



ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

17-99-41

На правах рукописи
УДК 538.915; 538.945

10-95

ЮШАНХАЙ
Виктор Юлиевич

**ЭФФЕКТЫ СИЛЬНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ
В МОДЕЛЯХ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ
СВЕРХПРОВОДНИКОВ**

Специальность: 01.04.02 — теоретическая физика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Дубна 1999

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

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

Официальные оппоненты:

член-корр. РАН,

профессор

член-корр. НАН Украины,

профессор

член-корр. РАН,

профессор

Ю.А. Изюмов

В.М. Локтев

Л.А. Максимов

Ведущее научно-исследовательское учреждение:

Санкт-Петербургский институт ядерной физики РАН,

г. Санкт-Петербург.

Защита диссертации состоится "____" _____ 1999 г. на заседании диссертационного совета Д047.01.01 в Лаборатории теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова Объединенного института ядерных исследований по адресу: г. Дубна, Московской области.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Объединенного института ядерных исследований.

Автореферат разослан "____" _____ 1999 г.

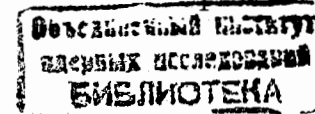
Ученый секретарь совета
кандидат физико-математических наук


В.И. Журавлев

Актуальность темы. Открытие в 1986 году Беднорцем и Мюллером явления высокотемпературной сверхпроводимости в медно-оксидных соединениях поставило перед теорией твердого тела ряд фундаментальных вопросов, среди которых проблема сильных электронных корреляций приобрела первостепенное значение. Действительно, уже первые расчеты, выполненные в рамках стандартных методов зонной теории, показали, что заложенный в этих методах одночастичный подход не дает адекватного описания основного состояния и спектра возбужденных состояний электронной системы медных оксидов. Причина заключена в наличии на ионах меди сильного внутриузельного кулоновского отталкивания U_d , основные эффекты которого не могут быть аппроксимированы на уровне среднего поля в рамках одночастичного подхода. В самых общих чертах проблема может быть исследована на основе модели Хаббарда в пределе $U \gg t$, где t -интеграл перескока электрона. Более последовательное и полное описание с учетом особенностей мультиорбитальной структуры медных оксидов достигается в рамках $p-d$ модели Эмери, являющейся трех-зонным вариантом модели Хаббарда.

Исходная $p-d$ модель Эмери, как минимальная реалистическая модель плоскости CuO_2 - общего структурного элемента всех высокотемпературных сверхпроводящих медно-оксидных соединений, призвана описать электронные состояния в верхней части валентной зоны купратов. В стандартных условиях слабых полей и невысоких температур часть электронных степеней свободы, отвечающих высоковозбужденным состояниям исходной модели, становится несущественной. Эти степени свободы могут быть устранены ("выпроектированы") путем надлежащей редукции исходной модели к ее низкоэнергетическому пределу. При этом учет высокоэнергетических состояний посредством виртуальных переходов приводит к эффективным взаимодействиям на масштабе $< 1 \text{ eV}$. Формулировка и обоснование процедуры редукции, а также вывод эффективных низкоэнергетических моделей представляют собой актуальную проблему теории высокотемпературных сверхпроводящих (ВТСП) систем.

Эффективные базисные модели ВТСП систем компактно представляются в терминах проекционных (хаббардовских) операторов, имеющих более сложные перестановочные соотношения по сравнению с



каноническими Ферми- и Бозе-операторами. Используемые рядом исследователей диаграммные методы в терминах операторов Хаббарда ведут к значительным техническим усложнениям, что ограничило их широкое применение. Требуется привлечение и обоснование дополнительных методов и подходов, основанных, к примеру, на представлении модели в терминах вспомогательных (фермион-бозонных, либо псевдоспиновых) полей. Формулировка вспомогательных представлений, их математическое обоснование и применение для расчета физических величин представляют собой важную проблему теории сильно коррелированных систем.

Эффекты химического замещения в буферных слоях ВТСП соединений приводят к росту концентрации δ дырочных носителей в CuO_2 плоскости, что ведет к быстрому разрушению дальнего антиферромагнитного (АФМ) порядка с последующим переходом системы в металлическую фазу. Сильное взаимодействие дырочного носителя с 2х-мерными спиновыми корреляциями в значительной степени определяют его квазичастичные свойства и, как следствие, ряд необычных термодинамических и транспортных свойств ВТСП систем. В этой связи разработка теории "маргинальных электронных жидкостей", а также описание на ее основе спектра квазичастиц и механизма их сверхпроводящего спаривания с высокой критической температурой T_c представляется важнейшей проблемой физики ВТСП систем.

При построении теории квазичастичных свойств купратов следует принять во внимание существенное различие в поведении системы в режимах низкой, $\delta < 0.1$ (несколько процентов), и промежуточной степени, $\delta \sim 0.1 \div 0.2$, допирования CuO_2 - плоскости. Так измеряемая в фотоэмиссионном (ARPES) эксперименте форма закона дисперсии дырочного носителя в диэлектрической фазе исходного медно-оксидного состава совместима с представлением о малой поверхности Ферми в виде четырех дырочных карманов в режиме $\delta \sim 0.01$. В то же время при $\delta \sim 0.1 \div 0.2$ (режим оптимальный для сверхпроводимости) фотоэмиссионные измерения демонстрируют "большую" поверхность Ферми иной топологии с особенностями типа псевдощели и плоского участка в спектре одночастичных возбуждений в нормальной фазе. Систематический теоретический анализ всей совокупности экспериментальных данных в рамках единой универсальной модели в настоящее время крайне необходим.

Обнаружение в металлической фазе медно-оксидных соединений

в заметном интервале допирования хорошо развитых АФМ корреляций породило ряд гипотез о возможности сверхпроводящего спаривания носителей через магнитные степени свободы. Разработка спин-флуктуационного механизма сверхпроводимости в последние годы представляет собой одно из наиболее перспективных и активно развиваемых направлений в теории ВТСП.

Цель диссертации: в рамках многозонных электронных моделей с учетом сильного внутриузельного кулоновского отталкивания сформулировать и обосновать последовательную процедуру вывода эффективных редуцированных моделей и на их основе дать описание совокупности электронных и магнитных свойств медно-оксидных соединений.

Научная новизна и практическая ценность.

Впервые предложена последовательная схема редукции многозонной $p-d$ модели для CuO_2 плоскости к ее низкоэнергетическому пределу (кластерный метод теории возмущений). Формулировка метода основана на применении процедуры точной диагонализации для минимального кластера CuO_4 и последующего учета межкластерного взаимодействия по теории возмущений, что позволяет осуществить вывод эффективных низкоэнергетических моделей с контролируемой точностью.

В рамках метода впервые выведена синглет-триплетная модель и даны оценки для ее параметров. Полученная при этом малость параметра синглет-триплетного межкластерного смешивания при большой величине синглет-триплетного расщепления позволила обосновать концепцию синглета Жанга-Райса, как высокостабильного двухчастичного состояния, в режиме сильной $p-d$ гибридизации. На основе предложенного метода определены численные оценки для матричных элементов зонного движения синглетов и констант эффективного АФМ обмена локализованных спинов.

Впервые на основе выведенной $t-t'-t''-J$ модели проведен расчет квазичастичных характеристик дырочного носителя. Обнаружен пороговый характер затухания квазидырок, что приводит к исчезновению в заметных областях зоны Бриллюэна когерентного квазидырочного состояния. Показано, что ряд характерных особенностей квазичастичного дырочного движения, обнаруженных в ARPES экспери-

ментах, получает объяснение лишь в рамках обобщенной $t-t'-t''-J$ модели.

Впервые на основе стандартной $t-J$ модели дан анализ зависимости от величины радиуса АФМ корреляций формы закона дисперсии дырочного носителя как спин-полярона малого радиуса, что позволяет подтвердить сценарий перехода от "четырёх-карманного" типа дырочной поверхности Ферми к большой поверхности Ферми при разрушении АФМ корреляций.

В рамках $t-J$ модели в спин-поляронном представлении впервые дан вывод в самосогласованном борновском приближении системы уравнений для одночастичной дырочной и спиновой функций Грина при конечной температуре и проанализирована зависимость от температуры T и дырочной концентрации δ спектральных характеристик и импульсного распределения квазидырок. В пределе слабого допирования, $\delta \ll 1$ и $T = 0$, впервые в схеме полного самосогласования аналитически получена форма закона затухания квазидырок вблизи поверхности Ферми.

Результаты расчета квазичастичного спектра дырочного носителя получили прямое практическое применение и количественное подтверждение при интерпретации экспериментальных ARPES данных в ряде купратных соединений.

Предложено новое фермион-псевдоспиновое представление для $t-J$ модели, которое имеет ряд преимуществ по сравнению с ранее известными фермион-бозонными представлениями этой модели.

На основе уравнений сверхпроводимости для $t-J$ и $p-d$ моделей в операторах Хаббарда впервые получены кинематические условия, исключаящие s -волновую симметрию параметра порядка.

На защиту выдвигаются следующие результаты.

1. Предложен и разработан метод редукции от многозонной $p-d$ модели Хаббарда к эффективным моделям, описывающим электронные свойства CuO_2 плоскости высокотемпературных сверхпроводящих соединений в низкоэнергетическом пределе.

2. В рамках выведенной эффективной синглет-триплетной модели проведен расчет энергетического спектра дырочных носителей в парамагнитной области. Обоснована возможность дальнейшей редукции от синглет-триплетной к обобщенной $t-J$ модели. Дан вывод эффек-

тивного $t-t'-t''-J$ гамильтониана и сформулирована однозначная процедура вычисления его параметров через параметры исходной многозонной модели.

3. Развита вариационный подход в спин-поляронной теории низкоэнергетических квазичастичных свойств ВТСП систем. Дан количественный анализ изменения формы квазичастичного спектра – как результат эволюции от спин-поляронного состояния малого радиуса к состоянию квазисвободного движения носителя с уменьшением радиуса АФМ корреляций.

4. Дано количественное описание спектральных свойств дырочного носителя в плоскости CuO_2 в АФМ состоянии на основе выведенной $t-t'-t''-J$ модели в самосогласованном борновском приближении. Найден механизм порогового затухания когерентных квазидырочных состояний.

5. Предложено обобщение схемы самосогласованного расчета квазичастичных свойств дырочных носителей на случай конечных температур и концентраций носителей. На этой основе в рамках спин-поляронной $t-J$ модели дан количественный анализ изменения спектральной плотности, квазичастичного затухания и функции распределения по импульсам ансамбля квазидырок.

6. Дан вывод эффективной двухзонной электронной модели для плоскости Cu_3O_4 медных оксихлоридов. Сделано теоретическое предсказание о наличии в спектре системы двух сортов синглетных состояний дырочного носителя. Осуществлено прямое сравнение результатов теоретических расчетов с данными фотоэмиссионного измерения в $\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_4\text{Cl}_2$, которое подтвердило сделанное предсказание.

7. Предложено представление операторов Хаббарда и $t-J$ модели в терминах бесспиновых фермионов и псевдоспиновых операторов $s = 1/2$.

8. В приближении среднего поля с использованием операторов Хаббарда дан вывод уравнений сверхпроводимости и осуществлен их численный анализ для $t-J$ и $p-d$ моделей. Сформулированы ограничения в форме одноузельных кинематических условий на симметрию сверхпроводящего спаривания, как следствие учета сильных электронных корреляций.

Апробация работы. Результаты, изложенные в диссертации, докладывались на семинарах Лаборатории теоретической физики ОИЯИ,

Санкт-Петербургского института ядерной физики, Центра теоретической физики в г. Марселе, университета г. Салерно, Дрезденского технического университета, в институтах Макса Планка в Штутгарте и Дрездене, а также на международном совещании "Механизмы высокотемпературной сверхпроводимости", Дубна, 1988; международном семинаре по Высокотемпературной сверхпроводимости, Санкт-Петербург, 1991; на международных конференциях по Высокотемпературной сверхпроводимости, Дубна, 1989; по Физике низких температур, Брайтон, 1990; "Материалы и механизмы сверхпроводимости", Гренобль, 1994; "Полярны и биполярны в высокотемпературных сверхпроводниках и родственных материалах", Кембридж, 1994; "Сильно коррелированные электронные системы", Цюрих (1996) и Париж (1998); и на школах по теоретической физике "Кауровка" (1992, 1996).

Публикации. По материалам диссертации опубликована 21 работа.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, 5 глав, заключения, двух приложений и списка литературы. Она содержит 174 страницы машинописного текста, 34 рисунка и 5 таблиц. Список литературы включает 182 наименования.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении дан краткий обзор современного состояния теории электронных свойств ВТСП соединений. Обоснована принципиальная роль сильных электронных корреляций и необходимость их учета в рамках обобщенной многозонной модели Хаббарда. Указан способ построения ее низкоэнергетического предела в форме эффективных редуцированных моделей. Сформулирована цель работы, обоснована актуальность проведенных в диссертации исследований, их новизна и практическая ценность. Изложено краткое содержание диссертации.

В первой главе изложен кластерный метод теории возмущений, позволяющий редуцировать многозонную (мультиорбитальную) модель Хаббарда к ее низкоэнергетическому пределу. Метод реализован на примере ее трехзонного варианта ($p-d$ модель Эмери для плоскости CuO_2) в три этапа. На первом этапе выделяется элементарный кла-

стер CuO_4 , для которого методом точной диагонализации находятся собственные векторы $|ia\rangle$ (молекулярные орбитали) и их собственные значения ε_a в одно- и двухчастичных секторах. Ортогонализация молекулярных орбиталей достигается предварительным построением в исходном пространстве p -орбиталей функций Ванье, центрированных на узлах i медных ионов. Тем самым, внутрикластерные взаимодействия учтены в гамильтониане нулевого порядка

$$H_{\text{loc}} = \sum_{i,a} \varepsilon_a X_i^{aa}, \quad X_i^{aa} = |ia\rangle\langle ia|.$$

На этом этапе определяются подпространства низко- и высоколежащих кластерных состояний. Сильное энергетическое расщепление подпространств, как эффект нулевого порядка, возникает, в основном, в результате сильной внутрикластерной $p-d$ гибридизации орбиталей. На втором этапе проектированием исходного гамильтониана на полное пространство векторов $|ia\rangle$ выделяются остаточные взаимодействия

$$H_{\text{hop}} = \sum_{ij,\sigma} \sum_{a,a',b,b'} [t_{ij,\sigma}(a', a|b', b) + \tilde{t}_{ij,\sigma}(a', a|b', b)] X_i^{a'a} X_j^{b'b}$$

$$t_{ij,\sigma}(a', a|b', b) = 2t^{pd}\lambda_{ij} [\langle a'|d_\sigma^\dagger|a\rangle \langle b'|p_\sigma|b\rangle + \langle a'|p_\sigma^\dagger|a\rangle \langle b'|d_\sigma|b\rangle] - t^{pp}\mu_{ij} \langle a'|p_\sigma^\dagger|a\rangle \langle b'|p_\sigma|b\rangle$$

$$\tilde{t}_{ij,\sigma}(a', a|b', b) = t^{pp}\nu_{ij} [\langle a'|p_\sigma^\dagger|a\rangle \langle b'|\tilde{p}_\sigma|b\rangle + \langle a'|\tilde{p}_\sigma^\dagger|a\rangle \langle b'|p_\sigma|b\rangle],$$

описывающие процессы диагональных и недиагональных межкластерных переходов. Диагональные переходы в низкоэнергетическом подпространстве рассматриваются как процессы первого порядка. Точность их учета обеспечивается быстрым падением амплитуд $\sim \lambda_{ij}, \mu_{ij}, \nu_{ij}$ межкластерных переходов как функций расстояния $|i-j|$. Наконец, процессы межкластерного взаимодействия второго порядка включаются в рассмотрение путем учета высоколежащих кластерных состояний как виртуальных. Возможность такого подхода основана на наличии эффективных малых параметров $t_{ab}^{\text{eff}}/\Delta_{ab}^{\text{eff}}$, где $t_{ab}^{\text{eff}}(\Delta_{ab}^{\text{eff}})$ есть матричный элемент (характерная энергия) недиагонального прыжкового перехода дырочного носителя.

На промежуточной ступени редукции $p-d$ модель сведена к эффективной двухзонной синглет-триплетной модели. В парамагнитном пределе в приближении среднего поля рассчитаны зонный спектр $E(\vec{k})$, величина объема V_F в k -пространстве, покрываемая дырочной поверхностью Ферми, как функции дырочной концентрации δ . Количественно исследованы эффекты межзонного переноса спектрального веса и межзонного синглет-триплетного смешивания.

На конечной ступени редукции формулируется однозонная $t-t'-t''-J$ модель, описывающая движение дырочного носителя (синглета Жанга-Райса) с учетом трехузельных прыжковых процессов. В отличие от аналогичных подходов, развиваемых другими авторами, предложенный в диссертации метод редукции позволяет установить однозначное количественное соответствие между параметрами эффективной $t-t'-t''-J$ модели и исходной $p-d$ модели. В заключении главы рассмотрено расширение исходной $p-d$ модели до ее 5-зонного варианта путем учета $d_{3z^2-r^2}$ - и апексных p_z -орбиталей. Обсуждены границы применимости описания медных оксидов на основе однозонной $t-t'-t''-J$ модели.

Во второй главе изучены квазичастичные свойства дырочного носителя в двумерной спиновой системе с дальним и ближним АФМ порядком. Гамильтониан выведенный в первой главе $t-t'-t''-J$ модели представлен в виде $H = \hat{K} + \hat{T} + H_J$, где

$$\begin{aligned}\hat{K} &= \sum_{i b \sigma} \tilde{t}_b X_i^{0\sigma} X_{i+b}^{\sigma 0}, \\ \hat{T} &= t^S \sum_{i a_1 a_2 \sigma_1 \sigma_2} \bar{\delta}_{a_1, -a_2} X_i^{0\sigma_1} X_{i+a_1}^{\sigma_1 \sigma_2} X_{i+a_1+a_2}^{\sigma_2 0}, \\ H_J &= J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j.\end{aligned}$$

В кинетической части \hat{K} прыжковым движениям дырочного носителя по решетке отвечают амплитуды $\tilde{t}_b (= t_1, \tilde{t}_2, \tilde{t}_3)$. Спин-флуктуационные трехузельные прыжковые процессы описываются операторной формой \hat{T} с амплитудами t^S , где символ $\bar{\delta}_{a_1, -a_2}$, определяет геометрию прыжкового движения.

В вариационном подходе построен набор базисных функций, отражающий полярную "струнную" структуру носителя в магнитной решетке, решено секулярное уравнение и найден его спектр. Дан численный анализ изменения формы зонного спектра $E(\vec{k})$ спин-полярно-

ного носителя при а) последовательном усложнении гамильтониана от стандартного $t-J$ варианта ($\tilde{t}_2 = \tilde{t}_3 = t^S = 0$) до полной $t-t'-t''-J$ модели и б) уменьшении радиуса АФМ корреляций ξ в магнитной подсистеме. С помощью факторизации X -операторов $X_i^{\sigma 0} = f_i b_{i\sigma}^\dagger$ (где бесспиновый фермион f_i ассоциируется с зарядовыми, а швингеровский бозон $b_{i\sigma}^\dagger (\sigma = \uparrow, \downarrow)$ - со спиновыми степенями свободы), в предположении о дальнем АФМ порядке в системе сформулировано вспомогательное представление $t-t'-t''-J$ модели и спектральные свойства дырочного носителя рассчитаны в самосогласованном борновском приближении. Показано, что по мере усложнения модели, т.е. включением t' , t'' - взаимодействий, достигается более полное количественное соответствие между рассчитанными характеристиками (формой квазичастичного зонного спектра $E(\vec{k})$ и его затуханием) и результатами их измерений в фотоэмиссионном эксперименте. В численных и аналитических расчетах выявлена причина наблюдаемого в эксперименте сильного, порогового по типу, затухания квазичастичного состояния в верхней части зоны.

Сформулировано новое фермион-псевдоспиновое представление операторов Хаббарда и $t-J$ модели. Различные, но связанные унитарным преобразованием, формы гамильтониана модели в новом представлении могут быть реализованы в зависимости от характера магнитного упорядочения в спиновой подсистеме. Показано, что новое представление не нарушает инвариантности гамильтониана при операции обращения времени. Вместе с тем, фермион-псевдоспиновое представление не устраняет необходимость учета дополнительных условий для исключения нефизических состояний в конкретных расчетах. Плодотворность нового представления показана на примере расчета спектра дырочного носителя в спин-жидкостном состоянии магнитной подсистемы.

Третья глава посвящена изучению электронных свойств нестандартного представителя медно-оксидного семейства, а именно, соединения $\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_4\text{Cl}_2$, имеющего Cu_3O_4 плоскость в качестве основного структурного элемента. На основе известных результатов зонных расчетов для этого соединения в работе автора диссертации сформулирована 11-зонная модель Хаббарда. Применением кластерного метода теории возмущений эта модель редуцирована к ее низкоэнергетическому пределу - двойной $t-J$ модели. Модель описывает движение синглета Жанга-Райса в двух пространственно разделенных и слабо

гибридирующих А- и В- подсистемах плоскостных орбиталей.

Показано, что геометрическая по своей природе фрустрация магнитного взаимодействия спиновых А- и В- подсистем приводит в области промежуточных температур к существованию двух различных квантовых состояний синглета в Cu_3O_4 плоскости. Так в А- подсистеме формируется спин-полянное состояние синглета с зонной дисперсией

$$E_k^{(A)} = E_0^{(A)} + 0.55J_{AA} (\cos k_s + \cos k_d)^2 + \lambda (\cos k_s - \cos k_d)^2 .$$

В то же время, в В- подсистеме для синглета характерно лишь корреляционное сужение зоны с результирующей дисперсией

$$E_k^{(B)} = E_0^{(B)} + t_B (\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) .$$

Сравнение (рис. 1) теоретических результатов с измеренным в ARPES эксперименте законом дисперсии фотодырочного состояния в верхней части валентной зоны $\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_4\text{Cl}_2$ соединения полностью подтвердили выводы теории.

Количественные оценки, полученные методом кластерной теории возмущений, для констант (J_{AA} , J_{BB} и J_{AB}) андерсоновского сверхобмена находятся в хорошем согласии с известными экспериментальными данными для этих величин.

В четвертой главе квазичастичные свойства ансамбля дырочных носителей исследуются в рамках спин-полянного представления стандартной $t - J$ модели. Методом неприводимых двухвременных функций Грина самосогласованная схема расчета в борновском приближении обобщена на случай конечных температур T и невысоких дырочных концентраций $\delta < 0.1$. Собственно-энергетическая часть $\Sigma(\vec{k}, \omega)$ дырочной функции Грина

$$G^{-1}(\vec{k}, \omega) = \omega + \mu - \Sigma(\vec{k}, \omega),$$

имеет вид

$$\Sigma(\vec{k}, \omega) = \frac{(zt)^2}{N} \sum_{\vec{q}} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega_1 d\omega_2 [N(\omega_2) + 1 - n(\omega_1)] \times \frac{A(\vec{k} - \vec{q}, \omega_1) \chi_{\vec{k}, \vec{q}}(\omega_2)}{\omega - \omega_1 - \omega_2 + i\eta},$$

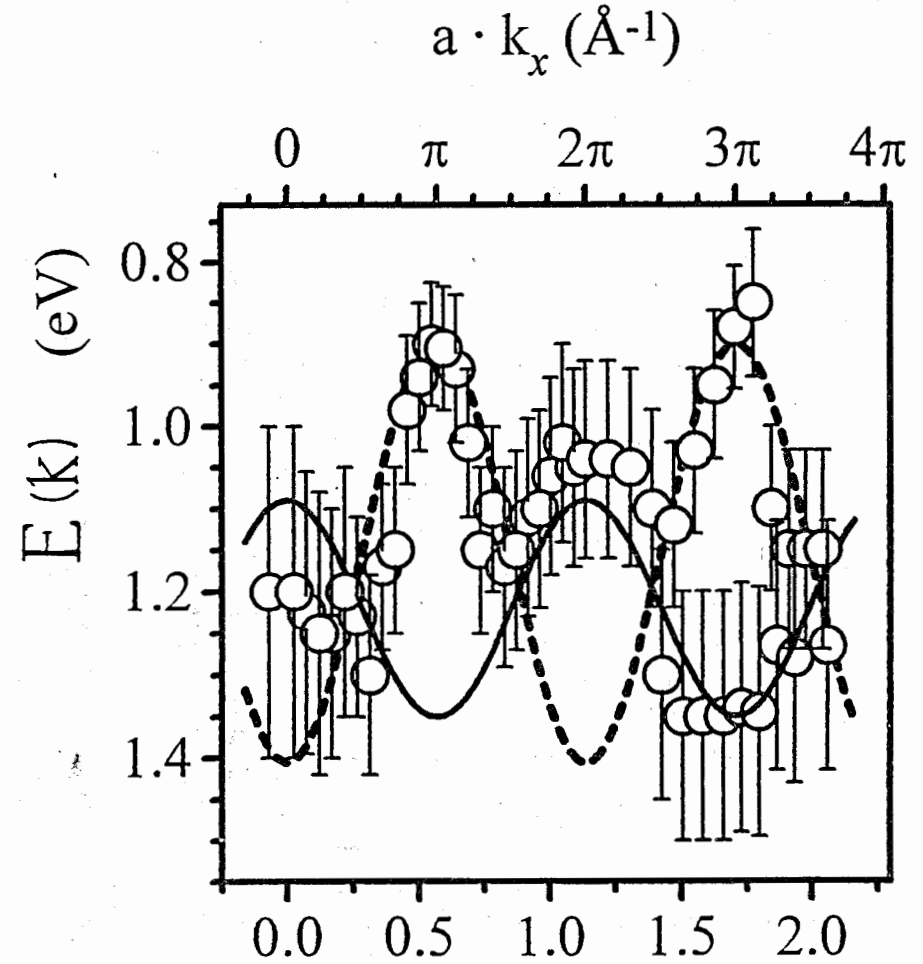


Рис. 1. Результаты измерений в ARPES эксперименте дисперсии (представлено кружками) в направлении $(k_x, 0)$ для фотодырочного состояния в верхней части валентной зоны $\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_4\text{Cl}_2$. Для сравнения приведены теоретические зависимости формы дисперсии для двух состояний синглета Жанга-Райса.

где $N(\omega)$ и $n(\omega)$ – функции распределения Бозе и Ферми, соответственно; $A(\vec{k}, \omega) = -\pi^{-1} \text{Im}G(\vec{k}, \omega + i\eta)$ и эффективная спектральная функция $\chi_{\vec{k}, \vec{q}}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \sum_{\alpha\beta} g_{\alpha\beta}(\vec{k}, \vec{q}) \text{Im}D_{\alpha\beta}(\vec{q}, \omega)$ отвечает спиновым флуктуациям, взаимодействующим с дырочным \vec{k} -состоянием. Схема замыкается введением уравнений самосогласования для поляризационной части $\Pi_{\alpha\beta}(\vec{q}, \omega)$ матричной магنونной функции Грина $D_{\alpha\beta}(\vec{q}, \omega)$ и для химического потенциала μ .

В приближении неперенормированных магнонов самосогласованный численный анализ спектральной функции $A(\vec{k}, \omega)$ и затухания $\Gamma(\vec{k}, \omega) = -\text{Im}\Sigma(\vec{k}, \omega)$ выявил высокую степень стабильности квазичастичных состояний дырочных носителей (квазидырок) с ростом δ и T . "Четырех-карманная" структура функции распределения $N(\vec{k})$ квазидырок по импульсам, однако, полностью размывается при достижении относительно невысокой температуры вырождения $T_d \simeq 1.5J\delta$ с последующим переходом, при $T > T_d$, ансамбля квазидырок в невырожденный режим поведения.

Результаты численного расчета спектральной плотности $A(\vec{k}, \omega)$ дырочных носителей использованы при изучении эффектов их влияния на перенормировку магنونного спектра. С учетом перенормировки магнонов проведен аналитический расчет затухания квазичастичных дырочных состояний вблизи поверхности Ферми. Показано, что при $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_F$ затухание имеет зависимость

$$\text{Im}\Sigma(\vec{k}, \varepsilon) \propto f(|\vec{k}\vec{k}_i|)(\varepsilon^2/\varepsilon_F) \ln(\varepsilon/\varepsilon_F),$$

характерную для нормальной двумерной ферми-жидкости. Тем самым, по-существу, в рамках данного модельного подхода произведена верификация предположения о ферми-жидкостном поведении ансамбля квазидырок при $T = 0$.

В пятой главе представлены результаты исследования магнитного механизма сверхпроводящего спаривания, полученные в рамках стандартной $t - J$ модели, а также $p - d$ модели.

Уравнения для матричной функции Грина

$$G_{ij}^{\sigma}(t - t') = \langle\langle X_i^{\sigma}(t) | X_j^{\dagger\sigma}(t') \rangle\rangle$$

с двухкомпонентными X -операторами, например, $X_i^{\dagger\sigma} = (X_i^{\dagger 0\sigma}, X_i^{0\sigma})$, выведены в приближении среднего поля с учетом аномального спари-

вания квазичастиц. Эффективные взаимодействия учтены линейной аппроксимацией уравнения движения

$$i\dot{X}_i^{\sigma}(t) = [X_i^{\sigma}, \mathcal{H}] = \sum_l A_{il}^{\sigma} X_l^{\sigma}(t) + Z_i^{\sigma}(t).$$

Неприводимая часть $Z_i^{\sigma}(t)$, отвечающая неупругим процессам рассеяния квазичастиц, в данном подходе опущена в полной аналогии с БКШ теорией среднего поля. Развитый формализм в терминах исходных операторов Хаббарда обеспечивает строгий учет эффектов сильных электронных корреляций по сравнению с аналогичными теориями, основанными на использовании метода вспомогательных полей.

В данном подходе сформулирована система самосогласованных уравнений для одночастичного спектра $E_{\vec{k}}$, включая щелевую функцию $\Delta_{\vec{k}}$, химического потенциала μ и средней энергии системы $\langle H \rangle_{n,s}$ в нормальной и сверхпроводящей фазах, как функций электронной концентрации n ($n \leq 1$) и температуры T . Численный анализ уравнений осуществлен как для s -, так и для d - волнового спаривания, и получена концентрационная зависимость температуры сверхпроводящего перехода $T_c^{s;d}(n)$.

Важнейшим выводом теории является запрет на сверхпроводящее спаривание с s - волновой симметрией. Запрет возникает из точного равенства для равновесного среднего от операторов Хаббарда в виде $\langle X_i^{\sigma 0} X_i^{\bar{\sigma} 0} \rangle = 0$. В рамках развитой приближенной теории для $t - J$ модели это условие выступает в форме кинематического ограничения

$$\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{\Delta_{\vec{k}}}{2E_{\vec{k}}} \tanh(E_{\vec{k}}/2T) = 0,$$

которое нарушается в случае s - волновой симметрии щелевой функции $\Delta_{\vec{k}}^s$ и выполняется для d - волновой симметрии $\Delta_{\vec{k}}^d$. Аналогичный подход развит также для двухзонной $p - d$ модели.

В заключении дана сводка основных результатов, полученных в диссертации.

В двух приложениях представлены технические детали вывода некоторых математических соотношений, использованных в основном тексте диссертации.

1. N. Plakida, V. Yushankhai and I. Stasyuk "On the role of kinematic and exchange interactions in superconducting pairing of electrons in the Hubbard model", Physica C **160** (1989) pp. 80-88.
2. N. Plakida, V. Yushankhai and I. Stasyuk "On d-wave pairing in one band Hubbard model", Physica C **162-164** (1989), pp. 787-788.
3. N. Plakida, V. Yushankhai and I. Stasyuk "On d-wave pairing in one band Hubbard model", Proc. Intern. Conf. "High-Temperature Superconductivity" (Dubna, 28 June - 1 July 1989) World Scientific (1989), pp. 508-513.
4. V. Yushankhai, G. Vujicic and R. Zakula "Singlet pairing in the single-band Hubbard model: contributions of second order in t/U ", Phys.Lett.A **151** (1990), pp. 254-256.
5. S. Lovtsov, N. Plakida and V. Yushankhai "On superconducting pairing in the two-band Hubbard model", Proc. 19-th Intern. Conf. on Low Temperature Physics (Brighton, 1990) Physica B **165-166** (1990), pp. 1007-1008.
6. R. Hayn, V. Yushankhai and S. Lovtsov "The bandstructure of the copper-oxide plane within the singlet-triplet model", Proc. Bilateral Soviet-German Seminar on high- T_c Superconductivity, (St.-Peterburg, 6-13 October 1991), pp. 140-145.
7. V. Yushankhai, N. Plakida and P. Kalinay "Superconducting pairing in the mean-field approximation for the t - J model: numerical analysis", Physica C **174** (1991), pp. 401-408.
8. S. Lovtsov, N. Plakida and V. Yushankhai "On superconducting pairing in the two-band Hubbard model", Z.Phys.B - Condens.Matter **82** (1991), pp. 1-4.
9. R. Hayn and V. Yushankhai "The electronic structure of the copper oxide plane within the Green's function projection method", phys. stat. sol. (b) **166** (1991), pp. 415-422.

10. S. Lovtsov and V. Yushankhai "Schrieffer-Wolff transformation of the $p-d$ model for oxide superconductors", phys. stat. sol. (b) **166** (1991), pp. 209-217.
11. S. Lovtsov and V. Yushankhai "Effective singlet-triplet model for CuO_2 plane in oxide superconductors: The charge fluctuation regime", Physica C **179** (1991), pp. 159-166.
12. R. Hayn, V. Yushankhai and S. Lovtsov "Analysis of the singlet-triplet model for the copper oxide plane within the paramagnetic state", Phys. Rev. B **47** (1993), pp. 5253-5262.
13. J.L. Richard and V. Yushankhai "Quasiparticle band structure of a hole in a quantum Heisenberg model", Phys. Rev. B **47** (1993), pp. 1103-1106.
14. N. Plakida, V. Oudovenko and V. Yushankhai "Temperature and doping dependence of quasiparticle spectrum for holes in spin-polaron model of copper oxides", Phys. Rev. B **50** (1994), pp. 6431-6441.
15. N. Plakida, V. Oudovenko and V. Yushankhai "Concentration and temperature-dependence of magnetic polaron spectra in the t - J model", in "Polarons and Bipolarons in High- T_c Superconductors and Related Materials" (Ed. E.K.H.Salje, A.S.Alexandrov and W.Y.Liang), Cambridge University Press, 1995, pp. 320-333.
16. R. Hayn, J.L. Richard and V. Yushankhai "The change of the hole-dispersion due to spin-correlations in 2D quantum antiferromagnets", Solid State Comm. **93** (1995), pp. 127-130.
17. V. Yushankhai, V. Oudovenko and R. Hayn "Proper reduction scheme to an extended t - J model and the hole dispersion in $Sr_2CuO_2Cl_2$ ", Phys. Rev. B **55** (1997), pp. 15562-15575.
18. R. Hayn, V. Yushankhai and A. Barabanov "Hole dispersion and magnetic correlations in cuprates", Proc. Intern. Conf. "Strongly Correlated Electronic Systems" (Zurich, 1996), Physica B **230-232** (1997), pp.903-905.
19. G. Jackeli and V. Yushankhai "Normal Fermi liquid behavior of quasiholes in the spin-polaron model for copper oxides", Phys. Rev. B **56** (1997), pp. 3540-3543.

20. M. Golden, H. Schmelz, M. Knupfer, S. Haffner, G. Krabbes, J. Fink, V. Yushankhai, H. Rosner, R. Hayn, A. Müller and G. Reichardt "The dispersion of a hole in a two-dimensional Cu_3O_4 plane: a tale of two singlets", Phys. Rev. Lett. **78** (1997), pp. 4107-4110.
21. L. Siurakshina and V. Yushankhai "Generalized double $t - J$ model and the Zhang-Rice singlet formation in the Cu_3O_4 plane of copper oxychlorides", Proc. Intern. Conf. "Strongly Correlated Electron Systems" (Paris, 15-18 July, 1998), Physica B **259-261**, (1999), pp. 486-487.

Рукопись поступила в издательский отдел
19 февраля 1999 года.