

1-688

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

На правах рукописи

17-92-452

ЛОВЦОВ
Сергей Владимирович

УДК 538.945

**ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА В МОДЕЛЯХ
С СИЛЬНЫМИ КОРРЕЛЯЦИЯМИ**

Специальность: 01.04.02 - теоретическая и
математическая физика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Дубна 1992

Работа выполнена в Лаборатории Теоретической Физики
Объединенного института ядерных исследований.

Научный руководитель - доктор физико - математических наук, профессор Плахида Н.М.

Официальные оппоненты:

д.ф.м.н. Барабанов А.Ф.

д.ф.м.н. Иванов В.А.

Ведущая организация: ИАЭ им. Курчатова

Защита состоится " ____ " _____ 1992 г.

в ____ часов на заседании специализированного совета К047.01.01 при
Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных
исследований
(г. Дубна, Московской области).

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке
Лаборатории Теоретической Физики ОИЯИ

Автореферат разослан " ____ " _____ 1992 г.

Ученый секретарь
специализированного совета ЛТФ ОИЯИ кандидат физико-математических
наук
Дорохов А.Е.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. К системам с сплывшими электронными корреляциями относятся вещества, у которых характерная энергия кулоновского взаимодействия (U) электронов больше или порядка ширины зоны. Интерес к ним в последние годы исключительно возрос в связи с обнаружением сильных корреляций в высокотемпературных сверхпроводниках (ВТСП), открытых Беднорцем и Мюллером в 1986 году. Эти вещества, обладая различными кристаллическими структурами, имеют общий структурный элемент в виде медно-оксидных слоев. В настоящее время на основе совокупности экспериментальных данных понято, что способностью проводить электрический ток сверхпроводники обязаны движению дырок в решетке сильно гибридованных медных и кислородных орбиталей плоскости CuO_2 . При этом отмечается наличие сильного кулоновского отталкивания дырок на узлах меди с энергией U_d . Физическим проявлением этих корреляций является близость сверхпроводящих составов к переходу металл-диэлектрик, к антиферромагнитному переходу и наличие локализованных магнитных моментов в меди. Наиболее реалистичная с микроскопической точки зрения модель, способная описать физические свойства слоев CuO_2 в ВТСП является $p-d$ модель Эмери. Гамильтониан этой модели получается при помощи обобщения простой модели Хаббарда на случай описания дырочных состояний в плоскости CuO_2 . С точки зрения описания физических характеристик ВТСП системы актуальным является исследование низко энергетических свойств этой модели. В этом случае для модели Эмери можно выделить два физических режима отвечающих различной степени гибридизации V между медными и кислородными орбиталями. Во первых, это спин-

флуктуационный режим соответствующий слабой $Cu - O$ гибридизации. Этот предел модели исследовался в большом количестве работ. Второй режим, зарядово-флуктуационный, отвечает сильной $Cu - O$ гибридизации. Этот предел модели не был исследован систематически. Хотя, как следует из численных значений параметров модели Эмери, оцененных на основе экспериментальных данных, именно этот режим должен описывать физические свойства ВТСП соединений. В этой связи представляется актуальным изучение электронных, магнитных, и сверхпроводящих свойств модели Эмери в зарядово-флуктуационном режиме.

Цель работы. - Целью данной диссертационной работы является систематическое исследование сильно коррелированной ($p-d$) модели Эмери в зарядово-флуктуационном режиме.

Научная новизна. В предлагаемой диссертационной работе дан систематический анализ сильно коррелированной модели Эмери в зарядово-флуктуационном режиме. Предложено обобщение преобразования Шриффера-Вольфа и на этой основе получено последовательное редуцирование модели Эмери в сильно коррелированном пределе. В этом подходе получен и проанализирован эффективный гамильтониан описывающий взаимодействия до третьего порядка по малому параметру V/U . Впервые сформулирована синглет-триплетная (СТ) модель являющаяся обобщением $t - J$ гамильтониана на случай зарядово-флуктуационного режима модели Эмери. Впервые в рамках СТ модели получен закон дисперсии свободного движения дырочного носителя над антиферромагнитным фоном. Впервые для СТ модели в парамагнитном пределе методом двухвременных функций Грина рассчитана зонная структура и плотности состояний дырочных носителей в диэлектрической фазе. На этой основе дана интер-

претация ряда данных в фотоэмиссионных экспериментах.

На защиту выносятся следующие положения:

1. На основе преобразования Шриффера-Вольфа дан систематический вывод эффективных взаимодействий до третьего порядка по V/U . Выведенный эффективный гамильтониан описывает низко энергетические свойства плоскости CuO_2 в оксидных сверхпроводниках в зарядово-флуктуационном режиме. Дана оценка сверхобменных констант магнитного взаимодействия спинов на узлах меди. Показано, что разрушение антиферромагнитного порядка в области концентраций дырок $x < 0.2$ на элементарную ячейку не может быть объяснено с учетом лишь эффектов сверхобменного $Cu-Cu$ взаимодействия.

2. На основе анализа модели Эмери методом двухвременных функций Грина, выведена самосогласованная схема расчета свойств сверхпроводящего состояния с гибридным ($p-d$) параметром порядка. Получено ограничение на симметрию этого сверхпроводящего параметра порядка.

3. Развита схема редукиции модели Эмери в зарядово-флуктуационном режиме к эффективному гамильтониану описывающему электронные свойства CuO_2 плоскости в терминах локальных синглетных и триплетных состояний. Показано, что синглет-триплетная (СТ) модель содержит гамильтониан $t-t'-J-J'$ модели в качестве главного слагаемого.

4. В рамках СТ модели получен закон дисперсии свободного движения дырочного носителя над антиферромагнитным фоном.

5. Для СТ модели в парамагнитном пределе, методом проектирования двухвременных функций Грина, рассчитана зонная структура и плотность состояний дырочных носителей. Показано, что закон дисперсии синглетной зоны аналогичен закону дисперсии медной зоны но имеет

более узкую ширину. На этой основе дана интерпретация ряда данных в фотоэмиссионных экспериментах.

Практическая ценность. Приведенные в диссертационной работе теоретические исследования посвящены расчету ряда электронных, магнитных и сверхпроводящих свойств сильно коррелированной модели Эмери в зарядово-флюктуационного режиме. А именно рассчитана зонная структура дырочных носителей в плоскости CuO_2 оксидных сверхпроводников. Исследован механизм фрустраций в системе магнитно взаимодействующих спинов меди, а также механизм сверхпроводящего спаривания с гибридным параметром порядка. Приведенные в диссертационной работе результаты могут быть полезными при дальнейшем исследовании модели Эмери, а также при интерпретации экспериментальных данных полученных при исследовании веществ характеризующихся сильными корреляциями, в частности в оксидных сверхпроводниках.

Апробация работы.

Материалы диссертации докладывались и обсуждались на следующих конференциях и семинарах: 19 Международная конференция по физике низких температур (Брайтон, Великобритания 16-22 авг. 1990г.), Уральская школа молодых ученых по теории твердого тела (Екатеренбург 1990 г.), Советско-Германский симпозиум по ВТСП (С-Петербург 6-13 окт. 1991 г.), Российско-Германский семинар по теоретической физике (Дубна 18-20 июня 1991 г.), научные семинары Лаборатории Теоретической физики ОИЯИ, кафедры теоретической физики Иркутского университета, института Макса-Планка (Штуттгарт Германия), Лейпцигского университета (Германия).

Публикации. Основные результаты диссертации опубликованы в 7 работах, перечень которых приводится в конце автореферата.

Структура и объем диссертации. Диссертационная работа состоит из введения, трех оригинальных глав, заключения и списка цитируемой литературы из 89 наименований. Общий объем диссертации - 100 страница машинописного текста, в том числе 11 рисунков и 1 таблица.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении приводится краткий обзор современного состояния теории вопросов, рассматриваемых в диссертационной. Обосновывается актуальность темы, определяются цель и задачи работы. Описана структура диссертации, изложено краткое содержание каждой главы.

Первая глава диссертационной работы посвящена систематическому построению низко энергетического эффективного гамильтониана на пространстве векторов гильбертова пространства не содержащих дважды занятых состояний на узлах меди. Гамильтониан построен с точностью до третьего порядка по малому параметру V/U_d . На основе полученных эффективных взаимодействий проанализирован механизм фрустрации системы локализованных медных спинов. Полученно ограничение на симметрию возможного сверхпроводящего параметра порядка в этой модели.

В пунктах 1.1-1.3 Формулируется гамильтониан модели Эмери

$$H = \epsilon_d \sum_{i\sigma} d_{i\sigma}^+ d_{i\sigma} + \sum_{im\sigma} V_{im} (d_{i\sigma}^+ c_{m\sigma} + c_{m\sigma}^+ d_{i\sigma}) + U_d \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \sum_{mno} t_{mn} c_{m\sigma}^+ c_{n\sigma}$$

здесь $d_{i\sigma}^+$ ($d_{i\sigma}$) и $c_{m\sigma}^+$ ($c_{m\sigma}$) операторы рождения(уничтожения) дырок на медных (i) и кислородных (m) узлах соответственно. Параметр гибридизации V_{im} отличен от нуля только для ближайших узлов. Параметры модели CuO_2 плоскости ВТСП-соединении рассчитанные из первых принципов на основе экспериментальных данных имеют величины (в эВ) $|\epsilon_d| \cong 2, |V| \cong 1.5, U_d \cong 8$ и $t \cong 0.5$. Приведенные значения параметров отвечают зарядово-флюктуационному режиму модели Эмери ($V \leq U_d, \Delta$). Далее формулируется процедура построения генераторов преобразования

Шриффера-Вольфа. На его основе строится эффективный гамильтониан с точностью до третьего порядка по малому параметру $V/(U_d - \Delta)$. Особое внимание уделено проблеме магнитного взаимодействия локальных медных спинов. Показано, что степень фрустрации, а именно, отношение сверхобменных интегралов между вторыми и первыми $Cu - Cu$ ближайшими соседями, мала. Тем самым, делается вывод, что сверхобменное взаимодействие не может обеспечить существенной фрустрации медных спинов и перехода системы из антиферромагнитного в неупорядоченное состояние. Полученный результат дополняет результаты работы Иле и Каснера по аналогичной проблеме исследованной ими в пределе $U_d = \infty$ в спин флюктуационном режиме.

Пункты 1.4-1.5 посвящены изучению механизма гибридного сверхпроводящего спариванию в модели Эмери. Во втором порядке по параметру гибридизации эффективный гамильтониан $p-d$ модели в сильно коррелированном режиме содержит антиферромагнитное взаимодействие между спинами на узлах меди и кислорода. Данное взаимодействие можно представить в виде аналогичном слагаемому, описывающего сверхпроводящее обменное спаривание в модели типа БКШ, что послужило поводом для исследования сверхпроводящего спаривания в этой модели. Этот вопрос анализировался с помощью метода проектирования двухвременных функций Грина для операторов Хаббарда.

Было показано, что линейризованные уравнения движения дают решения для $d-d$, $p-p$ и $d-p$ аномальных функций Грина отличных от нуля в силу существования корреляционной функции $\Delta = \sum_m < X_i^{10} C_{m1}^+ - X^{10} C_{m1}^+ > \neq 0$. Первая из которых ($d-d$ аномальная функция грин) содержит в себе дополнительное кинематическое уравнение са-

мосогласования $\langle X_i^{\sigma_0} | X_i^{\bar{\sigma}_0} \rangle \equiv 0$. Показано, что единственной возможностью удовлетворить этому уравнению можно если положить $\Delta = 0$. В этом случае вместе с Δ обращаются в нуль все аномальные функции Грина. Другими словами данный метод запрещает сверхпроводящее гибридное спаривание для случая S -волны в исследованной модели.

Вторая глава посвящена редукции модели Эмери в зарядово-флуктуационном режиме к эффективной синглет-триплетной модели.

В 2.1 дается краткий обзор проблемы редукции модели Эмери к однозонной t - J модели в зарядово-флуктуационном режиме. Отмечается, что ключевым моментом в этой проблеме является отсутствие малого параметра разложения в этом режиме т.к. $V/\Delta \sim 1/2$.

В 2.2-2.5 показано, что в результате перехода к описанию дырочных операторов на кислородных узлах в терминах Ванье представления двух подрешеточная модель Эмери переходит однорешеточному своему аналогу. При этом максимальная гибридизация дырочных состояний происходит на одном узле $V_0 = 0.96V$, а гибридизация между дырочными состояниями на разных узлах $V_{ij} \leq 0.14V$ ($=0.14V$ на соседних узлах) и очень быстро падает с расстоянием $(i-j)$.

Это позволяет учесть одноузельную гибридизацию точно, а по возникшему малому параметру V_{ij}/Δ произвести разложение методом канонического преобразования Шриффера-Вольфа. В результате формулируется эффективная синглет-триплетная (СТ) модель (в терминах синглетных и триплетных дырочных состояний) как низко энергетический предел модели Эмери. Результат расчета эффективных энергетических констант СТ модели как функций от параметров исходной модели приводится на рисунках. При этом отмечается, что обобщенный гамильто-

ниан t - J модели (а именно, t - t' - J - J' гамильтониан) входит в СТ модель в качестве главного слагаемого, что наиболее ярко проявляется именно в зарядово-флуктуационном режиме исходной модели Эмери. Результаты расчетов сравнивались с результатами полученными кластерным методом Хуберстеном и др. для коэффициентов t - t' - J - J' модели. Отмечено, что численные значения параметров полученный в обоих расчетах находятся в хорошем соответствии между собой.

Третья глава предлагаемой диссертационной работы посвящена построению законов дисперсии квазичастичных состояний в рамках полученной синглет-триплетной модели в режиме малого допирования.

В 3.1-3.2 исследуется канал когерентного движения дырочного носителя (синглета) над основным антиферромагнитным состоянием. за счет перескоков между следующими за ближайшими соседями в решетке а также за счет перескоков через виртуальное состояние триплетного сектора. Используя фермион-бозонное представление для операторов Хаббарда выделяется слагаемое в гамильтониане СТ модели отвечающее за свободное прыжковое движение дырочного носителя над антиферромагнитным основным состоянием. Энергетическая матрица этого кинетического члена в импульсном представлении дает нам закон дисперсии свободного движения дырочных носителей над указанным основным состоянием. Показано, что полученный закон дисперсии приводит к так называемому четырех "карманному" типу поверхности Ферми с минимумом закона дисперсии в точках $[\pm\pi/2, \pm\pi/2]$ исходной зоны Бриллюэна.

в 3.3-3.6 изучается спектр возбуждений синглет-триплетной модели в парамагнитной фазе. Данный режим реализуется после разрушения магнитного порядка спиновой решетки за счет допирования системы

дырками. В этих пунктах методом проектирования двухвременных функций Грина исследуются нормальные электронные свойства синглет-триплетной модели в парамагнитной фазе. Так пункты 3.3-3.5 посвящены построению системы самосогласованных уравнений на функции Грина для синглетных и триплетных состояний. Одновременно самосогласованные уравнения строятся для функций Грина описывающих медный сектор (отвечающий заполнению узла не более чем одной дыркой). Эти уравнения решались численно. В результате были построены законы дисперсии и плотности состояний дырочных носителей при различных значениях параметров модели Эмери в изоляторной фазе.

Анализируя результаты численного счета, выполненные изоляторной фазе ($n=1$) отмечено, что синглетная зона качественно имеет дисперсию сходную с дисперсией антисвязывающей (в электронной картине) гибридной зоны преимущественно d типа. Только ширина ее более узкая и в допированном случае ($n < 1$) уровень Ферми лежит внутри синглетной зоны. Это позволило проинтерпретировать ряд данных полученных в фотоэмиссионных, с разрешением по углу, экспериментах по измерению зонной структуры в пользу того, что наблюдаемый в эксперименте уровень Ферми пересекает синглетную зону которая таким образом и регистрируется в экспериментах. Построена диаграмма разделяющая области параметров СТ модели отвечающих металлической и диэлектрической фазе. На основе рассчитанной плотности дырочных состояний показано, что синглетная зона носит преимущественно p -характер.

В заключении перечислены основные положения выносимые на защиту.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Получено разложение модельного гамильтониана Эмери для CuO_2 плоскости в режиме сильных корреляций с точностью до 4 порядка по гибридизации. Определена роль эффективного суперобменного члена для фрустрации спинов на подрешетке узлов меди в зависимости от дырочного допирования.
2. Получено, в рамках метода проектирования двухвременных функций Грина, ограничение на симметрию гибридного p - d сверхпроводящего параметра порядка для сильно коррелированной модели Эмери.
3. Построена эффективная синглет - триплетная модель низкоэнергетических возбуждений плоскости CuO_2 в режиме зарядовых флуктуаций из модели Эмери.
4. Получен энергетический спектр свободного движения одной дырки над антиферромагнитным основным состоянием в синглет-триплетной модели. Сделан вывод, что минимумом закона дисперсии лежит в точках $[\pm\pi/2, \pm\pi/2]$ зоны Бриллюэна.
5. На основе метода двухвременных функций Грина построен и проанализирован энергетический зонный спектр и плотность состояний для синглет-триплетной модели в диэлектрической фазе над парамагнитным основным состоянием. Сделан вывод о том, что закон дисперсии синглетной зоны аналогичен закону дисперсии d -зоны. В допированном случае уровень ферми лежит в синглетной зоне. Показано, что синглетная зона имеет почти чисто кислородный характер.

Основные результаты диссертации опубликованы в
следующих работах:

1. S.V.Lovtsov, N.M.Plakida, V.Yu.Yushankhai On superconducting pairing in the two-band Hubbard model Phys. B 165 & 166 (1990) 1007-1008
2. S.V.Lovtsov, N.M.Plakida, V.Yu.Yushankhai On superconducting pairing in the two-band Hubbard model. Z. Phys. B - Condensed Matter 82 (1991) 1-4
3. S.V.Lovtsov, V.Yu.Yushankhai Schriffer-Wolff Transformation of the $p - d$ Model for Oxide Superconductors: charge fluctuation regime. Phys. Stat. sol. (B) 166 (1991) 209-217
4. S.V.Lovtsov, V.Yu.Yushankhai Effective singlet-triplet model for CuO_2 plane in oxide superconductors: charge fluctuation regime. Phys. C 179 (1991) 159-166
5. S.V.Lovtsov, F.P.Onufrieva, V.Yu.Yushankhai Coherent motion of a singlet by hole doping in the CuO_2 plane of oxide superconductors Intern. Journal of Mod. Phys.B (to be published)
6. R.Hayn, V.Yu.Yushankhai, S.V.Lovtsov The bandstructure of the copper-oxide plane within the singlet-triplet model. Труды Сов-Герм. симпозиума по ВТСП, С-Петербург 6-13 октября 1991 г.
7. R.Hayn, V.Yu.Yushankhai, S.V.Lovtsov Analysis of the singlet - triplet model for copper oxide plane within the paramagnetic state Phys. Rev B (to be published)

Рукопись поступила в издательский отдел
6 ноября 1992 года.