

УДК 538.22

© 1992

ПОЛЯРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ В МОДЕЛИ ЭМЕРИ

В. Я. Кривнов, В. О. Черановский

Проведены точные численные расчеты энергетического спектра модели Эмери с одной дополнительной дыркой для решеточных кластеров, содержащих до 14 атомов меди. Показаны бездисперсионный характер нижней части спектра модели и фрустрированный тип взаимодействий спинов подрешетки меди.

Проблема сильно коррелированных электронов занимает центральное место в теории высокотемпературных сверхпроводников [1]. Ниболее простой моделью, адекватно описывающей электронную корреляцию, является однозонный гамильтониан Хаббарда. Однако известно, что по крайней мере в большинстве легированных медно-оксидных сверхпроводников носителями тока являются дырки в заполненной p -оболочке ионов кислорода O^{2-} . Это послужило основанием для изучения электронного строения таких материалов с помощью двухзонного гамильтониана Хаббарда, носящего название модели Эмери [2]

$$H = t_{pa} \sum \{ p_{i\sigma}^+ d_{j\sigma} + d_{j\sigma}^+ p_{i\sigma} \} + \alpha \sum p_{i\sigma}^+ p_{i\sigma} + U_p \sum p_{i\sigma}^+ p_{i\sigma} p_i^+ - \sigma p_i - \sigma + \\ + t_{pp} \sum \{ p_{i\sigma}^+ p_{i+1\sigma} + p_{i+1\sigma}^+ p_{i\sigma} \} + U_a \sum a_{i\sigma}^+ d_{i\sigma} d_i^+ - \sigma d_i - \sigma. \quad (1)$$

Здесь d_σ^+ , p_σ^+ (d_σ , p_σ — операторы рождения уничтожения дырок со спином σ на ионах меди и кислорода; t_{pd} — резонансный интеграл, описывающий гибридизацию $3d_x^2 - y^2$ и $2p_x$ состояний меди и кислорода; t_{pp} — резонансный интеграл, отвечающий прямым перескокам дырок между ионами кислорода; $\alpha = \varepsilon_p - \varepsilon_d$; ε_p (ε_d), U_p (U_d) — одночастичные и хаббардовские энергии на узлах кислорода (меди).

Рассмотрим упрощенную версию этой модели, отвечающую следующему набору электронных параметров:

$$U_a = \infty, U_p = 0, \alpha \gg |t_{pa}|, t_{pp} = 0.$$

При этом на каждый ион меди приходится по одной дырке, а легирование создает дополнительные дырки на ионах кислорода.

Используя малость t_{pd} , можно переписать гамильтониан (1) в следующем виде [3-5]:

$$H = N_I J + J/2 \sum_{n, \sigma, \sigma', j, j' = \pm 1} \sum (\delta_{\sigma\sigma'} \delta_{j, -j'} + 4S_{2I} S_{\sigma\sigma'}) c_{2I}^+ + j\sigma c_{2I} + j'\sigma', \quad (2)$$

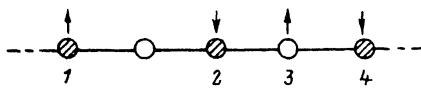


Рис. 1. Одномерный решеточный кластер.

Заштрихованные кружки — ионы меди, светлые кружки — ионы кислорода.

где N_b — число дополнительных дырок в кислородной зоне, $c_{2l+1\sigma}^+$ создает дырки на ионах кислорода, S_{2l} — спин дырки на ионе меди, $S_{\sigma\sigma}$ — матричные элементы одноэлектронного спинового оператора.

Наиболее интересной проблемой, связанной с этой моделью, является проблема полярона, образованного одной дополнительной дыркой, т. е. связанного состояния дырки, двигающейся вдоль ионов кислорода и взаимодействующей со спинами ионов меди. Эта проблема изучалась в [3, 4], где было показано, что полярон имеет немагнитный характер. Однако точное решение задачи о полароне до сих пор не найдено (за исключением состояний с одной дополнительной дыркой и одним повернутым спином). Поэтому несомненный интерес представляют точные численные расчеты спектра конечных решеточных кластеров, аналогичные выполненным в [5, 6], с учетом суперобмена спинов ближайших ионов меди и прямых перескоков дополнительной дырки по цепочке ионов кислорода.

Мы будем рассматривать только одномерную решетку с циклическими граничными условиями и одной дополнительной дыркой, так как с увеличением размерности решетки резко возрастают вычислительные трудности. В то же время известно, что спектр двумерной перовскитовой решетки во многом подобен одномерному случаю [4].

Занумеруем дырки одномерной задачи последовательно по решетке (рис. 1). Используя формализм циклических спиновых перестановок [6-8], запишем гамильтониан (2) с учетом суперобмена медных спиновых и прямых перескоков дополнительной дырки в следующем виде:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & J \sum_{l=1}^n \hat{a}_l^+ \hat{a}_l \hat{P}_{l, l \pm 1} + J \sum_{l=1}^n (\hat{a}_l^+ \hat{a}_{l+1} + \hat{a}_{l+1}^+ \hat{a}_l) + J (\hat{a}_1^+ \hat{a}_{n+1} + \hat{Q}_{1n+1}^+ + \\ & + \hat{a}_{n+1}^+ \hat{a}_1 \hat{Q}_{1n+1}) + t_{pp} \sum_{l=1}^n (\hat{a}_{l+1}^+ \hat{a}_l + \hat{a}_l^+ \hat{a}_{l+1}) \hat{P}_{ii+1} + t_{pp} (\hat{a}_n^+ \hat{a}_1 \hat{Q}_{1n} + \hat{a}_1^+ \hat{a}_n \hat{Q}_{1n}^+) + \\ & + J_s \left\{ \sum_{k=2}^n a_k^+ \hat{a}_k (\hat{P}_{1n+1} + \hat{P}_{12} + \dots + \hat{P}_{k-1k+1} + \hat{P}_{k+1k+2} + \dots + \hat{P}_{nn+1}) + \right. \\ & \left. + \hat{a}_1^+ \hat{a}_1 (\hat{P}_{2n+1} + \sum_{i=2}^n \hat{P}_{ii+1}) - n \right\}. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь \hat{a}_i^+ — бесспиновый ферми-оператор, описывающий рождение дополнительной дырки на i -м кислородном атоме; n — число атомов меди в кластере; $J = t^2/\alpha$; $J_s \cong t^4/\alpha^3$; \hat{P}_{ij} — оператор транспозиции спиновых переменных с номерами i и j ; $\hat{Q}_{1, n+1}$ — оператор циклической перестановки $n+1$ спиновой переменной с номерами из интервала $(1, n+1)$

$$\hat{Q}_{1n} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \dots & n \\ n & 1 & 2 & \dots & n-1 \end{pmatrix}.$$

Этот гамильтониан коммутирует с оператором сдвига на элементарное звено. Поэтому собственные функции (3) характеризуются импульсом дырки. Базисные функции правильной симметрии, отвечающие фиксированному значению импульса k , могут быть записаны в виде

$$\Psi_r(\lambda, s, m) = \sum \exp(ik) \hat{Q}_n^{l+1} \Lambda(\lambda, s, m) \hat{a}_n^{+ - l + 1} |0\rangle, \quad (4)$$

где $\Lambda(\lambda, s, m)$ — собственные функции оператора полного спина \hat{S}^2 . Не вдаваясь в подробности простых, но громоздких операций с различными степенями циклических спиновых перестановок, получим, что гамильтониан (4) может быть переписан в чисто спиновом виде для каждого фиксированного значения импульса дырки k

$$\hat{H} = J(\hat{P}_{12} + \hat{P}_{1n+1}) + J_s \left\{ (\hat{P}_{2n+1} + \sum_{j=2}^n \hat{P}_{jj+1}) - n \right\} + \exp(ik) (J\hat{Q}_{1n+1} - i\hat{Q}_{2n+1}) + \text{h. c.} \quad (5)$$

Использование такого представления для решеточного гамильтониана позволяет не только существенно понизить размерность базиса, но и в компактном виде рассматривать состояния заданной спиновой мультиплетности. Последнее очень важно для численных расчетов из-за высокой вырожденности спектра. Кроме того, для гамильтониана (5) могут быть найдены точные ферромагнитные и одномагнитные состояния. Полагая $J = 1$, имеем

$$S = S_{\max}: \quad E_1(k) = 2 + 2(1-t) \cos(k),$$

$$S = S_{\max} - 1: \quad E_2(k) = 2(1 - J_s - b \operatorname{ch}(x)), \quad (6)$$

где $b^2 = (1-t)^2 + 2(1-t)J_s \cos(k) + J_s^2$; x — решение следующего трансцендентного уравнения:

$$(b \operatorname{ch}(x) - 1 - t \cos(k) - J_s) \{ [b \exp(x) - 1]^2 + 1 - b^2 + 2J_s \cos(k) - 2t \} = 4 \cos^2(k/2) [b \exp(x) - 1 + t - J_s \cos(k)].$$

Таким образом, зоны E_1 и E_2 касаются друг друга только при $t = J_s = 0$. При других значениях параметров t и J_s эти зоны разделены щелью.

Перейдем теперь к обсуждению результатов численных расчетов. Сначала рассмотрим случай $J_s = t_{pp} = 0$. Спектр конечных циклических кластеров будем характеризовать тремя параметрами: n , k и m , где n и k определены выше, а $m = S_{\max} - S$, где S — полный спин кластера. Мы провели точные численные расчеты нижних энергетических уровней $E(n, m, k)$ для $n \leq 14$ и различных значениях m и k (все вычисления проводились в единицах J). Для всех n и $m \leq S_{\max} - 1$ энергия кластера понижается с увеличением m . Однако энергия основного состояния является довольно нерегулярной функцией числа центров n и импульса k (табл. 1). Тем не менее оказывается, что энергии нижних уровней $E(n, m, k)$ для $m < S_{\max} - 1$ являются монотонными, быстро сходящимися функциями числа центров n и для больших n образуют зоны с шириной $\Delta E(n, m) = |E(n, m, \pi) - E(n, m, 0)|$ (рис. 2).

Таблица 1

Энергия основного состояния решеточных кластеров, содержащих n атомов меди. (Энергии основного состояния кластеров, включающих в себя до 7 атомов меди, представлены в работе [5])

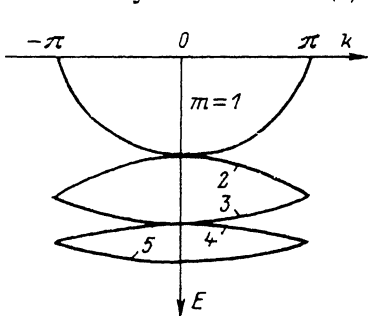
n	E	S	k
7	-2.848	1	0
8	-2.836	1/2	$\pi/2$
9	-2.902	0	0
10	-2.867	1/2	$2\pi/5$
11	-2.879	1	0
12	-2.870	1/2	$\pi/2$
13	-2.898	0	0
14	-2.882	1/2	$3\pi/7$

Соседние зоны с полным спином S и $S+1$ перекрываются в окрестностях точек $k=0, \pm\pi$ в зависимости от четности m . Однако это перекрывание уменьшается с увеличением n и, по-видимому, в пределе больших n соседние зоны касаются в точках $k=0, \pm\pi$ в согласии с гипотезой Глазмана и Йоселевича [3]. Значения функции $E(n, m, k)$ в точках касания для $m=1-5$ при $n > 12$ практически перестают зависеть от n .

$m = S_{\max} - S$	1	2	3	4	5
$E(\infty, m, k)$	-2.472	-2.697	-2.778	-2.818	-2.841

Как видно из этих данных, энергия нижнего края зоны понижается с уменьшением S и основное состояние бесконечной решетки, по-видимому, синглетное, т. е. полярон имеет немагнитный характер.

Важной особенностью спектра изучаемой модели является резкое уменьшение ширины зоны при уменьшении спина S (рис. 2), позволяющее предположить бездисперсионный характер нижней части спектра при $n \rightarrow \infty$. Таким образом, эффективная масса немагнитного полярона бесконечная и, следовательно, он локализован. Размеры полярона можно приблизительно оценить по величине кинетической энергии, которая в нашем представлении имеет простой вид $E_k = 2 \langle \Psi | Q_{1,n+1} | \Psi \rangle$. Для кластера с $n=10$ эта величина равна ≈ 1.868 , что соответствует квазичастице, занимающей область из 9 ионов меди.



Можно ожидать, что учет прямых перескоков дополнительной дырки должен нарушить локализацию. Однако, как показывают численные расчеты, даже при $t_{pp} = 0.5J$ ширина зоны $\Delta E(n, m)$ меняется незначительно. В то же время учет суперобмена спинов меди приводит к значительному изменению ширины зоны даже при малых значениях J_s (табл. 2).

С целью изучения спиновой структуры полярона мы вычислили спиновые корреляционные функции, определяющие спиновую структуру полярона в окрестности дырки

Рис. 2. Зависимость энергии нижнего уровня от импульса дырки k при различных значениях числа повернутых спинов m .

Таблица 2

Зависимость ширины зоны $\Delta E(10, m)$ от полного спина решетки: 1) $t_{pp} = J_s = 0$;
 2) $t_{pp} = 0.5, J_s = 0$; 3) $t_{pp} = 0.5, J_s = 0.05$

	m					
	0	1	2	3	4	5
1	4.000	2.472	0.362	0.115	0.032	0.037
2	2.000	3.528	0.351	0.107	0.034	0.071
3	2.000	3.437	0.488	0.233	0.011	0.139

$$G_1 = 1/n \sum \langle S_{2m} S_{2m} + 2\hat{c}_{2m}^+ + 1\hat{c}_{2m} + 1 \rangle,$$

$$G_2(l) = 1/n \sum \langle S_{2m+1} S_{2m+1} + 2\hat{c}_{2m+1}^+ + 1\hat{c}_{2m+1} + 1 \rangle, \quad (7)$$

а также спиновые корреляторы, описывающие упорядочение спинов подрешетки ионов меди

$$G_3(l) = \langle S_{2m} S_{2m+2l} \rangle. \quad (8)$$

В нашем формализме эти корреляторы принимают следующий вид:

$$G_1 = \rho(2, n+1), \quad G_2(l) = \rho(1, l),$$

$$G_3(l) = \rho(2, l+1) + \sum_{j=2}^l \rho(n+3-j, l+2-j) + \sum_{j=l+1}^n \rho(n+3-j, n+2+l-j), \quad (9)$$

где $\rho(i, j) = \langle \Psi | S_i S_j | \Psi \rangle$, Ψ — собственная функция гамильтониана (5).

G_1 описывает корреляцию спинов ионов меди, соседних с дыркой, и имеет существенно ферромагнитный характер ($G_1 \cong 0.24$), т. е. дырка заставляет спины ближайших ионов меди выстраиваться параллельно.

Корреляторы $G_2(l)$ для малых l быстро выходят на насыщение и слабо зависят от мультиплетности состояния. Кроме того, корреляторы с четным и нечетным l имеют противоположные знаки и медленно уменьшаются по абсолютной величине с расстоянием, что согласуется с выводом о наличии в решетке полярона больших размеров (табл. 3).

Корреляторы $G_3(l)$, определенные на подрешетки ионов меди, в отличие от G_1 и $G_2(l)$ сильно зависят от импульса k и числа повернутых спинов. Тем не менее, согласно данным табл. 4, движение дырки приводит к антиферромагнитному упорядочению спинов соседних ионов меди (в отличие от ферромагнитного упорядочения спинов меди, описываемого коррелятором G_1). Взаимодействие несоседних спинов меди носит фрустрированный характер. Учет прямых перескоков дополнительной дырки и суперобмена спинов меди незначительно влияет на поведение спиновых корреляторов (табл. 3, 4). Т. е. при легировании происходит

Таблица 3

Значения спиновых корреляторов $G_2(l)$ для уровней $E(10, 5, 0)$: 1) $t_{pp} = J_s = 0$;
2) $t_{pp} = 0.5, J_s = 0$; 3) $t_{pp} = 0.5, J_s = -0.05$

	l				
	1	2	3	4	5
1	-0.488	0.160	-0.080	0.059	-0.027
2	-0.497	0.129	-0.040	0.053	-0.026
3	-0.496	0.127	-0.039	0.054	-0.027

Таблица 4

Значения спиновых корреляторов $G_3(l)$ для уровней $E(10, 5, 0)$: 1) $t_{pp} = J_s = 0$;
2) $t_{pp} = 0.5, J_s = 0$; 3) $t_{pp} = 0.5, J_s = -0.05$

	l				
	1	2	3	4	5
1	-0.215	-0.045	-0.042	-0.040	0.084
2	-0.208	-0.039	-0.064	-0.025	0.074
3	-0.210	-0.035	-0.067	-0.021	0.071

разрушение спинового упорядочения, характерного для гейзенберговской модели, описывающей суперобмен спин ионов меди нелегированной решетки.

Авторы выражают глубокую благодарность А. А. Овчинникову за обсуждение результатов работы.

Список литературы

- [1] Anderson P. W. // Science. 1987. V. 235. N 12. P. 1196—1199.
- [2] Emery V. J. // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 58. N 26. P. 2794—2797.
- [3] Глазман Л. И., Иоселевич А. С. // Письма в ЖЭТФ. 1988. Т. 47. № 9. С. 464—467.
- [4] Барабанов А. Ф., Максимов Л. А., Уймин Г. В. // ЖЭТФ. 1989. Т. 96. № 2. С. 655—669.
- [5] Long V. W. // J. Phys.: Condens. Matter. 1989. V. 1. P. 9421—9429.
- [6] Krivnov V. Ya., Ovchinnikov A. A., Cheranovskii V. O. // Research Reports in Physics. Berlin, Springer—Verlag, 1991. P. 86—92.
- [7] Кривнов В. Я., Овчинников А. А., Черановский В. О. // ТМФ. 1990. Т. 82. № 2. С. 216—223.
- [8] Cheranovskii V. O. // Intern. J. Quant. Chem. 1992 (in press).

Институт химической физики РАН
Москва

Поступило в Редакцию
28 февраля 1992 г.
В окончательной редакции
8 мая 1992 г.