

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

17-98-312

На правах рукописи
УДК 538.945

Д-40

ДЖАКЕЛИ
Георгий Важаевич

**ДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОРРЕЛИРОВАННЫХ
ЭЛЕКТРОНОВ В СИСТЕМАХ НИЗКОЙ РАЗМЕРНОСТИ**

Специальность: 01.04.02 — теоретическая физика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Дубна 1998

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики им.
Н.Н.Боголюбова Объединенного института ядерных исследований

Научные руководители:

доктор физико-математических наук
профессор

Н.М. Плакида

кандидат физико-математических наук

В.Ю. Юшанхай

Официальные оппоненты:

член-корреспондент РАН

доктор физико-математических наук
профессор

Ю.А. Изюмов

(ИФМ, г. Екатеринбург)

доктор физико-математических наук

А.В. Барабанов

(ИФВД, г. Троицк)

Ведущая организация:

Российский Научный Центр "Курчатовский институт", г. Москва.

Защита диссертации состоится " _____ " _____ 1998 года на заседании диссертационного совета К047.01.01 Лаборатории теоретической физики им. Н.Н.Боголюбова Объединенного института ядерных исследований, г. Дубна Московской области.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Объединенного института ядерных исследований.

Автореферат разослан " _____ " _____ 1998 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета
доктор физико-математических наук



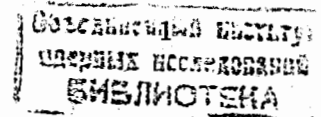
А.Е. Дорохов

Актуальность проблемы

Открытие Беднорцем и Мюллером в 1986 г. явления высокотемпературной сверхпроводимости в медно-оксидных соединениях вызвало беспрецедентно высокую активность в изучении физических свойств этих систем. Благодаря существенному прогрессу в технологии синтеза высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП), удалось получить высококачественные монокристаллические образцы и исследовать их основные физические свойства. Экспериментальные исследования обнаружили, что эти соединения обладают целым рядом необычных свойств. К таким свойствам ВТСП относится близость к переходу металл - диэлектрик, антиферромагнитное упорядочение с высокой температурой Нееля, высокая температура сверхпроводящего перехода, сильная анизотропия, малая длина когерентности.

С теоретической точки зрения, наиболее важным представляется вопрос о механизме спаривания, приводящем к высокой температуре сверхпроводящего перехода. С этим вопросом тесно связана другая, не менее интересная проблема - описание электронных свойств ВТСП в нормальной фазе, которая также характеризуется рядом свойств, выходящих за рамки стандартного фермижидкостного поведения. Электрическая и термическая проводимость, скорость ядерной релаксации, температурная зависимость коэффициента Холла, частотная зависимость оптической проводимости и интенсивности рамановского рассеяния являются аномальными.

Несмотря на многочисленные исследования не существует однозначной теоретической интерпретации ряда физических свойств нормального состояния и механизма высокотемпературной сверхпроводимости. Большинство моделей предполагает, что, несмотря на все многообразие кристаллических структур, основную роль в ВТСП играют медно-оксидные плоскости CuO_2 - общий элемент этих соединений. В настоящее время на основе совокупности экспериментальных данных установлено, что электропроводимость ВТСП обусловлено движением дырок именно в этих плоскостях. Экспериментальные исследования также указывают на сильную гибридизацию



медных и кислородных орбиталей, а также на наличие сильного кулоновского отталкивания электронов на узлах меди, которое приводит к сильным электронным корреляциям в плоскостях CuO_2 . О присутствии сильных корреляций в ВТСП говорят такие свойства, как наличие дальнего антиферромагнитного порядка в нелегированных образцах и близость к переходу металл - диэлектрик. Было обнаружено, что эффекты сильных электронных корреляций не удается описать в рамках стандартной зонной теории металлов, поэтому необходима разработка новых подходов в теории твердых тел. В связи с этим возникает необходимость исследования микроскопических моделей, которые включали бы в себя наличие электронных корреляций. К таким моделям относится стандартная модель Хаббарда, многозонная $p-d$ модель и $t-J$ модель. Наиболее строгие результаты в этой области были получены с помощью численных методов, таких как метод Монте-Карло и метод точной диагонализации Ланкцоша для конечных систем. Однако в первом методе трудно работать с низкими температурами и высокими концентрациями, а во втором пока основное ограничение связано с размерами кластера - число переменных, описывающих состояния кластера, экспоненциально растет с увеличением числа частиц в нем. Результаты численных методов дают возможность оценить правильность приближений, используемых в аналитических подходах.

В этой связи представляется актуальным изучение физических свойств микроскопических моделей коррелированных электронов аналитическими методами.

Следует отметить, что семейство медных оксидов пополнено в последнее время квазиодномерными соединениями, известными как "спиновые лестницы". Многие физические свойства новых соединений, а также базисные модели, положенные в основу их исследования, сходны с ВТСП составами. По этой причине изучение одномерных систем с сильными электронными корреляциями также приобретает особую актуальность.

Цель диссертации

Целью диссертационной работы является исследование влияния эффектов корреляций на динамические свойства электронных систем низкой размерности в рамках спин-поляронной и $t-J$ моделей

сверхпроводимости, а также одномерной расширенной модели Хаббарда.

Научная новизна

Построена фазовая диаграмма основного состояния одномерной расширенной двухзонной модели Хаббарда с учетом взаимодействий, описывающих коррелированные прыжки электронов. Показано, что альтернирование кулоновского отталкивания на узлах может приводить к открытию щели в спектре зарядовых возбуждений. Выявлено влияние различных взаимодействий на структуру основного состояния. На основе $t-J$ модели в самосогласованном борновском приближении исследовано обратное время жизни однодырочных возбуждений вблизи поверхности Ферми в режиме малого допирования. Показано, что затухание однодырочных возбуждений имеет форму, характерную для двумерной нормальной ферми-жидкости в отличие от раннего утверждения о маргинальном характере поведения квазидырок.

Впервые в рамках метода функции памяти исследованы спектры коллективных возбуждений в $t-J$ модели. Вычислены спектр спиновых и зарядовых флуктуаций, оптическая проводимость в парамагнитной фазе $t-J$ модели.

Научная и практическая значимость работы

Полученный результат о Ферми-жидкостном поведении ансамбля дырочных возбуждений имеет важное значение для описания и предсказания различных свойств высокотемпературных сверхпроводников. Развитый в диссертационной работе метод функции памяти с использованием операторов Хаббарда позволяет получить хорошее согласие с результатами численных расчетов для спектров коллективных возбуждений и дать объяснение аномальной частотной зависимости проводимости, наблюдаемой в ВТСП. Этот подход строго учитывает нефермиевскую статистику частиц с сильными корреляциями и может быть использован для изучения других моделей коррелированных электронов.

Основные результаты, выносимые на защиту

1. Построена фазовая диаграмма основного состояния для одно-

мерной модели Хаббарда с альтернированным взаимодействием на узлах на основе ренормгруппового подхода. Показано, что в случае $1/4$ -заполнения зоны альтернирование взаимодействия приводит к открытию щели в спектре зарядовых возбуждений.

2. В рамках одномерной расширенной двухзонной модели Хаббарда с учетом взаимодействий, описывающих коррелированные прыжки электронов, определена структура основного состояния системы. Построена фазовая диаграмма основного состояния в широком интервале значений параметров модели и выявлено влияние различных взаимодействий на структуру основного состояния.
3. На основе спин-поляронной модели медных оксидов рассчитан перенормированный в результате дырочного допирования системы спектр магнонных возбуждений. С учетом перенормировки магнонного спектра рассчитано затухание однодырочных состояний вблизи поверхности Ферми. Показано, что затухание имеет форму $\Gamma(\mathbf{k}, \varepsilon) \propto (\varepsilon^2/\varepsilon_F) \ln(\varepsilon/\varepsilon_F)$ характерную для двумерной ферми-жидкости.
4. В рамках формализма функции памяти с использованием операторов Хаббарда выведены самосогласованные уравнения для динамической спиновой восприимчивости в $t-J$ модели. Показано, что спиновая динамика имеет диффузионный характер в гидродинамическом пределе, в то время как в коротковолновом высокочастотном пределе существуют возбуждения типа спиновых волн.
5. Вычислены динамическая зарядовая восприимчивость и оптическая проводимость в $t-J$ модели. Показано, что в длинноволновом пределе спектр зарядовых флуктуаций дается затухающей звуковой модой. Вычислены скорость и затухание звука. В коротковолновом пределе выявлено существование широкого максимума с характерной энергией $\sim t$ в спектре зарядовых флуктуаций. Получено обобщенное друдовское поведение оптической проводимости и рассчитаны ее характеристики.

Апробация работы

Материалы, представленные в диссертации, докладывались на следующих конференциях и семинарах: Симпозиум по физике конденсированного состояния "Коуровка-96", г. Ижевск, 13–19 февраля, 1996г.; международная школа "Сильно коррелированные системы и критические явления", г. Дубна, 26 августа–05 сентября, 1997г.; международная школа-симпозиум по физике конденсированного состояния "Коуровка-98", 2–7 марта, 1998г.; международная конференция "Сильно коррелированные электронные системы", Париж, Франция, 15–18 июля, 1998г.; научных семинарах в Лаборатории теоретической физики им. Боголюбова, ОИЯИ, института атомной физики (Бухарест, Румыния), университета г. Салерно (Салерно, Италия), Международного центра теоретической физики (Триест, Италия).

Публикации

По материалам диссертации опубликовано 6 работ.

Структура и объем работы

Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения и списка цитируемой литературы. Общий объем диссертации – 107 страниц машинописного текста, в том числе 9 рисунков и 5 таблиц.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении обсуждаются некоторые аспекты нетрадиционных свойств характерных для высокотемпературных сверхпроводников, отмечаются наиболее важные вопросы теории ВТСП, дается краткое содержание и формулируется основная цель диссертации.

Первая глава посвящена описанию возможных моделей ВТСП. Дан короткий обзор существующих феноменологических подходов, обсуждена электронная структура CuO_2 плоскостей, приведены микроскопические модели и результаты для спектра однодырочных возбуждений в нормальной фазе. Глава состоит из трех разделов.

В разделе 1.1 дается краткое описание существующих феноменологических моделей ВТСП. Обсуждаются основные отличия меж-

ду ферми-жидкостными и неферми-жидкостными подходами. Рассматриваются концепции маргинальной и почти антиферромагнитной ферми-жидкости.

Схема формирования электронной структуры для плоскостей CuO_2 на примере соединения La_2CuO_4 обсуждается в разделе 1.2. Здесь же приводятся наиболее известные модельные гамильтонианы, среди них – многозонный гамильтониан модели Эмери и гамильтониан стандартной модели Хаббарда.

В 1.3 рассматривается $t - J$ модель, которая является одной из основных моделей, описывающих высокотемпературные сверхпроводники. Обсуждаются трудности теоретического исследования данной модели. Дается физическая картина движения дырки на фоне антиферромагнитного (АФМ) порядка и описывается процесс образования спинового полярона. Приводятся результаты для спектра однодырочных возбуждений как в АФМ так и в парамагнитной фазе $t - J$ модели.

Во второй главе исследуется структура основного состояния расширенной модели Хаббарда на альтернирующей цепочке с учетом взаимодействий, описывающих коррелированные прыжки электронов. Глава состоит из трех разделов.

В разделе 2.1 приводится краткий обзор ренормгруппового подхода, который используется для построения фазовой диаграммы основного состояния системы.

В 2.2 рассматривается фазовая диаграмма основного состояния для одномерной модели Хаббарда с альтернированным взаимодействием U_a на четных и U_b на нечетных узлах. Для исследования низкоэнергетических свойств данной модели строится континуальный предел решеточного гамильтониана. Рассматривается случай $1/4$ -заполненной зоны, когда динамическая неэквивалентность узлов становится важным и ведет к возникновению процесса переброса с константой связи равной $g_3 = U_a - U_b$. Далее используется стандартная схема ренормгруппового подхода для анализа основного состояния системы. Вычисляются значения констант взаимодействий для фиксированных точек и критические экспоненты для функций отклика, описывающих тенденции синглетного и триплетного куперовского спаривания и образования волны зарядовой и спиновой плотно-

сти. На основе этих результатов построена фазовая диаграмма основного состояния системы в терминах затравочных констант взаимодействий. Показано что альтернирование взаимодействия приводит к открытию щели в спектре зарядовых возбуждений. В зависимости от знака и относительных значений затравочных констант взаимодействий при $T = 0$ система стремится к сверхпроводящему или антиферромагнитному упорядочению.

Расширенная модель Хаббарда на альтернирующей цепочке с двумя неэквивалентными узлами на элементарную ячейку с учетом взаимодействий, описывающих коррелированные прыжки электронов, рассматривается в разделе 2.3. Используется каноническое преобразование, диагонализующее одночастичный гамильтониан в приближении сильной связи для введения взаимодействий типа Хаббарда (одноузельное, междуузельное, прыжки пар, обменные перескоки и взаимодействие "связь-узел") в соответствующей двухзонной модели. Рассматривается случай большой величины щели между зонами, когда можно ограничиться процессами рассеяния в частично заполненной зоне. Двухзонная структура приводит к дополнительной зависимости от концентрации электронов эффективных констант взаимодействий (g_i -констант), описывающих элементарные процессы рассеяния. Аналогичным методом построена фазовая диаграмма системы и выявлено влияние различных взаимодействий на структуру основного состояния для произвольного заполнения верхней зоны. Показано, что эффект взаимодействия "связь-узел" заключается в перенормировке одноузельного взаимодействия. Критическое значение междуузельного взаимодействия контролирует на фазовой диаграмме позицию "зарядовой-линии", линии разделяющей сверхпроводящую область от области волны зарядовой плотности. "Спиновая-линия", линия отделяющая область синглетных состояний от области возможных триплетных состояний, задается критическим значением константы обменных перескоков. В цепочках CuO_3 , которые являются элементами некоторых ВТСП соединений, заполнение близко к $3/4$. Показано, что в случае $3/4$ -заполнения и для реалистических значений решеточных параметров основное состояние системы характеризуется сосуществованием волн зарядовой и спиновой плотности. На подрешетке с меньшим эффективным одноузельным отталкиванием возникает волна зарядовой плотности, а

на другой подрешетке – волна спиновой плотности.

В последнем разделе суммируются результаты данной главы.

Материалы гл.2 опубликованы в работах [1,2].

В третьей главе в рамках спин-поляронной модели исследуются перенормировка магнетонного спектра и затухание однодырочных возбуждений в режиме малого легирования. Глава состоит из четырех разделов.

В разделе 3.1 на основе $t - J$ модели при помощи метода вспомогательных фермионных полей выводится гамильтониан спин-поляронной модели в одноподрешеточном представлении. В качестве основного состояния принимается неелевский антиферромагнетик. Далее методом уравнений движения для двухвременных функции Грина в самосогласованном борновском приближении выводится система уравнений для дырочной и магнетонной матричной функции Грина. Самосогласованная система уравнений исследуется аналитическим образом.

В разделе 3.2, на основе хорошо известных результатов для спектральной функции одной дырки на антиферромагнитном фоне, исследуется перенормировка магнетонного спектра, вызванная наличием носителей. Показано, что с увеличением концентрации носителей некогерентное движение дырок приводит к смягчению длинноволновых магнетонов. При концентрации легированных дырок $\delta > \delta_c \simeq 0.04$ перенормированный магнетонный спектр попадает в "частично-дырочный" континуум, полюс магнетонной функции Грина становится чисто мнимым, и длинноволновые магнетоны теряют свою индивидуальность, что указывает на разрушение дальнего антиферромагнитного порядка в спиновой подсистеме.

В разделе 3.2 перенормированный спектр магнетонов используется для вычисления мнимой части массового оператора носителей, которая определяет обратное время жизни квазичастиц. Показано, что затухание однодырочных возбуждений вблизи поверхности Ферми описывается известной формой $\text{Im}\Sigma(\mathbf{k}', \epsilon) \propto (\epsilon^2/\epsilon_F) \ln(\epsilon/\epsilon_F)$, характерной для двумерной ферми-жидкости. Это указывает на существование хорошо определенных квазичастиц на поверхности Ферми в данной системе.

В последнем разделе главы обсуждаются полученные результаты.

Результаты этой главы опубликованы в работе [3].

В четвертой главе исследуются спектры зарядовых и спиновых флуктуаций в парамагнитной фазе $t - J$ модели. Вычисляются динамическая спиновая и зарядовая восприимчивость и оптическая проводимость.

В разделе 4.1 описывается общий формализм метода функции памяти.

В 4.2 на основе формализма функции памяти с использованием операторов Хаббарда выведены самосогласованные уравнения для динамической спиновой восприимчивости. Функция памяти, представленная в виде неприводимой части многочастичной функции Грина, вычислена в приближении взаимодействующих мод. Показано, что в выражении для функции памяти имеются два различных по природе вклада: первый вклад от подсистемы делокализованных дырок возникает за счет кинематического взаимодействия; и второй вклад – от системы локализованных спинов, взаимодействующих посредством гейзенберговского обмена. Существование этих двух вкладов в явном виде описывает конкуренцию между локализованным и зонным магнетизмом. Используемый в данной работе подход позволяет в едином приближении описать как низко-, так и высокочастотные магнитные свойства системы. Показано, что в гидродинамическом пределе спиновая динамика имеет диффузионный характер, в то время как в высокочастотном пределе могут существовать возбуждения типа спиновых волн. Показано, что последний предел воспроизводит результат для спиновой восприимчивости, полученный ранее в рамках теории Кондо и Ямаджи.

В разделе 4.1 аналогичным методом вычисляется динамическая зарядовая восприимчивость. Функция памяти представляется в виде неприводимой части корреляционной функции "сила-сила" и вычисляется в приближении взаимодействующих мод. Выражение для функции памяти содержит в себе два члена: первый член описывает вклад от парных возбуждений частица-дырка, второй – включает в себя процесс рассеяния электронов на спиновых и зарядовых флуктуациях. Самосогласованная система уравнений для зарядовой восприимчивости далее исследуется аналитическим образом. Показано, что в длинноволновом пределе спектр зарядовых флуктуаций дается

затухающей звуковой модой. Вычислены скорость и затухание звука. В коротко-волновом пределе выявлено существование широкого максимума с характерной энергией $\sim t$ в спектре зарядовых флуктуаций. Проведено сравнение полученных результатов с результатами точной диагонализации.

Оптическая проводимость $\sigma(\omega)$ вычисляется в разделе 4.3. Для $\sigma(\omega)$ получен обобщенный закон Друде с функцией релаксации, обусловленной рассеянием электронов на спиновых и зарядовых флуктуациях. Показано, что зависимость функции релаксации от частоты имеет вид $\omega^{3/2}$ при $\omega < 2|\mu|$ и описывается линейным законом при $\omega > 2|\mu|$, где μ – химический потенциал системы.

В разделе 4.4 суммируются результаты данной главы.

Результаты этой главы опубликованы в работах [4-6].

В **Заключении** кратко сформулированы основные результаты диссертации, которые выносятся на защиту.

Основные результаты диссертации опубликованы в работах:

1. G. Jackeli and G. Japaridze,
Renormalization group approach to the one-dimensional 1/4-filled Hubbard model with alternating on-site interactions,
Int. J. Mod. Phys. B 11, p. 1925-1936 (1997)
2. G. Jackeli and V. Yu. Yushankhai,
Normal Fermi liquid behavior of quasiholes in the spin-polaron model for copper oxides,
Phys. Rev. B 56, p. 3540-3543 (1997)
3. Г. Джакели, Н.М. Плакида,
Динамическая спиновая восприимчивость в $t - J$ модели,
ТМФ 114, с. 426-438 (1998).
4. F. D. Buzatu and G. Jackeli,
"Alternating chain with Hubbard-type interactions: Renormalization group analysis",
Phys. Lett. A 246 p. 163-171 (1998).
5. G. Jackeli and N.M. Plakida,
"Spin and charge fluctuations in the $t - J$ model",
Proc. International Conference on Strongly Correlated Electron Systems, (July 15-18, 1998, Paris, France)
Physica B (1998) (в печати).
6. G. Jackeli and N. M. Plakida,
"Charge dynamics and optical conductivity of the $t - J$ model"
Препринт ОИЯИ, E-17-98-251 (1998)
(направленно в Phys. Rev. B).

Рукопись поступила в издательский отдел
3 ноября 1998 года.