующих базисных функций в разложение компонент параметра порядка. После подстановки (70) в систему уравнений для компонент сверхпроводящего параметра порядка и приравнивания коэффициентов при соответствующих тригонометрических функциях в работе [289] получена система из 17 алгебраических уравнений для амплитуд B . Решение этой системы совместно с уравнением для химического потенциала μ позволило найти зависимость температуры T_c от уровня допирования x для различных типов симметрии параметра порядка. Результаты численного решения представлены на рис. 15. Кривой 1 показана зависимость критической температуры сверхпроводящего $d_{x^2-y^2}$ -спаривания от уровня допирования при $U_p = V_1 = V_2 = 0$. Эта кривая, ранее полученная в работе [42], хорошо согласуется с экспериментальными данными как по абсолютному значению T_c , так и по интервалу допирования, в котором развивается куперовская неустойчивость.

Важный аспект развиваемого подхода состоит в том, что, как указывалось выше, учёт кулоновского взаимодействия V_1 фермионов, находящихся на ближайших ионах кислорода, не влияет на зависимость $T_c(x)$ для сверхпроводящего $d_{x^2-y^2}$ -спаривания: кривая 1 на рис. 15 не изменяется [43]. В области допирования, в которой реализуется отмеченный тип спаривания при $T \lesssim T_c$, решения алгебраической системы для амплитуд B показали, что только четыре из них: B_{52} , B_{53} , B_{22} , B_{32} — не равны нулю, причём $B_{52} = -B_{53}$, $B_{22} = -B_{32}$ и $|B_{52}|/|B_{22}| \sim 10^3$. Это означает, что квазиимпульсная зависимость сверхпроводящей щели определяется в основном пятой компонентой параметра порядка Δ_{5k} , ко-

торая имеет вид

$$\Delta_{5k}^{(d)} = B_{52}(\cos k_x - \cos k_y). \quad (71)$$

Для сверхпроводящего $d_{x^2-y^2}$ -спаривания при $U_p = V_2 = 0$ амплитуды B_{52} и B_{53} в уравнении для Δ_{5k} определяются исключительно обменной константой I , а не параметром V_1 и, таким образом, межузельное кулоновское отталкивание дырок на ближайших ионах кислорода не подавляет куперовскую неустойчивость в d -канале [43].

В случае $U_p = V_2 = 0$ вместо системы из 17 уравнений может быть получено и решено одно уравнение для T_c (как и в работах [42, 273, 293]), которое имеет вид

$$1 = \frac{I}{N} \sum_q (\cos q_x - \cos q_y)^2 (M_{33}(q, \epsilon_{1q}) - C_1 M_{uu}(q, \epsilon_{1q})), \quad (72)$$

где введены функции

$$\begin{aligned} M_{uu}(q) &= -s_{q,x}^2 M_{11}(q) - s_{q,y}^2 M_{22}(q) - \\ &- s_{q,x} s_{q,y} (M_{21}(q) + M_{12}(q)), \\ M_{nm}(q) &= \frac{S_{nm}(q, E_{1q}) + S_{nm}(q, -E_{1q})}{4E_{1q}(E_{1q}^2 - E_{2q}^2)(E_{1q}^2 - E_{3q}^2)} \tanh\left(\frac{E_{1q}}{2T}\right), \\ S_{11}(k, \omega) &= -Q_y(k, -\omega) Q_y(k, \omega), \\ S_{12}(k, \omega) &= -Q_y(k, -\omega) Q_x(k, \omega), \\ S_{21}(k, \omega) &= S_{12}(k, -\omega), \\ S_{22}(k, \omega) &= -Q_x(k, -\omega) Q_x(k, \omega), \\ S_{33}(k, \omega) &= Q_{xy}(k, -\omega) Q_{xy}(k, \omega), \\ Q_{x(y)}(k, \omega) &= (\omega - \xi_{x(y)}) J_{y(x)} + t_k J_{x(y)}, \\ Q_{xy}(k, \omega) &= (\omega - \xi_x)(\omega - \xi_y) - t_k^2. \end{aligned} \quad (73)$$

Из уравнения (72), в частности, следует, что механизмом, обуславливающим возникновение сверхпроводящего спаривания, является обменное взаимодействие спиновых моментов ионов меди, которое, как отмечалось выше, в результате сильной спин-зарядовой связи трансформируется в эффективное притяжение. Результаты решения уравнения (72) и системы из 17 уравнений для амплитуд B для d -спаривания при $U_p = V_2 = 0$, очевидно, совпадают и отвечают кривой 1 на рис. 15.

Учёт кулоновского взаимодействия U_p двух дырок на одном ионе кислорода, в отличие от учёта межузельного взаимодействия дырок на ближайших ионах кислорода, приводит к подавлению сверхпроводящей d -фазы [44]. Однако, как следует из сравнения кривой 3 ($U_p = 3$ эВ и $V_2 = 0$) и кривой 1 ($U_p = V_2 = 0$) на рис. 15, это подавление не является существенным для реализации ВТСП, поскольку в области оптимального допирования $x \simeq 0,16$ температура T_c остаётся высокой.

В работах [289, 291] рассмотрено влияние кулоновских отталкиваний V_2 дырок, находящихся на следующих за ближайшими ионах кислорода CuO_2 -плоскости, на сверхпроводящее спаривание. Кривая 2 на рис. 15 соответствует зависимости $T_c(x)$, полученной для $U_p = 0$, $V_2 = 0,2$ эВ, а кривая 5 — зависимости $T_c(x)$ для $U_p = 0$, $V_2 = 0,8$ эВ. Видно, что учёт V_2 , в отличие от учёта V_1 , приводит к подавлению сверхпроводящего $d_{x^2-y^2}$ -спаривания. Причём это подавление усиливается, если $U_p \neq 0$ (кривые 3, 4 и 6). Но даже при одновременном учёте

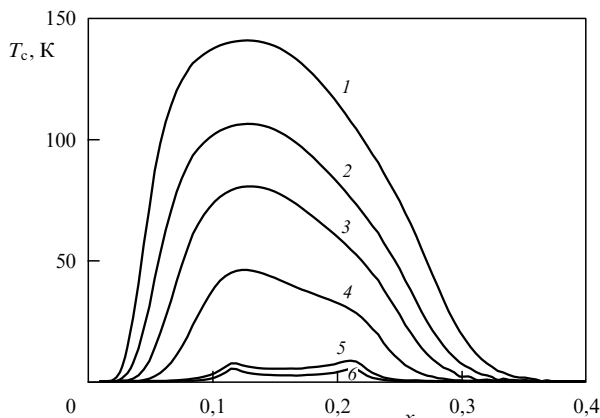


Рис. 15. Зависимости критической температуры перехода в сверхпроводящую фазу для $d_{x^2-y^2}$ -типа спаривания от уровня допирования x , полученные для параметров модели $J = 3,38$, $\tau = 0,10$, $t = 0,12$, $I = 0,136$ при $U_p = V_2 = 0$ (кривая 1), $U_p = 0$, $V_2 = 0,2$ (кривая 2), $U_p = 3$, $V_2 = 0$ (кривая 3), $U_p = 3$, $V_2 = 0,2$ (кривая 4), $U_p = 0$, $V_2 = 0,8$ (кривая 5), $U_p = 3$, $V_2 = 0,5$ (кривая 6) (все параметры в эВ) [295].

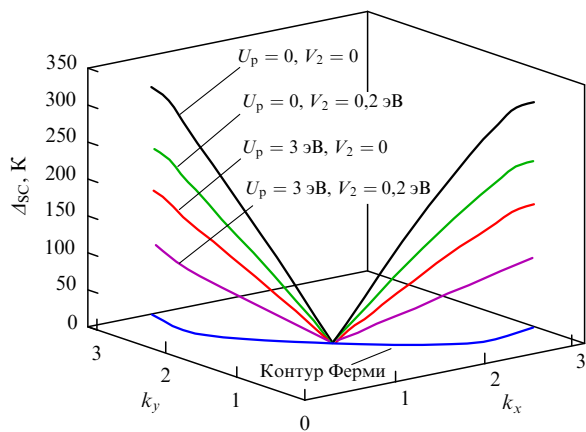


Рис. 16. Квазиимпульсная зависимость сверхпроводящей щели Δ_{SC} на контуре Ферми при $x = 0,125$, $I = 0,136$ эВ, $T = 0$ и различных значениях кулоновских взаимодействий [294].

отмеченных кулоновских взаимодействий $d_{x^2-y^2}$ -спаривание сохраняется и может быть подавлено только для нереалистично больших значений $V_2 > 0,5$ эВ [289, 291].

На рисунке 16 представлена модификация щели в спектре элементарных возбуждений спин-поляронов квазичастиц на контуре Ферми в сверхпроводящей фазе при изменении величины кулоновских взаимодействий U_p и V_2 , рассчитанная в работе [294]. Из рисунка видно, что квазиимпульсная зависимость щели в первой зоне Бриллюэна характеризуется $d_{x^2-y^2}$ -типом симметрии параметра порядка. Поскольку кулоновское взаимодействие V_1 дырок на соседних ионах кислорода не влияет на сверхпроводящее d -спаривание, поведение сверхпроводящей щели определяется только тремя компонентами параметра порядка: Δ_{1k} , Δ_{4k} и Δ_{5k} — из системы (69). Самосогласованное решение системы трёх уравнений для указанных компонент совместно с уравнением для химического потенциала (уже без использования линейного приближения по Δ_{jk} при нахождении необходимых аномальных функций Грина) приводит к зависимостям $\Delta(k)$, приведённым на рис. 16.

Можно показать [52, 295], что эти зависимости могут быть описаны аналитически благодаря низкой плотности носителей тока, а также большой величине $\sim J$ энергетической щели между нижней спин-поляронной зоной и уровнем энергии дырок на p -орбиталях кислорода (см. рис. 2). В этом случае выражение для E_k можно представить в "классическом" виде:

$$E_k = \sqrt{\epsilon_{1k}^2 + \Delta_k^2}, \tag{74}$$

где функция щели Δ_k^2 выражается через компоненты параметра порядка Δ_{jk} ($j = 1, \dots, 5$) аддитивным образом:

$$\Delta_k^2 = |\Delta_{1k}|^2 + |\Delta_{2k}|^2 + |\Delta_{3k}|^2 + |\Delta_{4k}|^2 + \frac{|\Delta_{5k}|^2}{K_k^2}. \tag{75}$$

Важным следствием выражения (75) для сверхпроводящей щели является то, что функция Δ_k для спаривания d -типа не может быть записана в виде простой разности косинусов: $\cos k_x - \cos k_y$. Наличие функции K_k в знаменателе в формуле (75) приведёт к тому, что квазиимпульсная зависимость щели всегда будет немного отклоняться от функции $\cos k_x - \cos k_y$. Подробное обсуждение вопроса, связанного с дисперсией сверхпроводящей щели в купратных ВТСП, можно найти в работах [296, 297] и в приведённых в них ссылках.

Вопрос о реализации s -спаривания в ансамбле спиновых поляронов рассматривался в работе [44] для простоты без учёта дальнего кулоновского взаимодействия, $V_2 = 0$. В этом случае из системы интегральных уравнений для компонент сверхпроводящего параметра порядка следует, что решение, соответствующее s -спариванию, должно иметь вид

$$\begin{aligned} \Delta_{1k}^{(s)} &= \Delta_{4k}^{(s)} = B_{11}, \\ \Delta_{2k}^{(s)} &= \Delta_{3k}^{(s)} = 0, \\ \Delta_{5k}^{(s)} &= B_{51} + 2B_{52}\gamma'_{1k} + B_{54}\gamma'_{2k}. \end{aligned} \tag{76}$$

Расчёты показывают, что при всех реалистичных параметрах модели система не имеет нетривиального решения, соответствующего сверхпроводящему s -спариванию [44]. Следовательно, в СФМК, корректно учитывающей сильную связь дырок на ионах кислорода со спиновыми моментами ионов меди, сверхпроводящая фаза с s -типом симметрии параметра порядка не реализуется.

6.3. Лондоновская глубина проникновения

Спин-поляронный подход, доказавший свою успешность при описании равновесных свойств дырочно-допированных купратов как в нормальной, так и в сверхпроводящей фазах, может быть применён и для изучения отклика системы на электромагнитное возмущение. В частности, большой интерес представляет исследование глубины проникновения λ магнитного поля в сверхпроводник, поскольку данная характеристика позволяет прояснить ряд экспериментально наблюдаемых особенностей температурной зависимости плотности сверхпроводящего тока. Сравнение с экспериментальными данными даёт важную информацию не только о критическом токе, но и, например, о механизме формирования псевдощелевой фазы в купратах [298, 299].

Характерной особенностью температурной зависимости величины λ^{-2} в купратах является линейный наклонный участок функции $\lambda^{-2}(T)$ в области низких температур. Такое поведение, согласно [300], обусловлено наличием нодальных точек у щели на поверхности Ферми нормальной фазы. Возникновение нодальных точек в купратах, как известно, связывается с реализацией d-типа симметрии сверхпроводящего параметра порядка. В сверхпроводниках s-типа нодальные точки щели отсутствуют, а уменьшение щели в низкотемпературной области описывается экспоненциальной функцией.

Другая важная особенность температурной зависимости лондоновской глубины в купратных ВТСП обусловлена наличием в ряде соединений так называемых точек перегиба (т.е. точек изменения знака кривизны) функции $\lambda^{-2}(T)$, наблюдаемых при определённых значениях уровня допирования в $\text{La}_{1,83}\text{Sr}_{0,17}\text{CuO}_4$ [301, 302], $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ [303, 304], а также в $\text{Bi}_{2,15}\text{Sr}_{1,85}\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ [305].

Для объяснения причины возникновения точки перегиба в работе [301] сделано предположение о наличии в $\text{La}_{1,83}\text{Sr}_{0,17}\text{CuO}_4$ одновременно двух сверхпроводящих щелей с d- и s-волновой симметрией параметра порядка. Однако, как продемонстрировано в работе [52], указанная особенность в температурной зависимости глубины проникновения магнитного поля в купратный сверхпроводник может быть получена без использования искусственной гипотезы. Для этого была привлечена спин-поляронная концепция, ключевой особенностью которой является утверждение о том, что носителями заряда в данных соединениях выступают спин-поляронные квазичастицы.

В локальном приближении связь между плотностью сверхпроводящего тока \mathbf{j} и векторным потенциалом магнитного поля \mathbf{A} определяется уравнением Лондонов

$$\mathbf{j} = -\frac{c}{4\pi\lambda^2} \mathbf{A}, \quad (77)$$

где c — скорость света. Для вычисления плотности сверхпроводящего тока \mathbf{j} гамильтониан СФМК (26) записывается в представлении Ванье. Затем с использованием подстановки Пайерлса в этот гамильтониан добавляется слагаемое, описывающее магнитное поле. Подстановка Пайерлса приводит к перенормировке всех интегралов перескока на фазовый множитель

$$\exp\left(\frac{ie}{\hbar} R_{mn}^x A_{q=0}^x\right), \quad (78)$$

где $R_{mn} = R_m - R_n$ — разность радиусов-векторов для узлов с индексами m и n , \hbar — постоянная Планка, e — заряд электрона, $A_{q=0}^x$ — фурье-компонента вектора потенциала, рассматриваемая в длинноволновом пределе (см., например, [306]). Для простоты вектор-потенциал \mathbf{A} выбирается направленным вдоль оси x .

Стандартная процедура вычисления парамагнитной и диамагнитной частей тока состоит в выделении в гамильтониане линейных и квадратичных поправок по величине вектора-потенциала $A_{q=0}^x$ и последующем варьировании этих поправок по $A_{q=0}^x$ [306–309]. При использовании спин-поляронной концепции целесообразно модифицировать отмеченный подход посредством отказа от разложения фазовых множителей (78) по степеням $A_{q=0}^x$, т.е. оставляя эти множители в исходном виде. Тогда после перехода в квазиимпульсное представление един-

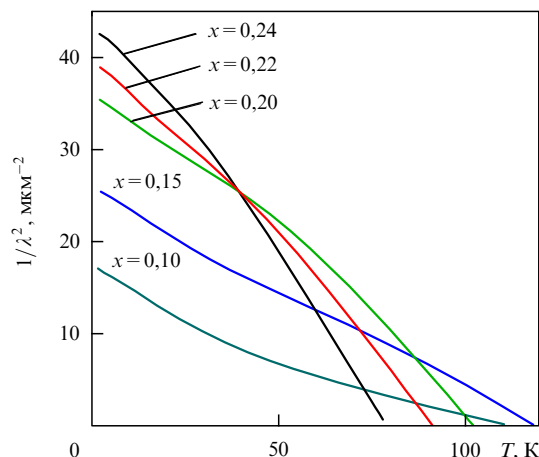


Рис. 17. (В цвете онлайн.) Температурная зависимость величины, обратной квадрату лондоновской глубины проникновения λ , рассчитанная для различных значений уровня допирования x при наборе параметров модели $\tau = 0,225$, $J = 2,86$, $I = 0,118$, $t = 0,12$, $U_p = V_2 = V'_2 = 0$ (все параметры в [эВ]) [52].

ственным изменением (за счёт включения магнитного поля) в операторах \hat{H}_h и \hat{J} (26) гамильтониана будет появление дополнительной фазы α_x в аргументе тригонометрической функции $s_{k,x}$ [52]:

$$s_{k,x} \rightarrow s_{k,x} = \sin\left(\frac{k_x}{2} - \alpha_x\right), \quad (79)$$

где

$$\alpha_x = \frac{eg_x}{2c\hbar} A_{q=0}^x, \quad (80)$$

g_x — постоянная решётки вдоль оси x . Функция $s_{k,y}$ остаётся прежней, поскольку в рассматриваемом случае $A_{q=0}^y = 0$.

Заметим, что появление величины α_x в качестве фазы в аргументе функции $s_{k,x}$ не является неожиданным: перенормировка (79) отвечает известной замене квазиимпульса $\hbar k_x$ при включении магнитного поля:

$$\hbar k_x \rightarrow \hbar k_x - \frac{e}{c} A_{q=0}^x.$$

Вариация выражений для операторов \hat{H}_h и \hat{J} по вектору-потенциалу приводит к следующему выражению для плотности сверхпроводящего тока:

$$j_x = \frac{eg_x}{\hbar} \sum_{kx} \cos\left(\frac{k_x}{2} - \alpha_x\right) [2\tau s_{k,x} \langle a_{kx}^\dagger a_{kx} \rangle + (2\tau - 4t) s_{k,y} \langle a_{kx}^\dagger b_{kx} \rangle + J \langle a_{kx}^\dagger L_{kx} \rangle]. \quad (81)$$

Зависимость j_x от вектора-потенциала в области малых $A_{q=0}^x$ обязана быть линейной, а коэффициент, определяющий эту линейную зависимость, согласно уравнению Лондонов, непосредственно выражается через λ^{-2} . Указанный коэффициент рассчитывался численно [52] на основе уравнения (81), а результаты расчётов температурной зависимости магнитной глубины проникновения в ансамбле спиновых поляронов для различных уровней допирования представлены на рис. 17.

Несмотря на то что параметры модели находились не из подгонки, а выбирались равными использовавшимся

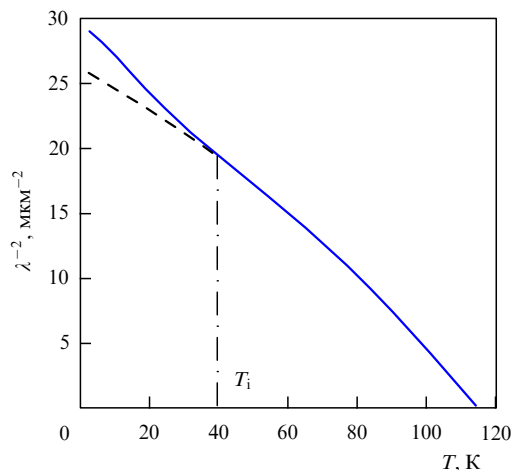


Рис. 18. Температурная зависимость λ^{-2} при $x = 0,17$. Параметры модели $J = 2,86$ эВ и $I = 0,118$ эВ выбраны таким образом, чтобы граничные значения кривой соответствовали экспериментальным данным [301, 302, 312]. Остальные параметры выбраны такими же, как и на рис. 17. T_i — точка перегиба. Штриховая кривая соответствует экстраполяции функции $\lambda^{-2}(T)$ от области справа от точки T_i в область слева от этой точки.

в предыдущих работах (см. раздел 3), кривые, представленные на рис. 17, демонстрируют достаточно хорошее количественное согласие с экспериментальными данными [300–305, 310–312]. При низких температурах все кривые ведут себя линейным образом вплоть до наименьшей из рассматриваемых температур $T = 2$ К. Такое поведение, как указывалось выше, — следствие d-волновой симметрии сверхпроводящего параметра порядка.

Важной особенностью полученных температурных зависимостей λ^{-2} являются точки перегиба, которые, как отмечалось, наблюдаются в некоторых купратных ВТСП. На рисунке 18 представлена зависимость $\lambda^{-2}(T)$ при $x = 0,17$. Положение точки перегиба этой зависимости отмечено вертикальной штрихпунктирной прямой. Авторы работы [52] считают, что проявление указанной особенности на теоретических кривых $\lambda^{-2}(T)$ следует рассматривать как косвенное подтверждение спин-поляронной природы фермиевских квазичастиц в сверхпроводниках на основе меди.

В работе [52] показано, что модификация спин-поляронного спектра E_k (74) при учёте поправки, обусловленной магнитным полем, в сверхпроводящей фазе происходит аддитивным образом:

$$E_k = \delta\epsilon_{1k} + \sqrt{\epsilon_{1k}^2 + A_k^2}, \quad (82)$$

где $\delta\epsilon_{1k}$ — линейная по α_x поправка к спектру поляронов в нормальной фазе ϵ_{1k} , функция щели A_k^2 в данном случае выражается только через одну компоненту A_{5k} параметра порядка,

$$A_k^2 = \frac{|A_{5k}|^2}{K_k^2}. \quad (83)$$

Простой вид A_k^2 в данном случае обусловлен тем, что в работе [52] не учитывались вклады от кулоновского взаимодействия \hat{U}_p и \hat{V}_{pp} .

В заключение этого раздела отметим, что, несмотря на трёхзонный характер модели, спектр фермиевских

возбуждений спиновых поляронов в сверхпроводящей фазе E_k выражается только через спектр нижней зоны ϵ_{1k} нормальной фазы. При малых α_x спектр квазичастиц Боголюбова перенормируется таким же аддитивным образом, как и в обычной теории лондоновской глубины проникновения [307, 309]. В то же время квазиимпульсная зависимость спектра нормальной фазы ϵ_{1k} (а следовательно, и его индуцированная полем поправка $\delta\epsilon_{1k}$) существенно отличается от таковой в простейшем случае квадратичной дисперсии и определяется структурой CuO_2 -плоскости и сильными спин-фермионными взаимодействиями.

7. Заключение

Представленный обзор теоретических работ по развитию спин-фермионной модели для описания электронных свойств дырочно-допированных купратов в нормальном состоянии и механизма сверхпроводящего спаривания в рамках спин-поляронной концепции позволяет сделать следующие утверждения.

1. Математически строгая процедура рассмотрения сильных корреляций в электронной системе ионов меди и кислорода CuO_2 -плоскости, описываемой гамильтонианом Эмери, приводит к спин-фермионной модели купратов. В этой модели подсистема локализованных на ионах меди спинов нелокальным образом взаимодействует с подсистемой коллективизированных дырок. Характерная энергия связи между локализованными спинами и коллективизированными дырками имеет настолько большое значение (~ 5 эВ), что существенно изменяет природу фермиевских квазичастиц и индуцирует особый механизм сверхпроводящего спаривания.

2. Сильное спин-фермионное взаимодействие является причиной формирования нелокальных спиновых поляронов. Это определяет природу фермиевских квазичастиц спин-фермионной модели купратов и позволяет в рамках единой концепции описать комплекс экспериментальных результатов по свойствам купратов как в нормальном, так и в сверхпроводящем состояниях с использованием единственного подгоночного параметра модели — интеграла прямых перескоков между ионами кислорода t . Отметим, что для адекватного воспроизведения отмеченных экспериментальных данных должно выбираться значение этого параметра $t = 0,1$ эВ, которое значительно отличается от часто используемого значения $t_{pp} = 0,65$ эВ.

3. Физические характеристики нормальной фазы купратов отражаются статистическими свойствами ансамбля нелокальных спиновых поляронов. В частности, на количественном уровне воспроизводится модификация поверхности Ферми, получаемая из экспериментальных данных в купратных соединениях при дырочном допировании.

4. Для области дырочного допирования, отвечающей сверхпроводящей области на фазовой диаграмме купратов, спин-поляронный ансамбль проявляет куперовскую неустойчивость с высокими значениями критической температуры. При этом сверхпроводящий параметр порядка характеризуется $d_{x^2-y^2}$ -типом симметрии. Эффективный потенциал куперовского спаривания пропорционален интегралу обменного взаимодействия между ближайшими спинами ионов меди. Физическая причина этого эффекта связана с тем, что при сильной спин-

фермионной связи нахождение двух спиновых поляронов на ближайших узлах приводит к выигрышу в обменной энергии по сравнению с обменной энергией в случае их пространственной удалённости. Это проявляется как взаимное притяжение спиновых поляронов и определяет механизм сверхпроводящего спаривания в ансамбле спин-поляронных квазичастиц.

5. В ансамбле спиновых поляронов может реализовываться только сверхпроводящая фаза с $d_{x^2-y^2}$ -симметрией параметра порядка. Сверхпроводящая фаза s-типа не удовлетворяет системе интегральных уравнений самосогласования ни при каких реально допустимых уровнях дырочного допирования. Это соответствует экспериментальным данным о наблюдаемой симметрии параметра порядка и служит дополнительным аргументом в пользу спин-поляронной концепции. Отметим, что в других подходах сверхпроводящая фаза с s-типом спаривания не только могла реализовываться, но и давала более высокие критические температуры.

6. Сверхпроводящая фаза спин-поляронного ансамбля не подавляется при включении кулоновского взаимодействия дырок, находящихся на ближайших ионах кислорода. Это снимает давно стоявшую проблему нейтрализации негативного влияния кулоновского отталкивания дырок на реализацию куперовской неустойчивости. В связи с этим заметим, что при традиционных подходах, основанных на модели Хаббарда и её эффективных низкоэнергетических вариантах, сверхпроводящая фаза подавлялась при включении в рассмотрение кулоновского отталкивания дырок, находящихся на ближайших узлах решётки. Актуальность проблемы обострялась невозможностью использования эффективного кулоновского параметра, перенормированного в сторону уменьшения за счёт эффекта экранирования на расстояниях в несколько ангстремов.

Нейтрализация негативного влияния межузельного кулоновского отталкивания соседних дырок на сверхпроводящее $d_{x^2-y^2}$ -спаривание происходит под действием двух факторов. Первый фактор обусловлен учётом реальной кристаллографической структуры CuO_2 -плоскости. В этом случае кулоновское отталкивание фермионов в подрешётке ионов кислорода описывается фурье-образом межузельного кулоновского взаимодействия $V_q = 4V_1 \cos(q_x/2) \cos(q_y/2)$. Второй фактор связан с сильной спин-зарядовой связью. В результате спин-поляронные квазичастицы эффективно перемещаются по квадратной решётке. Для возникающего в таком ансамбле сверхпроводящего состояния кулоновское отталкивание между перенормированными дырками с фурье-образом V_q будет трансформироваться во взаимодействие между спиновыми поляронами. Поскольку коэффициент разложения V_q по инвариантам квадратной решётки равен нулю, эффективное взаимодействие между спин-поляронными квазичастицами также обращается в нуль. Поэтому параметр V_1 не входит в уравнения для сверхпроводящего параметра порядка с $d_{x^2-y^2}$ -типом симметрии и не влияет на критическую температуру.

Уместно отметить, что различный вклад кулоновского взаимодействия в условия реализации сверхпроводящих фаз с разными типами симметрии параметра порядка проявлялся и ранее, например, в теории сверхпроводимости Кона–Латтинжера [75, 76]. В работах [313–315] установлено, что межузельные кулоновские

взаимодействия в решёточных моделях обычно вносят вклад только в определённые каналы спаривания и не влияют на другие каналы. В то же время поляризационные вклады имеют компоненты во всех каналах и, как правило, более чем одна из них "играет" в пользу притяжения. В такой ситуации оказывается, что межузельные взаимодействия либо вообще не влияют на главные компоненты эффективного взаимодействия, приводящие к спариванию, либо подавляют главные компоненты, но не затрагивают второстепенные [313–315].

7. Хаббардовское отталкивание U_p и кулоновские взаимодействия V_2 дырок, находящихся на следующих за ближайшими ионах кислорода, влияют на формирование сверхпроводящей фазы с d-типом симметрии параметра порядка, приводя к уменьшению критической температуры перехода. Однако эта температура остаётся в пределах тех значений, которые наблюдаются экспериментально. В этом случае сверхпроводящая щель формируется под влиянием трёх компонент параметра порядка.

8. Продемонстрирована возможность применения спин-поляронной концепции при исследовании отклика системы на внешнее электромагнитное возмущение. Использование особенностей спектра спин-поляронных квазичастиц позволило объяснить тонкие особенности в температурной и концентрационной зависимости лондоновской глубины проникновения в сверхпроводник. Полученные зависимости находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными по купратным сверхпроводникам.

Кратко остановимся на важных направлениях дальнейшего применения спин-поляронной концепции. Одним из них является получение эффективной одноорбитальной модели [316], действующей в усечённом гильбертовом пространстве и, в отличие от модели Хаббарда и $t-J$ -модели, корректно учитывающей как особенности кристаллографического строения CuO_2 -плоскости, так и сильную спин-фермионную связь, обуславливающую формирование спин-поляронных квазичастиц. Создание такой модели представляется необходимым, поскольку анализ низкотемпературных свойств купратных сверхпроводников в рамках спин-фермионной модели и даже в рамках её упрощённого варианта, так называемой $\phi-d$ -модели [273, 293], всё ещё является достаточно громоздким. В частности, переход к такой эффективной модели позволит понизить ранг системы интегральных уравнений самосогласования для сверхпроводящей фазы.

Другим направлением дальнейшего использования спин-поляронной концепции, представляющим интерес, является исследование условий возникновения модуляции спектральной интенсивности на контуре Ферми [317] а также псевдощелевого состояния [6] в недоопированных купратных сверхпроводниках. Это состояние проявляется в экспериментах по ядерному магнитному резонансу, неупругому рассеянию нейтронов, а также в ARPES-экспериментах [4], демонстрирующих сильные анизотропные изменения спектральной плотности носителей заряда в широкой области температур в нормальной и сверхпроводящей фазах купратов [318]. Пока вопрос о природе псевдощелевого состояния остаётся открытым, однако один из наиболее часто обсуждаемых сценариев возникновения данного состояния связан с моделью сильного рассеяния носителей заряда на АФМ-спиновых флуктуациях ближнего порядка [318–

320]. Это рассеяние приводит к существенной неферми-жидкостной перестройке электронного спектра в определённых областях квазиимпульсного пространства вблизи поверхности Ферми около "горячих" точек или вблизи плоских участков на поверхности Ферми [321–323].

Кроме того, актуальными представляются исследования кинетических, термодинамических и гальваномагнитных характеристик купратных сверхпроводников, в которых носителями заряда являются спин-поляроны квазичастицы [324–329], сформированные при учёте реальных кристаллографических особенностей CuO_2 -плоскости.

Исследования авторов поддержаны Российским фондом фундаментальных исследований (РФФИ) в рамках проектов №№ 18-02-00837, 19-02-00509 и 20-32-70059, правительством Красноярского края, Красноярским краевым фондом поддержки научной и научно-технической деятельности в рамках проекта № 18-42-240014 "Одноорбитальная эффективная модель ансамбля спин-поляронов квазичастиц в проблеме описания промежуточного состояния и псевдощелевого поведения купратных сверхпроводников". Обзор выполнен при поддержке РФФИ в рамках конкурса "Экспансия" (проект № 19-12-50116).

Список литературы

- Damascelli A, Hussain Z, Shen Z-X *Rev. Mod. Phys.* **75** 473 (2003)
- Fischer Ø et al. *Rev. Mod. Phys.* **79** 353 (2007)
- Fournier D et al. *Nat. Phys.* **6** 905 (2010)
- Timusk T, Statt B *Rep. Prog. Phys.* **62** 61 (1999)
- Chakravarty S et al. *Phys. Rev. B* **63** 094503 (2001)
- Садовский М В *УФН* **171** 539 (2001); Sadovskii M V *Phys. Usp.* **44** 515 (2001)
- Lee P A et al. *Rev. Mod. Phys.* **78** 17 (2006)
- Yang K-Y, Rice T M, Zhang F-C *Phys. Rev. B* **73** 174501 (2006)
- Hussey N E *Adv. Phys.* **51** 1685 (2002)
- Riggs S C et al. *Nat. Phys.* **7** 332 (2011)
- Chang J et al. *Nat. Phys.* **8** 871 (2012)
- Мамсурова Л Г и др. *Письма в ЖЭТФ* **105** 223 (2017); Mamsurova L G et al. *JETP Lett.* **105** 241 (2017)
- Мамсурова Л Г и др. *Письма в ЖЭТФ* **106** 351 (2017); Mamsurova L G et al. *JETP Lett.* **106** 378 (2017)
- Gabovich A M et al. *Supercond. Sci. Technol.* **14** R1 (2001)
- Forgan E M et al. *Nat. Commun.* **6** 10064 (2015)
- Shen K M et al. *Science* **307** 901 (2005)
- Vojta M *Adv. Phys.* **58** 699 (2009)
- Berg E et al. *New J. Phys.* **11** 115004 (2009)
- Plakida N *High-Temperature Cuprate Superconductors: Experiment, Theory, and Applications* (Dordrecht: Springer, 2010)
- Keimer B et al. *Nature* **518** 179 (2015)
- Zhang F C, Rice T M *Phys. Rev. B* **37** 3759(R) (1988)
- Emery V J *Phys. Rev. Lett.* **58** 2794 (1987)
- Anderson P W *Science* **235** 1196 (1987)
- Барабанов А Ф, Максимов Л А, Уймин Г В *Письма в ЖЭТФ* **47** 532 (1988); Barabanov A F, Maksimov L A, Uimin G V *JETP Lett.* **47** 622 (1988)
- Барабанов А Ф, Максимов Л А, Уймин Г В *ЖЭТФ* **96** 665 (1989); Barabanov A F, Maksimov L A, Uimin G V *Sov. Phys. JETP* **69** 371 (1989)
- Prelovšek P *Phys. Lett. A* **126** 287 (1988)
- Zaanen J, Oleś A M *Phys. Rev. B* **37** 9423 (1988)
- Stechel E B, Jennison D R *Phys. Rev. B* **38** 4632 (1988)
- Emery V J, Reiter G *Phys. Rev. B* **38** 4547 (1988)
- Matsukawa H, Fukuyama H *J. Phys. Soc. Jpn.* **58** 2845 (1989)
- Kuzian R O et al. *Phys. Rev. B* **58** 6194 (1998)
- Barabanov A F, Maksimov L A, Mikheyenkov A V *AIP Conf. Proc.* **527** 1 (2000)
- Барабанов А Ф, Михеенков А В, Белемук А М *Письма в ЖЭТФ* **75** 118 (2002); Barabanov A F, Mikheenkov A V, Belemuk A M *JETP Lett.* **75** 107 (2002)
- Maksimov L A, Barabanov A F, Kuzian R O *Phys. Lett. A* **232** 286 (1997)
- Maksimov L A, Haun R, Barabanov A F *Phys. Lett. A* **238** 288 (1998)
- Барабанов А Ф и др. *Письма в ЖЭТФ* **68** 386 (1998); Barabanov A F et al. *JETP Lett.* **68** 412 (1998)
- Barabanov A F et al. *Phys. Lett. A* **265** 221 (2000)
- Kampf A P, Schrieffer J R *Phys. Rev. B* **42** 7967 (1990)
- Барабанов А Ф и др. *ЖЭТФ* **119** 777 (2001); Barabanov A F et al. *J. Exp. Theor. Phys.* **92** 677 (2001)
- Дзевбисашвили Д М, Вальков В В, Барабанов А Ф *Письма в ЖЭТФ* **98** 596 (2013); Dzebisashvili D M, Val'kov V V, Barabanov A F *JETP Lett.* **98** 528 (2013)
- Вальков В В, Коровушкин М М, Барабанов А Ф *Письма в ЖЭТФ* **88** 426 (2008); Val'kov V V, Korovushkin M M, Barabanov A F *JETP Lett.* **88** 370 (2008)
- Val'kov V V, Dzebisashvili D M, Barabanov A F *Phys. Lett. A* **379** 421 (2015)
- Вальков В В и др. *Письма в ЖЭТФ* **103** 433 (2016); Val'kov V V et al. *JETP Lett.* **103** 385 (2016)
- Вальков В В и др. *ЖЭТФ* **152** 957 (2017); Val'kov V V et al. *J. Exp. Theor. Phys.* **125** 810 (2017)
- Piekarz P, Konior J, Jefferson J H *Phys. Rev. B* **59** 14697 (1999)
- Makarov I A et al. *Phys. Rev. B* **92** 155143 (2015)
- Шнейдер Е И и др. *ЖЭТФ* **153** 820 (2018); Shneyder E I et al. *J. Exp. Theor. Phys.* **126** 683 (2018)
- Myasnikova A E, Zhileeva E A, Moseykin D V *J. Phys. Condens. Matter* **30** 125601 (2018)
- Myasnikova A E et al. *J. Phys. Condens. Matter* **31** 235602 (2019)
- Элиашберг Г М *ЖЭТФ* **38** 966 (1960); Eliashberg G M *Sov. Phys. JETP* **11** 696 (1960)
- Садовский М В *ЖЭТФ* **155** 527 (2019); Sadovskii M V *J. Exp. Theor. Phys.* **128** 455 (2019)
- Dzebisashvili D M, Komarov K K *Eur. Phys. J. B* **91** 278 (2018)
- Bardeen J, Cooper L N, Schrieffer J R *Phys. Rev.* **108** 1175 (1957)
- Little W A *Phys. Rev.* **134** A1416 (1964)
- Ginzburg V L *Phys. Lett.* **13** 101 (1964)
- Bednorz J G, Müller K A Z. *Phys. B* **64** 189 (1986)
- Wu M K et al. *Phys. Rev. Lett.* **58** 908 (1987)
- Schilling A et al. *Nature* **363** 56 (1993)
- Chu C W et al. *Nature* **365** 323 (1993)
- Hubbard J C *Proc. R. Soc. Lond. A* **276** 238 (1963)
- Овчинников С Г *УФН* **167** 1043 (1997); Ovchinnikov S G *Phys. Usp.* **40** 993 (1997)
- Вальков В В, Овчинников С Г *Квазичастицы в сильно коррелированных системах* (Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2001); Пер. на англ. яз.: Ovchinnikov S G, Val'kov V V *Hubbard Operators in the Theory of Strongly Correlated Electrons* (London: Imperial College Press, 2004)
- Изыюмов Ю А *УФН* **167** 465 (1997); Izyumov Yu A *Phys. Usp.* **40** 445 (1997)
- Локтев В М *ФНТ* **22** 3 (1996); Loktev V M *Low Temp. Phys.* **22** 1 (1996)
- Mott N F *Metal-Insulator Transitions* (London: Taylor and Francis, 1990); Пер. на русск. яз.: Мотт Н Ф *Переходы металл-изолятор* (М.: Наука, 1979)
- Хомский Д И *ФММ* **29** 31 (1970); Khomskii D I *Phys. Met. Metallogr.* **29** 31 (1970)
- Изыюмов Ю А *УФН* **161** (11) 1 (1991); Izyumov Yu A *Sov. Phys. Usp.* **34** 935 (1991)
- Baranov M A, Kagan M Yu *Z. Phys. B* **86** 237 (1992)
- Kohn W, Luttinger J M *Phys. Rev. Lett.* **15** 524 (1965)
- Fay D, Layzer A *Phys. Rev. Lett.* **20** 187 (1968)
- Каган М Ю, Чубуков А В *Письма в ЖЭТФ* **47** 525 (1988); Kagan M Yu, Chubukov A V *JETP Lett.* **47** 614 (1988)
- Baranov M A, Chubukov A V, Kagan M Yu *Int. J. Mod. Phys. B* **6** 2471 (1992)
- Alexandrov A S, Kabanov V V *Phys. Rev. Lett.* **106** 136403 (2011)
- Maiti S, Chubukov A V *AIP Conf. Proc.* **1550** 3 (2013)

75. Kagan M Yu, Mitskan V A, Korovushkin M M *УФН* **185** 785 (2015); Kagan M Yu, Mitskan V A, Korovushkin M M *Phys. Usp.* **58** 733 (2015)
76. Kagan M Yu *Письма в ЖЭТФ* **103** 822 (2016); Kagan M Yu *JETP Lett.* **103** 728 (2016)
77. Scalapino D J, Loh E (Jr.), Hirsch J E *Phys. Rev. B* **34** 8190(R) (1986)
78. Scalapino D J, Loh E (Jr.), Hirsch J E *Phys. Rev. B* **35** 6694 (1987)
79. Козлов А Н *Сверхпроводимость: физика, химия, техника* **2** 64 (1989)
80. Zanchi D, Schulz H J *Phys. Rev. B* **54** 9509 (1996)
81. Hlubina R *Phys. Rev. B* **59** 9600 (1999)
82. Raghu S, Kivelson S A, Scalapino D J *Phys. Rev. B* **81** 224505 (2010)
83. Römer A T et al. *Phys. Rev. Res.* **2** 013108 (2020)
84. Astretsov G V, Rohringer G, Rubtsov A N *Phys. Rev. B* **101** 075109 (2020)
85. Зайцев Р О, Иванов В А *ФТТ* **29** 2554 (1987); Zaitsev R O, Ivanov V A *Sov. Phys. Solid State* **29** 475 (1987)
86. Hubbard J C *Proc. R. Soc. Lond. A* **285** 542 (1965)
87. Shubin S, Vonsowsky S *Proc. R. Soc. Lond. A* **145** 159 (1934)
88. Shubin S, Vonsowsky S *Phys. Z. Sowjetunion* **7** 292 (1935)
89. Shubin S, Vonsowsky S *Phys. Z. Sowjetunion* **10** 348 (1936)
90. Зайцев Р О, Иванов В А, Михайлова Ю В *ФММ* **65** 1032 (1988)
91. Зайцев Р О, Иванов В А, Михайлова Ю В *ФММ* **68** 1108 (1989)
92. Зайцев Р О *ЖЭТФ* **125** 891 (2004); Zaitsev R O *J. Exp. Theor. Phys.* **98** 780 (2004)
93. Изюмов Ю А, Скрябин Ю Н *Статистическая механика магнитоупорядоченных систем* (М.: Наука, 1987); Пер. на англ. яз.: Izyumov Yu A, Skryabin Yu N *Statistical Mechanics of Magnetically Ordered Systems* (Berlin: Springer, 1988)
94. Изюмов Ю А, Кацнельсон М И, Скрябин Ю Н *Магнетизм коллективизированных электронов* (М.: Наука, 1994)
95. Изюмов Ю А, Чашин Н И, Алексеев Д С *Теория сильно коррелированных систем. Метод производящего функционала* (М. – Ижевск: РХД, 2006)
96. Изюмов Ю А *УФН* **165** 403 (1995); Izyumov Yu A *Phys. Usp.* **38** 385 (1995)
97. Georges A et al. *Rev. Mod. Phys.* **68** 13 (1996)
98. Tasaki H J. *Phys. Condens. Matter* **10** 4353 (1998)
99. Bulut N *Adv. Phys.* **51** 1587 (2002)
100. Mattheiss L F *Phys. Rev. Lett.* **58** 1028 (1987)
101. Jorgensen J D et al. *Phys. Rev. Lett.* **58** 1024 (1987)
102. Yu J, Freeman A J, Xu J-H *Phys. Rev. Lett.* **58** 1035 (1987)
103. Siegrist T et al. *Phys. Rev. B* **35** 7137 (1987)
104. Fulde P *Electron Correlations in Molecules and Solids* (Springer Series in Solid-State Sciences, Vol. 100) (Berlin: Springer-Verlag, 1991)
105. Varma C M, Schmitt-Rink S, Abrahams E *Solid State Commun.* **62** 681 (1987)
106. Nücker N et al. *Z. Phys. B* **67** 9 (1987)
107. Hybertsen M S, Schlüter M, Christensen N E *Phys. Rev. B* **39** 9028 (1989)
108. Eskes H, Tjeng L H, Sawatzky G A *Phys. Rev. B* **41** 288 (1990)
109. McMahan A K, Annett J F, Martin R M *Phys. Rev. B* **42** 6268 (1990)
110. Ogata M, Fukuyama H *Rep. Prog. Phys.* **71** 036501 (2008)
111. Dopf G, Muramatsu A, Hanke W *Phys. Rev. B* **41** 9264 (1990)
112. Dopf G, Muramatsu A, Hanke W *Phys. Rev. Lett.* **68** 353 (1992)
113. Imada M J. *Phys. Soc. Jpn.* **57** 3128 (1988)
114. Елесин В Ф и др. *ЖЭТФ* **99** 237 (1991); Elesin V F et al. *Sov. Phys. JETP* **72** 133 (1991)
115. Lin H Q, Hirsch J E, Scalapino D J *Phys. Rev. B* **37** 7359 (1988)
116. Hirsch J E et al. *Phys. Rev. Lett.* **60** 1668 (1988)
117. Jones D H, Monaghan S J. *Phys. Condens. Matter* **1** 1843 (1989)
118. Ogata M, Shiba H J. *Phys. Soc. Jpn.* **57** 3074 (1988)
119. Schmidt H J, Kuramoto Y *Phys. Rev. B* **42** 2562 (1990)
120. Hirsch J E et al. *Phys. Rev. B* **39** 243 (1989)
121. Fujimori A *Phys. Rev. B* **39** 793(R) (1989)
122. Annett J F et al. *Phys. Rev. B* **40** 2620(R) (1989)
123. Grant J B, McMahan A K *Phys. Rev. Lett.* **66** 488 (1991)
124. Nücker N et al. *Phys. Rev. B* **39** 6619 (1989)
125. Romberg H et al. *Phys. Rev. B* **41** 2609(R) (1990)
126. Pompa M et al. *Physica C* **184** 102 (1991)
127. Chen C T et al. *Phys. Rev. Lett.* **68** 2543 (1992)
128. Dagotto E *Rev. Mod. Phys.* **66** 763 (1994)
129. Gaididei Yu B, Loktev V M *Phys. Status Solidi B* **147** 307 (1988)
130. Weber W Z. *Phys. B* **70** 323 (1988)
131. Kamimura H, Matsuno S, Saito R *Solid State Commun.* **67** 363 (1988)
132. Müller K A Z. *Phys. B* **80** 193 (1990)
133. Nickel J H, Morris D E, Ager J W (III) *Phys. Rev. Lett.* **70** 81 (1993)
134. De Leeuw D M et al. *Physica C* **166** 133 (1990)
135. Di Castro C, Feiner L F, Grilli M *Phys. Rev. Lett.* **66** 3209 (1991)
136. Булаевский Л Н, Нагаев Э Л, Хомский Д И *ЖЭТФ* **54** 1562 (1968); Bulaevskii L N, Nagaev E L, Khomskii D I *Sov. Phys. JETP* **27** 836 (1968)
137. Chao K A, Spalek J, Oleš A M J. *Phys. C* **10** L271 (1977)
138. Hirsch J E *Phys. Lett. A* **136** 153 (1989)
139. Yushankhai V Yu, Vujcic G M, Zakula R B *Phys. Lett. A* **151** 254 (1990)
140. Вальков В В и др. *Письма в ЖЭТФ* **75** 450 (2002); Val'kov V V et al. *JETP Lett.* **75** 378 (2002)
141. Val'kov V V et al. *Mod. Phys. Lett. B* **17** 441 (2003)
142. Вальков В В, Дзэбисашвили Д М *ЖЭТФ* **127** 686 (2005); Val'kov V V, Dzebisashvili D M J. *Exp. Theor. Phys.* **100** 608 (2005)
143. Коршунов М М, Овчинников С Г, Шерман А В *Письма в ЖЭТФ* **80** 45 (2004); Korshunov M M, Ovchinnikov S G, Sherman A V *JETP Lett.* **80** 39 (2004)
144. Вальков В В, Головня А А *ЖЭТФ* **134** 1167 (2008); Val'kov V V, Golovnya A A J. *Exp. Theor. Phys.* **107** 996 (2008)
145. Spalek J, Oleš A M, Chao K A *Phys. Status Solidi B* **108** 329 (1981)
146. Zhang F C *Phys. Rev. Lett.* **90** 207002 (2003)
147. Abram M et al. *Phys. Rev. B* **88** 094502 (2013)
148. Spalek J, Zegrodnik M, Kaczmarczyk J *Phys. Rev. B* **95** 024506 (2017)
149. Jefferson J H, Eskes H, Feiner L F *Phys. Rev. B* **45** 7959 (1992)
150. Lovtsov S V, Yushankhai V Yu *Physica C* **179** 159 (1991)
151. Schüttler H-B, Fedro A J *Phys. Rev. B* **45** 7588(R) (1992)
152. Belinicher V I, Chernyshev A L *Phys. Rev. B* **47** 390 (1993)
153. Belinicher V I, Chernyshev A L *Phys. Rev. B* **49** 9746 (1994)
154. Belinicher V I, Chernyshev A L, Shubin V A *Phys. Rev. B* **53** 335 (1996)
155. Feiner L F, Jefferson J H, Raimondi R *Phys. Rev. B* **53** 8751 (1996)
156. Raimondi R, Jefferson J H, Feiner L F *Phys. Rev. B* **53** 8774 (1996)
157. Гавричков В А и др. *ЖЭТФ* **118** 422 (2000); Gavrichkov V A et al. *J. Exp. Theor. Phys.* **91** 369 (2000)
158. Gavrichkov V, Borisov A, Ovchinnikov S G *Phys. Rev. B* **64** 235124 (2001)
159. Ramšak A, Prelovšek P *Phys. Rev. B* **40** 2239 (1989)
160. Ramšak A, Prelovšek P *Phys. Rev. B* **42** 10415 (1990)
161. Вонсовский С В *ЖЭТФ* **16** 981 (1946); Vonsovsky S V *Sov. Phys. JETP* **10** 468 (1946)
162. Изюмов Ю А, Кассан-оглы Ф А, Скрябин Ю Н *Полевые методы в теории ферромагнетизма* (М.: Наука, 1974)
163. Изюмов Ю А, Скрябин Ю Н *Базовые модели в теории ферромагнетизма* (Екатеринбург: УрО РАН, 2002)
164. Klee S, Muramatsu A *Nucl. Phys. B* **473** 539 (1996)
165. Chakravarty S, Halperin B I, Nelson D R *Phys. Rev. Lett.* **60** 1057 (1988)
166. Chakravarty S, Halperin B I, Nelson D R *Phys. Rev. B* **39** 2344 (1989)
167. Hasenfratz P, Leutwyler H *Nucl. Phys. B* **343** 241 (1990)
168. Hasenfratz P, Niedermayer F *Phys. Lett. B* **268** 231 (1991)
169. Hasenfratz P, Niedermayer F Z. *Phys. B* **92** 91 (1993)
170. Ding H-Q, Makivić M S *Phys. Rev. Lett.* **64** 1449 (1990)
171. Aligia A A, Simon M E, Batista C D *Phys. Rev. B* **49** 13061 (1994)
172. Kondo J *Prog. Theor. Phys.* **32** 37 (1964)
173. Вальков В В, Дзэбисашвили Д М, Барабанов А Ф *ТМФ* **191** 319 (2017); Val'kov V V, Dzebisashvili D M, Barabanov A F *Theor. Math. Phys.* **191** 752 (2017)
174. Emery V J, Reiter G *Phys. Rev. B* **38** 11938 (1988)
175. Zhang F C, Rice T M *Phys. Rev. B* **41** 7243 (1990)
176. Emery V J, Reiter G *Phys. Rev. B* **41** 7247 (1990)
177. Eskes H, Sawatzky G A, Feiner L F *Physica C* **160** 424 (1989)
178. Littlewood P B et al. *Phys. Rev. B* **39** 12371 (1989)
179. Schrieffer J R, Wolff P A *Phys. Rev.* **149** 491 (1966)

180. Боголюбов Н Н *Лекции по квантовой статистике* (Киев: Наукова думка, 1949); Пер. на англ. яз.: Bogoliubov N N *Lectures on Quantum Statistics* (London: Macdonald, 1968)
181. Тябликов С В *Методы квантовой теории магнетизма* (М.: Наука, 1965); Пер. на англ. яз.: Tyablikov S V *Methods in the Quantum Theory of Magnetism* (New York: Plenum Press, 1967)
182. Starykh O A, Bonfim O F A, Reiter G F *Phys. Rev. B* **52** 12534 (1995)
183. Monthoux P, Balatsky A V, Pines D *Phys. Rev. Lett.* **67** 63448 (1991)
184. Monthoux P, Pines D *Phys. Rev. Lett.* **69** 961 (1992)
185. Monthoux P, Pines D *Phys. Rev. B* **47** 6069 (1993)
186. Изюмов Ю А *УФН* **169** 225 (1999); Izyumov Yu A *Phys. Usp.* **42** 215 (1999)
187. Chubukov A V, Pines D, Stojković B P *J. Phys. Condens. Matter* **8** 10017 (1996)
188. Abanov Ar, Chubukov A V *Phys. Rev. Lett.* **83** 1652 (1999)
189. Abanov Ar, Chubukov A V *Phys. Rev. Lett.* **84** 5608 (2000)
190. Abanov Ar, Chubukov A V, Finkel'stein A M *Europhys. Lett.* **54** 488 (2001)
191. Abanov Ar, Chubukov A V, Schmalian J *Adv. Phys.* **52** 119 (2003)
192. Abanov Ar, Chubukov A V *Phys. Rev. Lett.* **93** 255702 (2004)
193. Bang Y *New J. Phys.* **14** 043030 (2012)
194. Wang Y, Chubukov A V *Phys. Rev. B* **91** 195113 (2015)
195. Tsvelik A M *Phys. Rev. B* **95** 201112(R) (2017)
196. Classen L, Robinson N J, Tsvelik A M *Phys. Rev. B* **99** 115110 (2019)
197. Барабанов А Ф и др. *ЖЭТФ* **110** 1480 (1996); Barabanov A F et al. *J. Exp. Theor. Phys.* **83** 819 (1996)
198. Barabanov A F, Kuzian R O, Maksimov L A *Phys. Rev. B* **55** 4015 (1997)
199. Lau B, Berciu M, Sawatzky G A *Phys. Rev. Lett.* **106** 036401 (2011)
200. Schrieffer J R *J. Low Temp. Phys.* **99** 397 (1995)
201. Moraghebi M et al. *Phys. Rev. B* **63** 214513 (2001)
202. Moraghebi M, Yunoki S, Moreo A *Phys. Rev. Lett.* **88** 187001 (2002)
203. Moraghebi M, Yunoki S, Moreo A *Phys. Rev. B* **66** 214522 (2002)
204. Eremin I, Manske D *Low Temp. Phys.* **32** 519 (2006)
205. Silva Neto M V *Phys. Rev. B* **76** 033103 (2007)
206. Дигор Д Ф, Москаленко В А *ТМФ* **130** 320 (2002); Digor D F, Moskalenko V A *Theor. Math. Phys.* **130** 271 (2002)
207. Borisenko S V et al. *Phys. Rev. Lett.* **84** 4453 (2000)
208. Yoshida T et al. *Phys. Rev. Lett.* **91** 027001 (2003)
209. Zhou X J et al. *Phys. Rev. Lett.* **92** 187001 (2004)
210. Yoshida T et al. *J. Phys. Condens. Matter* **19** 125209 (2007)
211. Wells B O et al. *Phys. Rev. Lett.* **74** 964 (1995)
212. Marshall D S et al. *Phys. Rev. Lett.* **76** 4841 (1996)
213. Ronning F et al. *Phys. Rev. B* **67** 035113 (2003)
214. Shen K M et al. *Phys. Rev. Lett.* **93** 267002 (2004)
215. Shen K M et al. *Phys. Rev. B* **75** 075115 (2007)
216. Tobin J G et al. *Phys. Rev. B* **45** 5563 (1992)
217. Abrikosov A A, Campuzano J C, Gofron K *Physica C* **214** 73 (1993)
218. Gofron K et al. *Phys. Rev. Lett.* **73** 3302 (1994)
219. Dessau D S et al. *Phys. Rev. Lett.* **71** 2781 (1993)
220. King D M et al. *Phys. Rev. Lett.* **73** 3298 (1994)
221. Aebi P et al. *Phys. Rev. Lett.* **72** 2757 (1994)
222. Loeser A G et al. *Science* **273** 325 (1996)
223. Ding H et al. *Nature* **382** 51 (1996)
224. Ding H et al. *Phys. Rev. Lett.* **78** 2628 (1997)
225. Morinari T *J. Phys. Soc. Jpn.* **88** 104707 (2019)
226. Berciu M *Phys. Rev. Lett.* **97** 036402 (2006)
227. Вальков В В, Головня А А, Коровушкин М М *Письма в ЖЭТФ* **94** 215 (2011); Val'kov V V, Golovnya A A, Korovushkin M M *JETP Lett.* **94** 197 (2011)
228. Plakida N M, Oudovenko V S *ЖЭТФ* **146** 631 (2014); *J. Exp. Theor. Phys.* **119** 554 (2014)
229. Seibold G, Sigmund E, Hizhnyakov V *Phys. Rev. B* **48** 7537 (1993)
230. Seibold G, Sigmund E, Hizhnyakov V *Phys. Rev. B* **57** 6937 (1998)
231. Yamase H *Phys. Rev. B* **75** 014514 (2007)
232. Seibold G *Phys. Rev. B* **77** 235109 (2008)
233. Gan J Y et al. *Phys. Rev. B* **78** 094504 (2008)
234. Grusdt F et al. *Phys. Rev. B* **99** 224422 (2019)
235. Kane C L, Lee P A, Read N *Phys. Rev. B* **39** 6880 (1989)
236. Kane C L et al. *Phys. Rev. B* **41** 2653(R) (1990)
237. Martinez G, Horsch P *Phys. Rev. B* **44** 317 (1991)
238. Khaliullin G, Horsch P *Phys. Rev. B* **47** 462 (1993)
239. Ramsak A, Horsch P *Phys. Rev. B* **57** 4308 (1998)
240. Schmitt-Rink S, Varma C M, Ruckenstein A E *Phys. Rev. Lett.* **60** 2793 (1988)
241. Richard J L, Yushankhai V Yu *Phys. Rev. B* **47** 1103 (1993)
242. Feng S, Su Z B, Yu L *Phys. Rev. B* **49** 2368 (1994)
243. Pepino R T, Ferraz A, Kochetov E *Phys. Rev. B* **77** 035130 (2008)
244. Klosinski A et al. *Phys. Rev. B* **101** 035115 (2020)
245. Нараев Э Л *Физика магнитных полупроводников* (М.: Наука, 1979); Пер. на англ. яз.: Nagaev E L *Physics of Magnetic Semiconductors* (Moscow: Mir Publ., 1983)
246. de Gennes P-G *Phys. Rev.* **118** 141 (1960)
247. Lyons K B et al. *Phys. Rev. Lett.* **60** 732 (1988)
248. Lyons K B et al. *Phys. Rev. B* **37** 2353 (1988)
249. Sugai S, Shamoto S, Sato M *Phys. Rev. B* **38** 6436 (1988)
250. Blumberg G et al. *Phys. Rev. B* **53** R11930 (1996)
251. Blumberg G et al. *Science* **278** 1427 (1997)
252. Bourges P et al. *Phys. Rev. Lett.* **79** 4906 (1997)
253. Inui M, Doniach S, Gabay M *Phys. Rev. B* **38** 6631 (1988)
254. Annet J F et al. *Phys. Rev. B* **40** 2620 (1989)
255. Kondo J, Yamaji K *Prog. Theor. Phys.* **47** 807 (1972)
256. Shimahara H, Takada S *J. Phys. Soc. Jpn.* **60** 2394 (1991)
257. Барабанов А Ф, Березовский В М *ЖЭТФ* **106** 1156 (1994); Barabanov A F, Berezovsky V M *J. Exp. Theor. Phys.* **79** 627 (1994)
258. Zwanzig R *Phys. Rev.* **124** 983 (1961)
259. Mori H *Prog. Theor. Phys.* **33** 423 (1965)
260. Roth L M *Phys. Rev. Lett.* **20** 1431 (1968)
261. Плакида Н М и др. *ЖЭТФ* **124** 367 (2003); Plakida N M et al. *J. Exp. Theor. Phys.* **97** 331 (2003)
262. Владимиров А А, Иле Д, Плакида Н М *ТМФ* **152** 538 (2007); Vladimirov A A, Ihle D, Plakida N M *Theor. Math. Phys.* **152** 1331 (2007)
263. Barabanov A F et al. *Письма в ЖЭТФ* **66** 173 (1997); Barabanov A F et al. *JETP Lett.* **66** 182 (1997)
264. Sherman A *Phys. Rev. B* **73** 155105 (2006)
265. Sherman A *Eur. Phys. J. B* **92** 55 (2019)
266. Sherman A *Phys. Scripta* **94** 055802 (2019)
267. Sherman A *Eur. Phys. J. B* **93** 168 (2020)
268. Val'kov V V et al. *J. Low Temp. Phys.* **197** 34 (2019)
269. Mermin N D, Wagner H *Phys. Rev. Lett.* **17** 1133 (1966)
270. Барабанов А Ф, Михеенков А В, Шварцберг А В *ТМФ* **168** 389 (2011); Barabanov A F, Mikheenkov A V, Shvartsberg A V *Theor. Math. Phys.* **168** 1192 (2011)
271. Marshall W *Proc. R. Soc. Lond. A* **232** 48 (1955)
272. Изюмов Ю А, Медведев М В *ЖЭТФ* **59** 553 (1971); Izyumov Y A, Medvedev M V *Sov. Phys. JETP* **32** 302 (1971)
273. Val'kov V V, Dzebisashvili D M, Barabanov A F *J. Supercond. Nov. Magn.* **29** 1049 (2016)
274. Keimer B et al. *Phys. Rev. B* **46** 14034 (1992)
275. Varzykin V, Pines D *Phys. Rev. B* **52** 13585 (1995)
276. Барабанов А Ф, Максимов Л А, Михеенков А В *Письма в ЖЭТФ* **74** 362 (2001); Barabanov A F, Maksimov L A, Mikheenkov A V *JETP Lett.* **74** 328 (2001)
277. Val'kov V, Korovushkin M M *J. Phys. Soc. Jpn.* **80** 014703 (2011)
278. Вальков В В, Коровушкин М М *ЖЭТФ* **139** 126 (2011); Val'kov V V, Korovushkin M M *J. Exp. Theor. Phys.* **112** 108 (2011)
279. Wollman D A et al. *Phys. Rev. Lett.* **71** 2134 (1993)
280. Van Harlingen D J *Rev. Mod. Phys.* **67** 515 (1995)
281. Scalapino D J *Phys. Rep.* **250** 329 (1995)
282. Tsuei C C, Kirtley J R *Rev. Mod. Phys.* **72** 969 (2000)
283. Plakida N M, Oudovenko V S *Eur. Phys. J. B* **86** 115 (2013)
284. Plakida N M *Physica C* **531** 39 (2016)
285. Plakida N M *Physica C* **549** 69 (2018)
286. Зайцев Р О "Исследование перехода металл-диэлектрик", Препринт № ИАЭ-3927/1 (М.: ИАЭ АН СССР, 1984)
287. Fröhlich H *Phys. Rev.* **79** 845 (1950)
288. Толмачев В В *ДАН СССР* **140** 563 (1961)
289. Val'kov V V et al. *J. Low Temp. Phys.* **191** 408 (2018)
290. Fischer M H, Kim E-A *Phys. Rev. B* **84** 144502 (2011)
291. Val'kov V V et al. *J. Magn. Magn. Mat.* **440** 123 (2017)

292. Зубарев Д Н *УФН* **81** 71 (1960); Zubarev D N *Sov. Phys. Usp.* **3** 320 (1960)
293. Val'kov V V, Dzebisashvili D M, Varabanov A F *J. Low Temp. Phys.* **181** 134 (2015)
294. Val'kov V V, Korovushkin M M, Varabanov A F *J. Low Temp. Phys.* **196** 242 (2019)
295. Вальков В В и др. *ЖЭТФ* **155** 1045 (2019); Val'kov V V et al. *J. Exp. Theor. Phys.* **128** 885 (2019)
296. Еремин М В, Малахов М А *Письма в ЖЭТФ* **105** 680 (2017); Eremin M V, Malakhov M A *JETP Lett.* **105** 680 (2017)
297. Еремин М В, Кочергин Д С, Малахов М А *Письма в ЖЭТФ* **108** 810 (2018); Eremin M V, Kochergin D S, Malakhov M A *JETP Lett.* **108** 796 (2018)
298. Carbotte J P et al. *Phys. Rev. B* **81** 014522 (2010)
299. Еремин М В, Сюняев Д А *Письма в ЖЭТФ* **103** 209 (2016); Eremin M V, Sunyaev D A *JETP Lett.* **103** 190 (2016)
300. Hardy W N et al. *Phys. Rev. Lett.* **70** 3999 (1993)
301. Khasanov R et al. *Phys. Rev. Lett.* **98** 057007 (2007)
302. Wojek B M et al. *Phys. Rev. B* **84** 144521 (2011)
303. Sonier J E et al. *Phys. Rev. Lett.* **83** 4156 (1999)
304. Khasanov R et al. *Phys. Rev. Lett.* **99** 237601 (2007)
305. Anukool W et al. *Phys. Rev. B* **80** 024516 (2009)
306. Eremin M V, Larionov I A, Lyubin I E *J. Phys. Condens. Matter* **22** 185704 (2010)
307. Schrieffer J R *Theory of Superconductivity* (New York: W.A. Benjamin, 1964); Пер. на русск. яз.: Шриффер Д *Теория сверхпроводимости* (М.: Наука, 1970)
308. Садовский М В *Диаграмматика. Лекции по избранным задачам теории конденсированного состояния* (Ижевск: РХД, 2010)
309. Tinkham M *Introduction to Superconductivity* (New York: McGraw-Hill, 1996); Пер. на русск. яз.: Тинкхам М *Введение в сверхпроводимость* (М.: Атомиздат, 1980)
310. Vozovic I et al. *Nature* **536** 309 (2016)
311. Panagopoulos C et al. *Phys. Rev. B* **60** 14617 (1999)
312. Lemberger T R et al. *Phys. Rev. B* **82** 214513 (2010)
313. Raghu S et al. *Phys. Rev. B* **85** 024516 (2012)
314. Каган М Ю и др. *Письма в ЖЭТФ* **97** 253 (2013); Kagan M Yu et al. *JETP Lett.* **97** 226 (2013)
315. Каган М Ю и др. *ЖЭТФ* **144** 837 (2013); Kagan M Yu et al. *J. Exp. Theor. Phys.* **117** 728 (2013)
316. Вальков В В и др. *ФНТ* **44** 173 (2018); Val'kov V V et al. *Low Temp. Phys.* **44** 130 (2018)
317. Барабанов А Ф, Белемук А М *Письма в ЖЭТФ* **87** 725 (2008); Barabanov A F, Belemuk A M *JETP Lett.* **87** 628 (2004)
318. Кучинский Э З, Садовский М В *ЖЭТФ* **117** 613 (2000); Kuchinskii E Z, Sadovskii M V *J. Exp. Theor. Phys.* **90** 535 (2000)
319. Кучинский Э З, Садовский М В *ЖЭТФ* **119** 553 (2001); Kuchinskii E Z, Sadovskii M V *J. Exp. Theor. Phys.* **92** 480 (2001)
320. Кучинский Э З, Садовский М В *ЖЭТФ* **121** 758 (2002); Kuchinskii E Z, Sadovskii M V *J. Exp. Theor. Phys.* **94** 654 (2002)
321. Sadovskii M V et al. *Phys. Rev. B* **72** 155105 (2005)
322. Kuchinskii E Z, Nekrasov I A, Sadovskii M V *Phys. Rev. B* **75** 115102 (2007)
323. Кучинский Э З, Некрасов И А, Садовский М В *УФН* **182** 345 (2012); Kuchinskii E Z, Nekrasov I A, Sadovskii M V *Phys. Usp.* **55** 325 (2012)
324. Белемук А М, Барабанов А Ф, Максимов Л А *Письма в ЖЭТФ* **79** 195 (2004); Belemuk A M, Barabanov A F, Maksimov L A *JETP Lett.* **79** 160 (2004)
325. Белемук А М, Барабанов А Ф, Максимов Л А *ЖЭТФ* **129** 493 (2006); Belemuk A M, Barabanov A F, Maksimov L A *J. Exp. Theor. Phys.* **102** 431 (2006)
326. Белемук А М, Барабанов А Ф, Максимов Л А *Письма в ЖЭТФ* **86** 374 (2007); Belemuk A M, Barabanov A F, Maksimov L A *JETP Lett.* **86** 321 (2007)
327. Белемук А М, Барабанов А Ф *Письма в ЖЭТФ* **82** 827 (2005); Belemuk A M, Barabanov A F *JETP Lett.* **82** 731 (2005)
328. Ларионов И А, Барабанов А Ф *Письма в ЖЭТФ* **100** 811 (2014); Larionov I A, Barabanov A F *JETP Lett.* **100** 712 (2014)
329. Барабанов А Ф и др. *УФН* **185** 479 (2015); Barabanov A F et al. *Phys. Usp.* **58** 446 (2015)

Spin-polaron concept in the theory of normal and superconducting states of cuprates

V.V. Val'kov^(1,a), D.M. Dzebisashvili^(1,2,b), M.M. Korovushkin^(1,c), A.F. Barabanov^(3,d)

⁽¹⁾ *Kirensky Institute of Physics,*

Federal Research Center Krasnoyarsk Science Center of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Akademgorodok 50/38, 660036 Krasnoyarsk, Russian Federation

⁽²⁾ *Reshetnev Siberian State University of Science and Technology,*

prosp. im. gazety Krasnoyarskii rabochii 31, 660037 Krasnoyarsk, Russian Federation

⁽³⁾ *Vereshchagin Institute for High Pressure Physics, Russian Academy of Sciences,*

Kaluzhskoe shosse 14, 108840 Troitsk, Moscow, Russian Federation

E-mail: ^(a) vvv@iph.krasn.ru, ^(b) ddm@iph.krasn.ru, ^(c) kmax@iph.krasn.ru, ^(d) abarab@bk.ru

The review discusses the emergence of the spin-fermion model of cuprates and the formation of the spin-polaron concept of the electronic structure of hole-doped cuprate superconductors. This concept has allowed describing the properties of cuprates in the normal phase as well as the features of superconducting pairing in the unified approach. The derivation of the spin-fermion model from the Emery model in the regime of strong electronic correlations is described, demonstrating the appearance of strong coupling between the spins of copper ions and holes on oxygen ions. Such a strong interaction against the background of the singlet state of the spin subsystem of copper ions (quantum spin liquid) leads to the formation of special Fermi quasiparticles — nonlocal spin polarons. Under doping, the spin-polaron ensemble exhibits instability with respect to superconducting d-wave pairing, whereas superconducting s-wave pairing is not implemented. At the optimal doping, the transition to the superconducting phase occurs at temperatures corresponding to experimental data. It is shown that the superconducting d-wave pairing of spin-polaron quasiparticles is not suppressed by the Coulomb repulsion of holes located on neighboring oxygen ions. It is emphasized that, when the spectral characteristics of spin-polaron quasiparticles are taken into account, the calculated temperature and doping dependences of the London penetration depth are in good agreement with experimental data.

Keywords: strongly correlated electron systems, high-temperature superconductivity, spin polarons, intersite Coulomb interaction, London penetration depth

PACS numbers: **71.10.** – w, **71.10.Fd**, **71.27.** + a, **74.20.** – z, **74.20.Mn**, **74.25.N–**, **74.72.** – h

Bibliography — 329 references

Received 22 April 2020, revised 4 July 2020

Uspekhi Fizicheskikh Nauk **191** (7) 673–704 (2021)

Physics – Uspekhi **64** (7) (2021)

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.2020.08.038829>

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNe.2020.08.038829>