

# Влияние триплетных состояний на спектр коллективных спин-поляронных возбуждений в 2D-решетке Кондо

© В.В. Вальков<sup>1,2</sup>, А.А. Шкляев<sup>1</sup>, М.М. Коровушкин<sup>1</sup>, А.Ф. Барабанов<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск, Россия

<sup>2</sup> Сибирский государственный аэрокосмический университет им. М.Ф. Решетнева, Красноярск, Россия

<sup>3</sup> Институт высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, Троицк, Московская обл., Россия

E-mail: vvv@iph.krasn.ru

(Поступила в Редакцию 5 апреля 2011 г.)

Для двумерной решетки Кондо рассмотрены нормальная и сверхпроводящая фазы ансамбля спиновых поляронов в условиях, когда интеграл перескока соизмерим с энергией  $s-d$ -обменного взаимодействия. Решение задачи о спектре поляронных возбуждений и температуре перехода в сверхпроводящее состояние проведено при учете верхних триплетных состояний. Проанализирована модификация концентрационной зависимости критической температуры перехода в сверхпроводящую фазу от соотношения между интегралом перескока и интегралом  $s-d$ -обменной связи.

Работа выполнена при поддержке Программы Президиума РАН „Квантовая физика конденсированных сред“, Междисциплинарного интеграционного проекта СО РАН № 53, а также РФФИ (гранты № 09-02-00127, 10-02-00614) и Федеральной целевой программы „Научные и научно-педагогические кадры инновационной России“ на 2009–2013 гг.

Электронная структура  $\text{CuO}_2$ -плоскости высокотемпературных сверхпроводников достаточно хорошо воспроизводится в рамках модели Эмери [1]. В области слабого легирования можно перейти к эффективному гамильтониану, для которого состояния ионов меди являются гомеополарными, характеризуются наличием спинового момента  $S = 1/2$  и связываются между собой через механизм косвенного обменного взаимодействия. Дырочные носители тока кислородной подсистемы посредством  $s-d$ -обменной связи взаимодействуют с локализованными спиновыми моментами ионов меди. В результате энергетический спектр фермиевских возбуждений описывается двумерной решеткой Кондо. Если константа  $s-d$ -обменного взаимодействия соизмерима или больше интеграла перескока, то нахождение спектра решетки Кондо основывается на концепции спинового полярона [2,3], в соответствии с которой элементарное возбуждение в 2D-антиферромагнетике рассматривается как носитель дырочного или электронного типа, окруженный облаком спиновых флуктуаций. Такой подход воспроизводит особенности псевдощелевого поведения ВТСП [4], а также позволяет найти область реализации сверхпроводящей фазы [5–7].

Гамильтониан решетки Кондо включает в себя одноузельное  $s-d$ -обменное взаимодействие  $J > 0$  спинов дырки  $\mathbf{s}_f$  ( $s_f^+ = c_{f\uparrow}^+ c_{f\downarrow}$ ,  $s_f^- = (\hat{n}_{f\uparrow} - \hat{n}_{f\downarrow})/2$ ) и локализованного иона  $\mathbf{S}_f$ , хаббардовское отталкивание двух дырок на узле с энергией  $U$ , а также движение дырок с энергией перескока  $t_{fg}$  и гейзенберговское слагаемое

с антиферромагнитным интегралом взаимодействия локализованных ионов

$$\hat{H} = J \sum_f \mathbf{S}_f \mathbf{s}_f + U \sum_f \hat{n}_{f\uparrow} \hat{n}_{f\downarrow} + H_{\text{int}},$$

$$\hat{H}_{\text{int}} = \sum_{fg,\alpha} t_{fg} c_{f\alpha}^+ c_{g\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{fg} I_{fg} \mathbf{S}_f \mathbf{S}_g, \quad (1)$$

где  $\hat{n}_{f\alpha} = c_{f\alpha}^+ c_{f\alpha}$  выражаются через фермиевские операторы рождения  $c_{f\alpha}^+$  и уничтожения  $c_{f\alpha}$  дырки со спином  $\alpha$  на узле  $f$ .

Без учета перескоков и обменного взаимодействия между локализованными спинами собственные состояния одноузельного гамильтониана образуют восьмерное пространство. В отсутствие дырки ион может находиться в двух состояниях: со спином вверх  $|\uparrow\rangle$  и спином вниз  $|\downarrow\rangle$ . Если на узле находится дырка, то магнитное взаимодействие приводит к образованию синглета  $|S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(c_{\uparrow}^+ |\uparrow\rangle - c_{\uparrow}^+ |\downarrow\rangle)$  с нулевой полной проекцией спина или одного из триплетных состояний  $|-1\rangle = c_{\uparrow}^+ |\downarrow\rangle$ ,  $|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(c_{\uparrow}^+ |\uparrow\rangle + c_{\uparrow}^+ |\downarrow\rangle)$ ,  $|1\rangle = c_{\uparrow}^+ |\uparrow\rangle$ .

Энергия триплетных одноузельных состояний лежит выше синглета на величину  $s-d$ -обменного взаимодействия  $J$ . В случае двух дырок на узле в зависимости от ориентации магнитного момента иона система находится либо в состоянии с проекцией суммарного спина вверх  $|+\rangle = c_{\uparrow}^+ c_{\uparrow}^+ |\uparrow\rangle$ , либо в состоянии с проекцией суммарного спина вниз  $|-\rangle = c_{\uparrow}^+ c_{\uparrow}^+ |\downarrow\rangle$ . В представлении

операторов Хаббарда для введенного базиса фермиевские операторы рождения дырки приобретают вид

$$c_{f\uparrow}^+ = X_f^{\uparrow\downarrow} + \frac{1}{\sqrt{2}}(X_f^{0\downarrow} - X_f^{S\downarrow} + X_f^{+S} + X_f^{+0}) + X_f^{-\downarrow},$$

$$c_{f\downarrow}^+ = X_f^{-\uparrow\downarrow} + \frac{1}{\sqrt{2}}(X_f^{0\uparrow} + X_f^{S\uparrow} + X_f^{-S} - X_f^{-0}) + X_f^{+1}.$$

Аналогично для спиновых операторов

$$S_f^+ = X_f^{\uparrow\downarrow} + \frac{1}{\sqrt{2}}(X_f^{S-1} + X_f^{0-1} + X_f^{10} - X_f^{1S}) + X_f^{+-},$$

$$S_f^z = \frac{1}{2}(X_f^{\uparrow\uparrow} - X_f^{\downarrow\downarrow} + X_f^{0S} + X_f^{S0} + X_f^{11} - X_f^{-1-1} - X_f^{++} - X_f^{--}). \quad (3)$$

Рассматривая систему при малом допировании и в пределе  $U = \infty$ , двухдырочными состояниями  $|+\rangle$  и  $|-\rangle$  в дальнейшем пренебрегаем.

В работах [2–4,6,7] нормальная и сверхпроводящая фазы спинового полярона на решетке Кондо исследовались при допущении, что величина  $s-d$ -обменного взаимодействия много больше интеграла перескока. Таким образом, ранее триплетными состояниями можно было пренебречь, или же они учитывались при помощи операторной формы теории возмущений. Однако при рассмотрении вкладов верхних энергетических уровней, выраженных в дополнительных двух- и трехцентровых слагаемых эффективного гамильтониана, видно, что указанные вклады существенно влияют на фазовую диаграмму перехода спиновых поляронов в сверхпроводящее состояние. Это влияние тем сильнее, чем меньше отношение значения интеграла  $s-d$ -обменного взаимодействия к значению интеграла перескока. Становится ясно, что теории возмущений может оказаться недостаточно для описания ансамбля спиновых поляронов в области значений  $J$ , близких к  $t$ . Точный учет триплетных состояний меняет структуру полярона, поскольку многоуровневая система открывает дополнительные варианты формирования куперовских пар.

В случае, когда величина  $s-d$ -обменного взаимодействия  $J$  соизмерима с интегралом перескока  $t$ , для описания системы необходимо учитывать забросы в триплетные состояния наравне с синглетным уровнем. Двухдырочные состояния не учитываем, полагая, что параметр хаббардовского отталкивания много больше остальных энергетических параметров системы. С учетом триплетных состояний гамильтониан (1) в представлении операторов Хаббарда приобретает вид

$$H = -\frac{3}{4}J \sum_f X_f^{SS} + \frac{1}{4}J \sum_f (X_f^{00} + X_f^{11} + X_f^{-1-1}) + \hat{T} + \hat{I},$$

$$\hat{T} = \sum_{fg} t_{fg}(c_{f\uparrow}^+ c_{g\uparrow} + c_{f\downarrow}^+ c_{g\downarrow}), \quad \hat{I} = \frac{1}{2} \sum_{fg} I_{fg}(\mathbf{S}_f \mathbf{S}_g), \quad (4)$$

где  $\hat{T}$  соответствует кинетической части гамильтониана межузельного взаимодействия, а  $\hat{I}$  описывает магнитную подсистему локализованных ионов.

Для исследования нормальной и сверхпроводящей фаз ансамбля спиновых поляронов в качестве базисных выбранны следующие операторы:  $a_{f\uparrow} = X_f^{\downarrow S}$ ,  $b_{f\uparrow} = X_f^{10} + \sqrt{2}X_f^{\uparrow\downarrow}$ , уничтожающие фермиевские квазичастицы со спином вверх, и  $a_{f\downarrow} = X_f^{\uparrow S}$ ,  $b_{f\downarrow} = X_f^{10} + \sqrt{2}X_f^{\downarrow\uparrow}$ , уничтожающие квазичастицы со спином вниз. Операторы уничтожения дырки выражаются через новые операторы следующим образом  $c_{f\uparrow} = \frac{1}{\sqrt{2}}(b_{f\uparrow} - a_{f\uparrow})$ ,  $c_{f\downarrow} = \frac{1}{\sqrt{2}}(b_{f\downarrow} + a_{f\uparrow})$ . Операторы  $a_{f\uparrow}$  и  $a_{f\downarrow}$  соответствуют уничтожению дырки, находящейся в синглетном состоянии, тогда как операторы  $b_{f\uparrow}$  и  $b_{f\downarrow}$  описывают переходы из триплетных состояний.

Уравнения движения для функций Грина, построенных на базисных операторах, расплелись методом проекционной техники Цванцига–Мори [8–10]. В итоге в приближении Хартри–Фока получена система уравнений для нормальных  $G_1(k) = \langle\langle a_{k\uparrow} | a_{k\uparrow}^+ \rangle\rangle$ ,  $G_2(k) = \langle\langle b_{k\uparrow} | b_{k\uparrow}^+ \rangle\rangle$  и аномальных  $F_1(k) = \langle\langle a_{-k\downarrow}^+ | a_{k\uparrow}^+ \rangle\rangle$ ,  $F_2(k) = \langle\langle b_{-k\downarrow}^+ | b_{k\uparrow}^+ \rangle\rangle$  функций Грина

$$(\omega - \varepsilon_{1k})G_1(k) + \frac{1}{4}t_k G_2(k) + \Delta_k F_1(k) - \frac{1}{3}\Delta_k F_2(k) = \frac{1}{2},$$

$$\frac{3}{4}t_k G_1(k) + (\omega - \varepsilon_{2k})G_2(k) + \Delta_k F_1(k) - \frac{1}{3}\Delta_k F_2(k) = 0,$$

$$\Delta_k G_1(k) + \frac{1}{3}\Delta_k G_2(k) + (\omega + \varepsilon_{1k})F_1(k) - \frac{1}{4}t_k F_2(k) = 0,$$

$$-\Delta_k G_1(k) - \frac{1}{3}\Delta_k G_2(k) - \frac{3}{4}t_k F_1(k) + (\omega + \varepsilon_{2k})F_2(k) = 0. \quad (5)$$

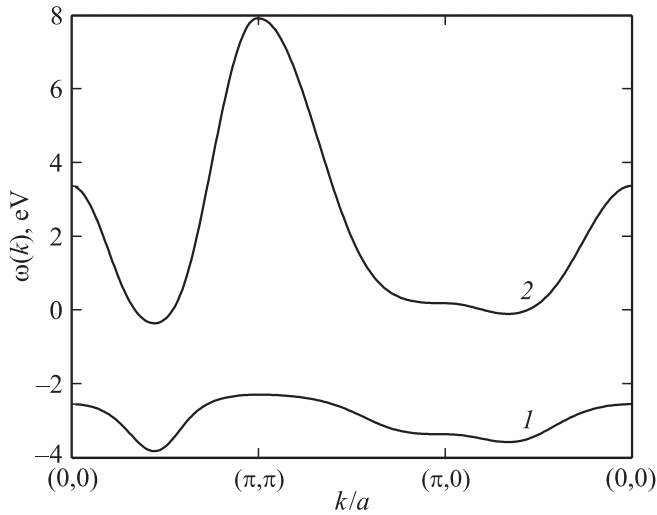
Затравочные спектры синглетного и триплетного уровней соответственно имеют вид

$$\varepsilon_{1k} = -\frac{3}{4}J + \frac{1}{4}t_k, \quad \varepsilon_{2k} = \frac{1}{4}J + \frac{3}{4}t_k, \quad (6)$$

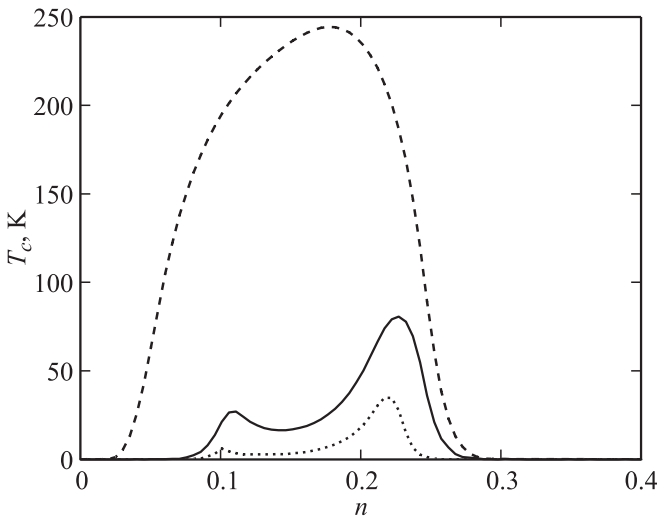
а сверхпроводящий параметр порядка  $\Delta_k$  определяется через аномальные средние

$$\Delta_k = \frac{1}{N} \sum_q I_{k-q} \left( -\frac{3}{2} \langle a_{-q\downarrow} a_{q\uparrow} \rangle - \langle a_{-q\downarrow} b_{q\uparrow} \rangle \right). \quad (7)$$

При записи аномальных средних, возникающих в ходе процедуры проектирования по Мори, учитывались средние, соответствующие спариваниям синглет-синглет и синглет-триплет. Триплет-триплетные средние при записи сверхпроводящего параметра порядка не учитывались, поскольку в состоянии термодинамического равновесия статистический вес таких спариваний будет содержать квадратичный по концентрации триплетных поляронов множитель. Поэтому в обычных условиях таким квадратичным вкладом можно пренебречь по сравнению с линейным по этой концентрации вкладом.



**Рис. 1.** Дисперсионные кривые спин-синглетных (1) и спин-триплетных (2) поляронов для параметров  $J = 4 \text{ eV}$ ,  $t_1 = -0.6 \text{ eV}$ ,  $t_2 = 0.8 \text{ eV}$ ,  $t_3 = 0.5 \text{ eV}$ .



**Рис. 2.** Концентрационные зависимости критической температуры. Штриховая кривая построена при учете только синглетных поляронов (предел  $J = \infty$ ), сплошная — с учетом синглетных и триплетных поляронов, пунктирная кривая построена при учете вкладов от триплетных поляронов, полученных по теории возмущений.

Решая дисперсионное уравнение для системы (5) в нормальной фазе ( $\Delta_k = 0$ ), получаем две ветви спектра, соответствующие синглетному  $\omega_{1k}$  и триплетному  $\omega_{2k}$  уровням

$$\begin{aligned} \omega_{1k} &= -\frac{1}{4}J + \frac{1}{2}t_k - \frac{1}{2}\sqrt{J^2 + Jt_k + t_k^2}, \\ \omega_{2k} &= -\frac{1}{4}J + \frac{1}{2}t_k + \frac{1}{2}\sqrt{J^2 + Jt_k + t_k^2}. \end{aligned} \quad (8)$$

Спектр спиновых поляронов, учитывающий перескоки вплоть до третьей координационной сферы, показан на

рис. 1. Видно, что расстояние между зонами сравнимо с шириной нижней зоны, при том, что значение  $s-d$ -обменного интеграла относительно велико по сравнению с параметрами перескока.

Отметим, что при учете триплетных состояний можно было выбрать базис, построенный на хаббардовских операторах  $X_f^{\downarrow s}$ ,  $X_f^{\downarrow 0}$  и  $X_f^{\downarrow 1}$ . В этом случае нахождение спин-поляронного спектра связано с решением кубического уравнения, причем две ветви спектра совпадают с приведенными в настоящей работе, а третья является бездисперсной и соответствует триплетному уровню  $J/4$ .

Для  $d$ -типа симметрии параметра порядка уравнение для критической температуры перехода в сверхпроводящее состояние записывается в виде

$$1 = \frac{1}{N} \sum_q I(\cos q_x - \cos q_y)^2 A(q, T_c), \quad (9)$$

где

$$\begin{aligned} A(q, T) &= \left[ \frac{3}{4} \left( (\varepsilon_{2q} - \mu)^2 - (\omega_{1q} - \mu)^2 - \frac{1}{16} t_q^2 \right) \right. \\ &+ \left. \frac{1}{2} \left( (\omega_{1q} - \mu)^2 - \left( \varepsilon_{1q} - \mu - \frac{3}{4} t_q \right) \left( \varepsilon_{2q} - \mu + \frac{1}{4} t_q \right) \right) \right] \\ &\times \left[ 2(\omega_{1q} - \mu) \left( (\omega_{2q} - \mu)^2 - (\omega_{1q} - \mu)^2 \right) \right]^{-1} \tanh \frac{\omega_{1q} - \mu}{2T} \\ &- \left[ \frac{3}{4} \left( (\varepsilon_{2q} - \mu)^2 - (\omega_{2q} - \mu)^2 + \frac{1}{16} t_q^2 \right) \right. \\ &+ \left. \frac{1}{2} \left( (\omega_{2q} - \mu)^2 - \left( \varepsilon_{1q} - \mu - \frac{3}{4} t_q \right) \left( \varepsilon_{2q} - \mu + \frac{1}{4} t_q \right) \right) \right] \\ &\times \left[ 2(\omega_{2q} - \mu) \left( (\omega_{2q} - \mu)^2 - (\omega_{1q} - \mu)^2 \right) \right]^{-1} \tanh \frac{\omega_{2q} - \mu}{2T}. \end{aligned} \quad (10)$$

На рис. 2 приведены фазовые диаграммы, построенные в различных подходах к учету одноузельных состояний для следующих параметров  $J = 4 \text{ eV}$ ,  $t_1 = -0.6 \text{ eV}$ ,  $t_2 = 0.8 \text{ eV}$ ,  $t_3 = 0.5 \text{ eV}$ ,  $I = 0.2 \text{ eV}$ .

На основе проекционной техники Мори получены уравнения для функции Грина нормальной и сверхпроводящей фаз ансамбля спиновых поляронов, учитывающие переходы как в синглетные, так и в триплетные однодырочные состояния. Для нормальной фазы аналитически получен спектр спиновых поляронов, показанный на рис. 1. Видно, что при соизмеримых значениях интеграла  $s-d$ -обменного взаимодействия и параметров перескока синглетная ветвь поляронных возбуждений находится в том же энергетическом интервале, что и ветвь, соответствующая триплетным состояниям.

Проведенный анализ по влиянию триплетных состояний показал, что при относительном возрастании интеграла перескока роль этих состояний существенно возрастает. При этом вклад от синглет-триплетных спариваний спиновых поляронов в концентрационную

зависимость температуры перехода в сверхпроводящее состояние становится важным и приводит к отличию от результатов, полученных по теории возмущений. Следует подчеркнуть, что при таком подходе численные решения показывают увеличение критической температуры.

## Список литературы

- [1] V.J. Emery. Phys. Rev. Lett. **58**, 2794 (1987).
- [2] A.F. Barabanov, R.O. Kuzian, L.A. Maksimov. Phys. Rev. B **55**, 4015 (1997).
- [3] А.Ф. Барабанов, А.В. Михеенков, А.М. Белемук. Письма в ЖЭТФ **75**, 118 (2002).
- [4] А.Ф. Барабанов, А.М. Белемук. Письма в ЖЭТФ **87**, 725 (2008).
- [5] А.Ф. Барабанов, Л.А. Максимов, А.В. Михеенков. Письма в ЖЭТФ **74**, 362 (2001).
- [6] В.В. Вальков, М.М. Коровушкин, А.Ф. Барабанов. Письма в ЖЭТФ **88**, 426 (2008).
- [7] V.V. Val'kov, A.A. Shkhyayev, A.F. Barabanov. JPCS **200**, 012 217 (2010).
- [8] R. Zwanzig. J. Chem. Phys. **33**, 1338 (1960).
- [9] R. Zwanzig. Phys. Rev. **124**, 983 (1961).
- [10] H. Mori. Prog. Theor. Phys. **33**, 423; **34**, 399 (1965).