Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. В. Вальков, Д. М. Дзедисашвили, А. Ф. Барабанов, Обобщенная модель решетки Кондо и ее спин-поляронная реализация проекционным методом для купратов, *ТМФ*, 2017, том 191, номер 2, 319–333

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf9234>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением <http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 3.85.73.92

26 апреля 2023 г., 13:23:48

© 2017 г. В. В. Вальков*, Д. М. Дзедзисашвили*[†],
А. Ф. Барабанов[‡]

ОБОБЩЕННАЯ МОДЕЛЬ РЕШЕТКИ КОНДО И ЕЕ СПИН-ПОЛЯРОННАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ ПРОЕКЦИОННЫМ МЕТОДОМ ДЛЯ КУПРАТОВ

Показано, что спин-фермионная модель, являющаяся эффективной низкоэнергетической реализацией трехзонной модели Эмери, после перехода в представление Ванье для p_x - и p_y -орбиталей подсистемы ионов кислорода сводится к обобщенной модели решетки Кондо. Ее существенной особенностью является наличие спин-коррелированных перескоков носителей тока между далекими ячейками. Численные расчеты спектра спин-поляронных возбуждений демонстрируют важную роль дальних спин-коррелированных перескоков.

Ключевые слова: сильные электронные корреляции, спин-фермионная модель, модель решетки Кондо, спиновый полярон.

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf9234>

1. ВВЕДЕНИЕ

Структура квазичастиц нормальной фазы купратных высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) и природа низкоэнергетических взаимодействий играют ключевую роль в установлении механизма куперовской неустойчивости, аномального температурного поведения кинетических коэффициентов и целого ряда других аномальных свойств [1], [2]. Далекая от завершения теория двумерного допированного антиферромагнетика (АФМ) преимущественно развивается в рамках двумерных моделей Хаббарда, обобщенных $(t-J)$ -моделей, трехзонной модели Эмери [3]–[7]

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты № 16-02-00073, № 16-02-00304 и № 16-42-240435), а также комплексной программы СО РАН № II.2П (грант № 0358-2015-0005).

*Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН, Красноярск, Россия.
E-mail: vvv@iph.krasn.ru

[†]Сибирский государственный аэрокосмический университет им. академика М. Ф. Решетнева, Красноярск, Россия. E-mail: ddm@iph.krasn.ru

[‡]Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН, Троицк, Московская обл., Россия

и спин-фермионной модели. Мы не останавливаемся в настоящей статье на двух первых моделях; отметим только, что они существенно отличаются от трехзонной модели Эмери и спин-фермионной моделей тем, что у них как зарядовая, так и спиновая подсистемы формируются одними и теми же носителями. Поэтому мы будем исходить из более реалистичных с нашей точки зрения моделей (спин-фермионной модели и модели Эмери), когда спиновая подсистема и подсистема носителей заряда определяются соответственно d - и p -ионами.

Известно, что в режиме сильных электронных корреляций (СЭК) гамильтониан трехзонной модели Эмери можно редуцировать к спин-фермионной модели [8]–[11]. Привлекательным свойством спин-фермионной модели является то, что уже в простейшем рассмотрении она позволяет получить основной мотив дырочного спектра купратов [8], [9]. При этом дно спектра носителей $E(k)$ располагается вблизи границы магнитной зоны Бриллюэна, а сам спектр имеет следующую квазиимпульсную зависимость: $E(k) \sim (\cos k_x + \cos k_y)^2$.

В настоящей работе гамильтонианы трехзонной модели Эмери и спин-фермионной модели приводятся к обобщенной модели решетки Кондо, учитывающей дальние спин-коррелированные перескоки. На основе сравнения спектральных зависимостей спин-поляронных квазичастиц для модели решетки Кондо и для ее усеченного варианта (когда оставлены взаимодействия только между ближайшими ионами) делается вывод о важности дальних спин-коррелированных перескоков.

2. ГАМИЛЬТониан ТРЕХЗОННОЙ МОДЕЛИ ЭМЕРИ

Гамильтониан трехзонной модели Эмери для плоскости CuO_2 [3]–[6] можно записать в следующем виде:

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_{pd} + \hat{\mathcal{H}}_I, \quad (1)$$

где

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{pd} = & \sum_f (\varepsilon_d \hat{n}_f^d + U_d \hat{n}_{f\uparrow}^d \hat{n}_{f\downarrow}^d) + \sum_l (\varepsilon_p \hat{n}_l^p + U_p \hat{n}_{l\uparrow}^p \hat{n}_{l\downarrow}^p) + \\ & + V_{pd} \sum_{f,\delta} \hat{n}_f^d \hat{n}_{f+\delta}^p + t_{pd} \sum_{f,\delta,\sigma} (\vartheta(\delta) d_{f\sigma}^+ p_{f+\delta,\sigma} + \text{э. с.}) + \hat{T}, \end{aligned} \quad (2)$$

$$\hat{T} = \sum_{l,\Delta,\sigma} t_{\varrho}(\Delta) p_{l,\sigma}^+ p_{l+\Delta,\sigma}, \quad \hat{\mathcal{H}}_I = \frac{I_1}{2} \sum_{f,g} \vec{S}_f \vec{S}_{f+g} + \frac{I_2}{2} \sum_{f,d} \vec{S}_f \vec{S}_{f+d}. \quad (3)$$

Здесь ε_p и ε_d – энергии дырки соответственно на ионе кислорода и ионе меди, U_p и U_d – энергии отталкивания двух дырок на ионах кислорода и меди, V_{pd} – энергии отталкивания двух дырок на ближайших узлах кислорода и меди, t_{pd} – параметр гибридизации соседних кислородных p - и медных d -орбиталей. Векторы l отвечают положениям узлов ионов кислорода. Вектор δ в (2) принимает четыре значения $\pm\delta_x$, $\pm\delta_y$ ($\delta_x = (a/2, 0)$, $\delta_y = (0, a/2)$, a – параметр решетки ионов меди) и соединяет ближайшие узлы кислорода в позициях $f + \delta$ с ионом меди на узле f . Функция $\vartheta(\delta)$ учитывает влияние соотношений между фазами медных и кислородных орбиталей на процессы гибридизации. Для обычно используемых орбиталей функция $\vartheta(\delta)$ при изменении δ принимает следующие значения: $\vartheta(\delta) = \mp 1$ при $\delta = \pm\delta_x$ или $\delta = \pm\delta_y$.

В выражении для $\hat{\mathcal{H}}_{pd}$ операторы $p_{l\sigma}$ ($p_{l\sigma}^+$) уничтожают (рождают) дырку на ионе кислорода с индексом узла l и проекцией спина σ , которая принимает значения $\uparrow$

или $\downarrow$. Операторы $d_{f\sigma}$ ($d_{f\sigma}^+$) уничтожают (рождают) дырку на ионе меди с индексом f и проекцией спина σ . Операторы числа дырок на ионе кислорода (меди) на узле l (f) со спином σ определены выражением $\hat{n}_{l\sigma}^p = \sum_{\sigma} p_{l\sigma}^+ p_{l\sigma}$ ($\hat{n}_{f\sigma}^d = \sum_{\sigma} d_{f\sigma}^+ d_{f\sigma}$). Кроме того, $\hat{n}_l^p = \sum_{\sigma} \hat{n}_{l\sigma}^p$ и $\hat{n}_f^d = \sum_{\sigma} \hat{n}_{f\sigma}^d$.

Слагаемое $\hat{T}$ отвечает прямым перескокам дырок между ближайшими ионами кислорода с интегралом туннелирования $t\rho(\Delta)$. Его знак определяется функцией $\rho(\Delta)$, зависящей от ориентации линии, на которой находятся ионы кислорода, между которыми осуществляется перескок. Вектор Δ пробегает четыре значения $(\pm a/2, \pm a/2)$ и соединяет ион кислорода в узле l с ближайшим к нему ионом кислорода с номером $l + \Delta$. Для выбранных фаз кислородных орбиталей $\rho(\Delta) = 1$, если $\Delta = \pm(a/2, a/2)$. Если же $\Delta = \pm(a/2, -a/2)$, то $\rho(\Delta) = -1$.

Второе слагаемое $\hat{\mathcal{H}}_I$ в выражении (1) отвечает суперобменному взаимодействию между спиновыми моментами на ближайших и на следующих за ближайшими узлами ($d = \pm g_x \pm g_y$). Векторы ближайших соседей решетки меди суть $g_x = (a, 0)$, $g_y = (0, a)$. Далее удобно использовать параметр фрустрации p и эффективный обмен I : $I_1 = (1 - p)I$, $I_2 = pI$, $0 \leq p \leq 1$, $I > 0$. При таком подходе предполагается, что при рассмотрении свойств спиновой подсистемы ионов меди можно воспользоваться двумерной фрустрированной моделью АФМ Гейзенберга с $S = 1/2$. АФМ-взаимодействие между ближайшими спинами ионов Cu^{2+} в плоскости CuO_2 велико (имеет порядок $0.13 \text{ эВ} \cong 1500 \text{ К}$) и значительно сильнее межплоскостного обмена. Межплоскостной обмен в основном ответствен за дальний порядок, который наблюдается в диэлектрической фазе CuO_2 -плоскостей. Для La_2CuO_4 (LSCO) характерная температура Нееля $T_N \sim 300 \text{ К}$. Однако уже при сравнительно слабом допировании системы дырками дальний АФМ-порядок исчезает во всем диапазоне температур. Такое поведение достаточно хорошо моделируется путем введения фрустрации [12]. Кластерные расчеты указывают на наличие достаточно большого параметра фрустрации $I_2/I_1 \sim 0.1$ даже для недопированного LSCO [13]. Количественное рассмотрение спиновой подсистемы проводится в рамках сферически-симметричной самосогласованной теории [14]–[16]. В этой теории подсистема локализованных на ионах меди спиновых моментов рассматривается в состоянии $SU(2)$ -инвариантной квантовой спиновой жидкости, которое обладает сферической симметрией в спиновом пространстве. Это означает, что спиновые корреляционные функции $C_j = \langle \vec{S}_f \vec{S}_{f+r_j} \rangle$ (где r_j – радиус j -й координационной сферы) удовлетворяют соотношениям $C_j = 3\langle S_f^x S_{f+r_j}^x \rangle = 3\langle S_f^y S_{f+r_j}^y \rangle = 3\langle S_f^z S_{f+r_j}^z \rangle$ и $\langle S_f^\alpha \rangle = 0$, где S_f^α – оператор спина вдоль направления $\alpha = x, y, z$ на ионе меди в узле f .

3. ОБОБЩЕННАЯ МОДЕЛЬ РЕШЕТКИ КОНДО

Рассмотрим для простоты случай $U_p = V_{pd} = t = 0$. При этих условиях гамильтониан трехзонной модели Эмери (1) существенно упрощается:

$$\hat{\mathcal{H}}_{pd} = \sum_f (\varepsilon_d \hat{n}_f^d + U_d \hat{n}_{f\uparrow}^d \hat{n}_{f\downarrow}^d) + \varepsilon_p \sum_l \hat{n}_l^p + t_{pd} \sum_{f,\delta,\sigma} (\vartheta(\delta) d_{f\sigma}^+ p_{f+\delta,\sigma} + \text{э.с.}). \quad (4)$$

Как известно [8], [9], в режиме СЭК, когда $U_d > \varepsilon_{pd} = \varepsilon_p - \varepsilon_d \gg t_{pd}$, оператор (4) можно редуцировать к гамильтониану спин-фермионной модели, гильбертово про-

странство которой характеризуется гомеополлярными состояниями ионов меди:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{\text{sp-f}} = N(\varepsilon_d - 4\tau) + \varepsilon_p \sum_f (\hat{n}_{f+\delta_x}^p + \hat{n}_{f+\delta_y}^p) + 2\tau(1 - \eta) \sum_{f, \delta_1, \sigma} u_{\delta_1} p_{f+\delta, \sigma}^+ p_{f+\delta_1, \sigma} + \\ + 4\tau(1 + \eta) \sum_{f, \delta_1, \sigma, \sigma', \alpha} u_{\delta_1} p_{f+\delta, \sigma}^+ (S_f^\alpha \hat{\sigma}_{\sigma\sigma'}^\alpha) p_{f+\delta_1, \sigma'}, \end{aligned} \quad (5)$$

где введены обозначения $\tau = t_{pd}^2/\varepsilon_{pd}$, $\eta = \varepsilon_{pd}/(U_d - \varepsilon_{pd})$, $u_{\delta_1} = \vartheta(\delta)\vartheta(\delta_1)/4$. В выражении (5) N – число элементарных ячеек в плоскости CuO_2 , а $\hat{\sigma}^{x(y,z)}$ – матрицы Паули.

Проведем для операторов $p_{f+\delta_{x(y)}, \sigma}$ переход в представление квазиимпульса:

$$p_{k, \delta_x, \sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_f e^{-ikf} p_{f+\delta_x, \sigma}, \quad p_{k, \delta_y, \sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_f e^{-ikf} p_{f+\delta_y, \sigma}, \quad (6)$$

и определим новые ϕ - и ψ -операторы [17]–[20]

$$\phi_{k\sigma} = \frac{s_{kx} p_{k, \delta_x, \sigma} + s_{ky} p_{k, \delta_y, \sigma}}{s_k}, \quad \psi_{k\sigma} = \frac{s_{ky} p_{k, \delta_x, \sigma} - s_{kx} p_{k, \delta_y, \sigma}}{s_k}, \quad (7)$$

где

$$s_{kx} = \sin \frac{k_x}{2}, \quad s_{ky} = \sin \frac{k_y}{2}, \quad s_k = \sqrt{s_{kx}^2 + s_{ky}^2}. \quad (8)$$

Применив обратное преобразование Фурье, введем операторы $\phi_{f\sigma}$ и $\psi_{f\sigma}$ в представлении Ванье:

$$\phi_{k\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_f e^{-ikf} \phi_{f\sigma}, \quad \psi_{k\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_f e^{-ikf} \psi_{f\sigma}. \quad (9)$$

Тогда эффективный гамильтониан купратных ВТСП во втором порядке теории возмущений по t_{pd} в узельном представлении записывается в виде

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{\text{eff}}^\phi = N(\varepsilon_d - 4\tau) + \tilde{\varepsilon}_\phi \sum_{f, \sigma} \phi_{f\sigma}^+ \phi_{f\sigma} + \varepsilon_p \sum_{f, \sigma} \psi_{f\sigma}^+ \psi_{f\sigma} - t_g \sum_{f, g, \sigma} \phi_{f\sigma}^+ \phi_{f+g, \sigma} + \\ + 4\tau(1 + \eta) \sum_{f, n, m, \sigma, \sigma_1, \alpha} (s_n s_m^*) \phi_{f-m, \sigma}^+ (S_f^\alpha \hat{\sigma}_{\sigma\sigma_1}^\alpha) \phi_{f-n, \sigma_1}, \end{aligned} \quad (10)$$

где $\tilde{\varepsilon}_\phi = \varepsilon_p + 2\tau(1 - \eta)$, $t_g = \tau(1 - \eta)/2$ и $s_f = (\sum_k e^{ikf} s_k)/N$.

Важной особенностью гамильтониана (10) является отсутствие взаимодействия ψ -фермионов и дырок на d -орбиталях ионов меди. Взаимодействие между состояниями ϕ -фермионов и d -орбиталями ионов меди описывается последним слагаемым и отражает процессы рассеяния ϕ -носителей тока на локализованных спиновых моментах с переворотом спина, т. е. процессы рассеяния Кондо. Существенно, что эти процессы спин-коррелированных перескоков ϕ -фермионов осуществляются между сколь угодно далекими ячейками.

При характерных для купратов значениях параметров модели Эмери [21], [22] $t_{pd} = 1.3 \text{ эВ}$, $\varepsilon_{pd} = 3.6 \text{ эВ}$ и $U_d = 10.5 \text{ эВ}$ получаем, что $\tau = 0.47 \text{ эВ}$, $\eta = 0.52$, $t_g = 0.11 \text{ эВ}$. Параметры перекрытий $(s_n s_m)$ определяются только геометрией решетки

и быстро уменьшаются с увеличением номера координационных сфер решетки ионов меди n и m :

$$\begin{aligned} (s_0 s_0) &= 0.920, & (s_1 s_0) &= (s_g s_0) = -0.136, & (s_2 s_0) &= (s_d s_0) = -0.022, \\ (s_3 s_0) &= (s_2 g s_0) = -0.010, & (s_1 s_1) &= (s_g s_g) = 0.020, & (s_2 s_1) &= 0.003. \end{aligned} \quad (11)$$

Покажем, что процессы рассеяния Кондо приводят к формированию спин-поляронных состояний, энергия которых расположена значительно ниже энергии ε_p . Это означает, что низкоэнергетическая динамика фермионов плоскости CuO_2 определяется только спиновыми поляронами, а подсистему ψ -фермионов можно не учитывать.

Опуская несущественную постоянную, представим гамильтониан в виде суммы одноузельных членов и слагаемых, описывающих перескоки ϕ -дырки:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{\text{eff}}^{\phi} &= \tilde{\varepsilon}_{\phi} \sum_{f,\sigma} \phi_{f\sigma}^+ \phi_{f\sigma} + \hat{J}_{\phi-d} + \varepsilon_p \sum_{f,\sigma} \psi_{f\sigma}^+ \psi_{f\sigma} + \hat{t}_g^{\phi} + \hat{t}^{\text{sc}}, \\ \hat{J}_{\phi-d} &= \frac{J_{\phi-d}}{2} \sum_{f,\sigma,\sigma_1,\alpha} \phi_{f\sigma}^+ (S_f^{\alpha} \hat{\sigma}_{\sigma\sigma_1}^{\alpha}) \phi_{f\sigma_1} = J_{\phi-d} \sum_f \vec{S}_f \vec{s}_f^{\phi}, \\ J_{\phi-d} &= 8\tau(1+\eta)(s_0 s_0), \quad \hat{t}_g^{\phi} = -t_g \sum_{f,g,\sigma} \phi_{f\sigma}^+ \phi_{f+g,\sigma}, \\ \hat{t}^{\text{sc}} &= 4\tau(1+\eta) \sum_{f,n,m,\sigma,\sigma_1,\alpha} (1 - \delta_{m0} \delta_{n0}) (s_n s_m) \phi_{f-m,\sigma}^+ (S_f^{\alpha} \hat{\sigma}_{\sigma\sigma_1}^{\alpha}) \phi_{f-n,\sigma_1}. \end{aligned} \quad (12)$$

В выражении для $\hat{t}^{\text{sc}}$ наличие множителя $1 - \delta_{m0} \delta_{n0}$ (где δ_{mn} – символ Кронекера) указывает на отсутствие под знаком суммы слагаемого, у которого все три узла совпадают. Поэтому оператор $\hat{t}^{\text{sc}}$ описывает только спин-коррелированные перескоки дырки.

В эффективном гамильтониане (12) самым большим является $(\phi-d)$ -обменное взаимодействие на одном узле: $\hat{J}_{\phi-d}$ с параметром $J_{\phi-d}$. Оно приводит на каждом узле к формированию двух уровней. Нижний уровень отвечает $(\phi-d)$ -синглетному состоянию с энергией $\tilde{\varepsilon}_{\phi}^{-} = \tilde{\varepsilon}_{\phi} - 3J_{\phi-d}/4$ и с волновой функцией $|\varphi_f\rangle = \varphi_f^{+} |O\rangle$, где $\varphi_f^{+} = (\phi_{f\uparrow}^{+} Z_f^{\downarrow 0} + Z_f^{\uparrow 0} \phi_{f\downarrow}^{+})/\sqrt{2}$. Здесь при записи оператора локализованного спина используется представление через операторы Хаббарда: $Z_f^{\lambda_1 \lambda_2} = |\lambda_1\rangle\langle\lambda_2|$, а кет-вектор $|O\rangle$ отвечает вакууму одноузельного кластера. Верхний трижды вырожденный уровень с энергией $\tilde{\varepsilon}_{\chi}^{+} = \tilde{\varepsilon}_{\phi} + J_{\phi-d}/4$ соответствует трем $(\phi-d)$ -триплетным состояниям с волновыми функциями

$$|\chi_{fm}\rangle = \chi_{fm}^{+} |O\rangle, \quad m = -1, 0, 1, \quad (13)$$

где

$$\chi_{f0}^{+} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_{f\uparrow}^{+} Z_f^{\downarrow 0} - Z_f^{\uparrow 0} \phi_{f\downarrow}^{+}), \quad \chi_{f,+1}^{+} = \phi_{f\uparrow}^{+} Z_f^{\uparrow 0}, \quad \chi_{f,-1}^{+} = \phi_{f\downarrow}^{+} Z_f^{\downarrow 0}.$$

Обсуждаемое расщепление уровней качественно аналогично тому, которое возникает при рассмотрении кластера и полярона Занга–Райса [23].

Для обоснования концепции спинового полярона определим расстояние

$$\Delta_{\varepsilon_p = \varepsilon_{\psi}; \tilde{\varepsilon}_{\phi}^{-}} = \varepsilon_p - \tilde{\varepsilon}_{\phi}^{-}$$

между уровнем $\varepsilon_\psi = \varepsilon_p$, отвечающим состояниям ψ -фермионов, и синглетным уровнем $\tilde{\varepsilon}_\varphi^-$:

$$\Delta_{\varepsilon_p=\varepsilon_\psi;\tilde{\varepsilon}_\varphi^-} = \varepsilon_p - \tilde{\varepsilon}_\phi + \frac{3}{4}J_{\phi-d} \approx 2\tau[5 + 7\eta]. \quad (14)$$

Низкочастотная часть дырочного спектра формируется вблизи нижнего одноузельного уровня $\tilde{\varepsilon}_\varphi^-$ и определяется в первую очередь движением поляронного состояния $|\varphi_f\rangle \rightarrow |\varphi_{f+g}\rangle$. Если полуширина W зоны такого движения, обусловленная членами $\hat{t}_g^\phi$ и $\hat{t}^{\text{sc}}$ в формуле (12), оказывается меньше расстояния $\Delta_{\varepsilon_p=\varepsilon_\psi;\tilde{\varepsilon}_\varphi^-}$, то ψ -носители можно не учитывать.

Ширина $2W$ зоны, обусловленной движением поляронов, обязана демонстрировать поляронное сужение и, во всяком случае, должна быть пропорциональна спин-спиновой корреляционной функции $C_g = \langle \vec{S}_f \vec{S}_{f+g} \rangle \simeq -0.2 \div -0.3$ (характерные значения для двумерного АФМ в спин-жидкостном состоянии). Это очевидно из того, что движению $|\varphi_f\rangle \rightarrow |\varphi_{f+g}\rangle$ всегда отвечает комбинация операторов $\varphi_{f+g}^+ \varphi_f$, содержащая спиновые операторы на соседних узлах.

Полуширину W_g зоны, обусловленную членом $\hat{t}_g^\phi$ в формуле (12), можно оценить как $W_g = 2t_g|C_g| = \tau(1 - \eta)|C_g|$. Сравнивая это выражение с формулой (14), убеждаемся, что $W_g \ll \Delta_{\varepsilon_p=\varepsilon_\psi;\tilde{\varepsilon}_\varphi^-}$.

Полуширина W_{SC} зоны, обусловленная оператором $\hat{t}^{\text{sc}}$ в (12), определяется слабым

$$\hat{t}_g^{\text{sc}} = t_g^{\text{sc}} \sum_{f,g,\sigma,\sigma_1,\alpha} [\phi_{f+g,\sigma}^+ (S_f^\alpha \hat{\sigma}_{\sigma\sigma_1}^\alpha) \phi_{f\sigma_1} + \text{э. с.}], \quad t_g^{\text{sc}} = 4\tau(1 + \eta)(s_0 s_g), \quad (15)$$

который в операторе $\hat{t}^{\text{sc}}$ содержит максимальное перекрытие $(s_0 s_g) = -0.136$ (см. формулы (11)). Параметр t_g^{sc} в тринадцать раз меньше константы $(\phi-d)$ -обменной связи $J_{\phi-d}$. С учетом фактора C_g это приводит к неравенству $W_{\text{SC}} \ll \Delta_{\varepsilon_p=\varepsilon_\psi;\tilde{\varepsilon}_\varphi^-}$.

Полученные неравенства $W_g \ll \Delta_{\varepsilon_p=\varepsilon_\psi;\tilde{\varepsilon}_\varphi^-}$ и $W_{\text{SC}} \ll \Delta_{\varepsilon_p=\varepsilon_\psi;\tilde{\varepsilon}_\varphi^-}$, являющиеся следствием неравенств $J_{\phi-d} \gg t_g^{\text{sc}} \gg t_g$, означают, что в модели (12) можно опустить слабое $\varepsilon_p \sum_{f,\sigma} \psi_{f\sigma}^+ \psi_{f\sigma}$ и ввести концепцию спинового полярона.

В результате гамильтониан (12) приобретает вид гамильтониана решетки Кондо

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{\text{eff}}^{\text{K}} = & \tilde{\varepsilon}_\phi \sum_{f,\sigma} \phi_{f\sigma}^+ \phi_{f\sigma} + J_{\phi-d} \sum_f \vec{S}_f \vec{s}_f^\phi - t_g \sum_{f,g,\sigma} \phi_{f\sigma}^+ \phi_{f+g,\sigma} + \\ & + 4\tau(1 + \eta) \sum_{f,m,n,\sigma,\sigma_1,\alpha} (1 - \delta_{m0} \delta_{n0}) (s_n s_m) \phi_{f-m,\sigma}^+ (S_f^\alpha \hat{\sigma}_{\sigma\sigma_1}^\alpha) \phi_{f-n,\sigma_1}. \end{aligned} \quad (16)$$

Если считать, что в выражении (16) в главном приближении далекие спин-коррелированные перескоки можно не учитывать (оставляя только члены с $(s_0 s_g)$), то в результате получается гамильтониан, соответствующий усеченной модели решетки Кондо:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{\text{eff}}^{\text{Kr}} = & \tilde{\varepsilon}_\phi \sum_{f,\sigma} \phi_{f\sigma}^+ \phi_{f\sigma} + J_{\phi-d} \sum_f \vec{S}_f \vec{s}_f^\phi - t_g \sum_{f,g,\sigma} \phi_{f\sigma}^+ \phi_{f+g,\sigma} + \\ & + t_g^{\text{sc}} \sum_{f,g,\sigma,\sigma_1,\alpha} [\phi_{f+g,\sigma}^+ (S_f^\alpha \hat{\sigma}_{\sigma\sigma_1}^\alpha) \phi_{f\sigma_1} + \text{э. с.}]. \end{aligned} \quad (17)$$

В последней сумме этого выражения индекс f пробегает все узлы решетки ионов меди, а индекс g – только ближайшие к f узлы. На основе модели (17) в работах [24], [25] изучались спектральные свойства фермиевских квазичастиц в купратных ВТСП.

4. БАЗИСНЫЕ ОПЕРАТОРЫ И ПРОЕКЦИОННЫЙ МЕТОД

В рамках проекционного метода Цванцига–Мори [26], [27] вводится набор базисных операторов, отвечающих зарядовым возбуждениям. В нашем случае в качестве базисных операторов удобно выбрать следующие три:

$$A_{1f\sigma} = \phi_{f\sigma}, \quad A_{2f\sigma} = \sum_{\sigma_1, \alpha} (S_f^\alpha \hat{\sigma}_{\sigma\sigma_1}^\alpha) \phi_{f\sigma_1}, \quad A_{3f\sigma} = \sum_{\sigma_1, \alpha} (S_f^\alpha \hat{\sigma}_{\sigma\sigma_1}^\alpha) \phi_{f+g, \sigma_1}. \quad (18)$$

Базис (18) строится стандартным способом. На первом шаге в качестве A_{1f} выбирается оператор “голой” дырки $\phi_{f\sigma}$. Выбор следующих операторов диктуется уравнением движения для A_{1f} . В результате коммутации $[\phi_{f\sigma}, \hat{\mathcal{H}}_{\text{eff}}^{\text{Kr}}]$ возникают новые операторы типа A_{2f} и A_{3f} из формулы (18). Эти операторы включаются в базис, и для них тоже пишутся уравнения движения. Если необходимости дальнейшего увеличения базиса нет, то уравнения движения на операторы A_{jf} ($j = 1, 2, 3$) проецируются на этот же базис.

Проецирование удобно осуществлять в рамках формализма уравнений движения для запаздывающих функций Грина ($i, j = 1, 2, 3$): $G_{ij}(k, \omega) = \langle\langle A_{ki} | A_{kj}^+ \rangle\rangle_\omega$, где $A_{jk\sigma} = \sum_f e^{-ikf} A_{jf\sigma} / \sqrt{N}$ – фурье-образы операторов (18).

Чтобы осуществить замыкание уравнений движения, имеющее вид

$$\omega \langle\langle A_{ki} | A_{kj}^+ \rangle\rangle_\omega = K_{ij} + \langle\langle [A_{ki}, \hat{\mathcal{H}}_{\text{eff}}^{\text{Kr}}] | A_{kj}^+ \rangle\rangle_\omega, \quad (19)$$

необходимо рассчитать энергетическую матрицу $D_{ij} = \langle\{[A_{ik}, \hat{\mathcal{H}}_{\text{eff}}^{\text{Kr}}], A_{jk}^+\}\rangle$ и матрицу $K_{ij} = \langle\{A_{ik}, A_{jk}^+\}\rangle$. Тогда фермиевская функция Грина находится из системы уравнений, имеющей матричную форму: $\hat{G} = (\omega - \hat{D} \hat{K}^{-1})^{-1} \hat{K}$, а спектр фермиевских возбуждений определяется полюсами этой функции Грина

$$G_{ij}(k, \omega) = \sum_{n=1}^3 \frac{z_{(i,j)}^n(k)}{\omega - E_n(k)}, \quad i, j = 1, 2, 3.$$

Более подробное изложение данного метода можно найти, например, в работе [28].

Задача нахождения спектра $E_n(k)$ и вычетов функций Грина $z_{(i,j)}^n(k)$, таким образом, сводится к вычислению матричных элементов K_{ij} и D_{ij} . Эти матричные элементы, рассчитанные в базисе трех операторов (18) с усеченным гамильтонианом решетки Кондо (17), приведены в приложении.

Аналогичную процедуру вычисления матриц $\hat{K}(k)$ и $\hat{D}(k)$ в базисе трех операторов (18) можно провести и для полного гамильтониана (16). Поскольку, однако, в этом случае матричные элементы получаются громоздкими, мы не будем приводить их явный вид.

Применяемый метод замыкания уравнений движения для функций Грина справедлив в широкой температурной области. В практическом отношении наибольший интерес представляют свойства купратных ВТСП при температурах $T \leq 100$ К.

Учитывая, что характерные энергетические параметры, определяющие энергетическую структуру спин-поляронных состояний, имеют порядок величины 0.1–0.5 эВ, получаем, что в рассматриваемой температурной области изучение спектра фермиевских возбуждений можно проводить в низкотемпературном приближении.

Более сложным является вопрос о зависимости энергии фермиевских квазичастиц от концентрации кислородных дырок. Однако при решении задачи о спин-поляронных состояниях в нормальной фазе для низких температур ситуация значительно упрощается. Действительно, в узкой концентрационной области, когда антиферромагнетизм уже нарушен, а сверхпроводимости еще нет, концентрацию дырок можно считать неизменной. При этом параметр легирования является малой величиной $x \simeq 5 \cdot 10^{-2}$.

Элементы матриц $\hat{K}$ и $\hat{D}$ в общем случае зависят не только от спин-спиновых корреляторов, но и от зарядовых, а также от спин-зарядовых корреляционных функций. Их концентрационная зависимость исследовалась нами ранее в работе [29]. Не останавливаясь на деталях, отметим лишь, что в рассматриваемом случае слабого легирования вклад зарядовых и спин-зарядовых корреляторов оказывается несущественным и им можно пренебречь. Это означает, что в интересующей нас узкой области легирования задачу о нахождении спин-поляронных состояний и спектра фермиевских возбуждений можно решать в однодырочном приближении.

Поскольку энергетическая структура спин-поляронных возбуждений рассматривается для случая, когда подсистема локализованных спинов находится в состоянии квантовой спиновой жидкости, естественно, что спин-спиновые корреляторы существенно влияют на результат. При этом в теорию входят как парные спин-спиновые корреляторы C_j с $j = 1, 2, 3, 4$ и $j = 6$, так и трехузельные. Однако в спин-жидкостной фазе трехузельные корреляторы равны нулю. Что касается спиновых корреляторов с большим числом узлов, то они в рассматриваемом приближении не возникают.

5. РОЛЬ ДАЛЬНИХ СПИН-КОРРЕЛИРОВАННЫХ ПЕРЕСКОКОВ

В этом параграфе мы останавливаемся на обсуждении вопроса, связанного с наличием в полученном полном эффективном гамильтониане спин-коррелированных перескоков между узлами решетки Ванье из дальних координационных сфер. Важность спин-коррелированных перескоков кислородных дырок между узлами, находящимися на больших расстояниях, продемонстрируем на примере вычисления спектра фермиевских возбуждений. На первый взгляд было бы естественным ожидать, что из-за относительно быстрого спада эффективных интегралов перескоков, связанного с наличием мультипликативных факторов s_n, s_m , перескоки между узлами из дальних координационных сфер дают малый вклад в энергетический спектр. В действительности, как видно из дальнейшего, это не так. Связано это прежде всего с тем, что при возрастании радиуса координационной сферы растет и число узлов, на которые может произойти перескок дырки. Эти аргументы и лежат в основе проведения исследования, результаты которого представлены ниже.

Прежде всего приведем результаты расчета спектра фермиевских возбуждений, рассчитанного на основе полученной обобщенной модели решетки Кондо (16). На рис. 1 сплошная жирная линия соответствует ветви спин-поляронных возбуждений $E_{sp}(k)$, найденной из решения дисперсионного уравнения $|\omega - \hat{D}(k)\hat{K}^{-1}(k)| = 0$. Это

Рис. 1. Дисперсионные кривые нижней зоны спин-поляронных возбуждений для трех эффективных гамильтонианов модели Эмери. Сплошная жирная кривая рассчитана для полного гамильтониана решетки Кондо (16), тонкая сплошная кривая – для модели решетки Кондо (17), в которой отброшены дальние перескоки, штриховая кривая – для спин-фермионной модели (5). Расчеты выполнены при следующих значениях параметров моделей: $\tau = 0.47$ эВ, $\eta = 0.52$. Для простоты мы положили $I = 0$. Значения парных спиновых корреляционных функций выбирались следующими: $C_1 = -0.255$, $C_2 = 0.075$, $C_3 = 0.064$, а все C_j при $j > 3$ равны нулю. Точки симметрии зоны Бриллюэна имеют координаты $\Gamma = (0, 0)$, $M = (\pi, \pi)$, $X = (\pi, 0)$, $X' = (0, \pi)$. На вставке показаны дисперсионные кривые, описывающие все три решения кубического дисперсионного уравнения $|\omega - \hat{D}\hat{K}^{-1}| = 0$ для гамильтониана модели решетки Кондо (16) в базисе (18). Нижняя кривая совпадает с жирной сплошной кривой основного рисунка. Горизонтальной штриховой прямой на вставке показано положение уровня энергии неактивной ψ -орбитали.

решение соответствует нижней из трех ветвей энергетического спектра (см. вставку на рис. 1).

Сплошная тонкая линия построена для гамильтониана усеченной модели решетки Кондо (17), когда в гамильтониане учитываются только перескоки между ближайшими соседями. В каждом из этих двух случаев использовался один и тот же базис из трех операторов (18) с соответствующими матричными элементами K_{ij} и D_{ij} . Видно, что в направлении Γ – M тонкая кривая характеризуется минимумом в окрестности точки $(\pi/2, \pi/2)$ зоны Бриллюэна, а ширина зоны спиновых поляронов не превышает 0.2 эВ.

Из сравнения двух отмеченных кривых следует, что несмотря на наличие мажорирующих факторов s_n и s_m учет дальних перескоков кардинально меняет характеристики спин-поляронной зоны, приводя к пятикратному (почти на порядок)

увеличению ее ширины. Это означает, что пренебрежение дальними перескоками приводит к большой ошибке в эффективной массе фермиевских носителей. Последнее обстоятельство имеет первостепенное значение для кинетики и низкотемпературной термодинамики купратных ВТСП.

Отметим, что ранее спектр спиновых поляронов в полной модели решетки Кондо (16) рассчитывался в работах [28], [30]. При этом гамильтониан записывался в форме (5), а при расчете дисперсионных кривых использовался отличающийся от (18) набор базисных операторов:

$$\bar{A}_{1f\sigma} = p_{f+\delta_x, \sigma}, \quad \bar{A}_{2f\sigma} = p_{f+\delta_y, \sigma}, \quad \bar{A}_{3f\sigma} = \frac{1}{2} \sum_{\delta, \sigma_1, \alpha} (S_f^\alpha \hat{\sigma}_{\sigma\sigma_1}^\alpha) p_{f+\delta, \sigma_1}. \quad (20)$$

Полученный в работах [28], [30] спин-поляронный спектр воспроизведен на рис. 1 с помощью штриховой кривой.

Видно, что жирная сплошная и штриховая кривые, рассчитанные для одного и того же гамильтониана (16), но с использованием разных базисов операторов (18) и (20), демонстрируют хорошее совпадение. Небольшой выигрыш по энергии жирной сплошной кривой обусловлен тем, что базис (18) учитывает большее число спин-зарядовых степеней свободы, чем базис (20). Действительно, в базисе (18) спин-зарядовые корреляции учитываются двумя наборами базисных операторов A_{2f} и A_{3f} , в то время как в базисе (20) – только одним набором $\bar{A}_{3f}$. При этом чисто зарядовые степени свободы, наоборот, в базисе (20) учитываются двумя наборами операторов $\bar{A}_{1f}$ и $\bar{A}_{2f}$, а в базисе (18) – одним набором A_{1f} . Однако в отсутствие прямых (p - p)-перескоков и при учете условия $\varepsilon_{pd} \gg t_{pd}$ последнее обстоятельство не дает преимуществ базису (20).

На вставке рис. 1 сплошными линиями показаны все три дисперсионные кривые, отвечающие полной модели решетки Кондо (16) и рассчитанные в базисе трех операторов (18). Горизонтальная штриховая линия отвечает энергии неактивной ψ -орбитали. Видно, что нижняя спин-поляронная зона отщеплена от затравочной энергии кислородных p -орбиталей ε_p (принятой здесь за ноль) вниз на величину порядка 3 эВ.

6. РОЛЬ ПРЯМЫХ КИСЛОРОД-КИСЛОРОДНЫХ ПЕРЕСКОКОВ

Важной особенностью дырочного спектра в купратных ВТСП является наличие абсолютного минимума в окрестности точки $(\pi/2, \pi/2)$ зоны Бриллюэна. Дисперсионные кривые на рис. 1 демонстрируют минимум только в направлении Γ – M , но не в направлении M – M' . Такое “неправильное” поведение связано с тем, что при построении эффективного гамильтониана (16) были отброшены прямые (p - p)-перескоки. Учет этих перескоков, очевидно, приведет к ренормировке интеграла туннелирования t_g между ближайшими соседями, а также к индуцированию новых перескоков между далекими ячейками с быстро убывающей с расстоянием интенсивностью.

Рассмотрим для примера перескок между следующими за ближайшими ячейками с интегралом туннелирования t_d , являющийся самым большим перескоком из индуцированных. Отвечающий этим процессам оператор кинетической энергии

$$\hat{t}^d = -t_d \sum_{f,d,\sigma} \phi_{f\sigma}^+ \phi_{f+d,\sigma} \quad (21)$$

Рис. 2. Спектр (а) и спектральная интенсивность (б) нижней зоны спин-поляронных состояний, рассчитанные с учетом перескоков квазичастиц между следующими за ближайшими ячейками (21). Сплошные линии отвечают полной модели решетки Кондо (16), штриховые линии – редуцированной модели Кондо (17). В обоих случаях использовался базис трех операторов (18). Интеграл туннелирования $t_d = 0.05$ эВ. Остальные параметры модели имеют те же значения, что и на рис. 1.

следует добавить к гамильтонианам (16) и (17). При этом каждый матричный элемент D_{ij} энергетической матрицы ренормируется аддитивно на величину

$$t_{ij}^d = \langle \{ [A_{ik\sigma}, \hat{t}^d], A_{jk\sigma}^+ \} \rangle, \quad i, j = 1, 2, 3.$$

Вычисление матричных элементов $t_{ij}^d = t_{ji}^d$ дает соотношения

$$\begin{aligned} t_{11}^d &= -4t_d\gamma_{2k}, & t_{12}^d &= t_{13}^d = 0, & t_{22}^d &= -4t_dC_2\gamma_{2k}, & t_{23}^d &= -8t_d(C_1\gamma_{1k} + C_4\gamma_{4k}), \\ t_{33}^d &= -8t_d\left(\frac{3}{4} + 3C_2\gamma_{2k} + 2C_3\gamma_{3k} + C_5\gamma_{5k} + C_7\gamma_{7k}\right), \end{aligned} \quad (22)$$

где $\gamma_{5k} = \cos 2k_x \cos 2k_y$, $\gamma_{7k} = (\cos k_x \cos 3k_y + \cos 3k_x \cos k_y)/2$.

На рис. 2а сплошной линией изображен спектр спиновых поляронов, рассчитанный в базисе трех операторов (18) на основе полного гамильтониана решетки Кондо (16), расширенного за счет добавления оператора $\hat{t}^d$, учитывающего перескоки в следующие за ближайшими соседние ячейки. Штриховой линией на этом же рисунке показан спин-поляронный спектр усеченной модели Кондо (17), полученный в том же базисе (18) с учетом оператора перескоков $\hat{t}^d$.

Сравнение этих кривых с аналогичными зависимостями на рис. 1 показывает, что учет $(p-p)$ -перескоков приводит к появлению минимума в спектре фермиевских спин-поляронных возбуждений в окрестности точек $(\pm\pi/2, \pm\pi/2)$ зоны Бриллюэна как в направлении $\Gamma-M$, так и в направлении $X-X'$. Это важное обстоятельство обуславливает наличие в данных точках небольших дырочных карманов, которые наблюдаются в экспериментах по фотоэмиссии электронов с угловым разрешением (ARPES) в слабелегированных дырочных ВТСП на основе меди. Подробное исследование эволюции поверхности Ферми при легировании в соединении $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$

в рамках проекционного метода проводилось в работе авторов [30]. Полученные в этой работе поверхности Ферми и зависимости импульса Ферми от x продемонстрировали хорошее согласие с результатами ARPES-измерений [31].

На рис. 2б приведена зависимость от волнового вектора k вычетов $z_{(1,1)}^{(1)}(k)$ функции Грина $G_{11}(k, \omega)$. Эти вычеты определяют вклад состояний “голой” дырки в нижнее спин-поляронное состояние для каждого значения k . Видно, что в случае полного гамильтониана решетки Кондо (16) вклад “голых” дырок в спин-поляронное состояние обращается в ноль в Γ -точке зоны Бриллюэна. Такое поведение полностью согласуется с результатами расчетов функции $z_{(1,1)}^{(1)}(k)$, выполненных в рамках спин-фермионной модели (5) в базисе операторов (20) [32], [33]. Однако отмеченная особенность не воспроизводится для усеченного гамильтониана (17). В этом случае, как следует из рис. 2б, в Γ -точке зоны Бриллюэна вычет функции Грина $z_{(1,1)}^{(1)}(k)$ не обращается в ноль. Данное обстоятельство еще раз демонстрирует важность учета дальних спин-коррелированных перескоков.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе продемонстрирован регулярный способ получения эффективного низкоэнергетического гамильтониана для трехзонной модели Эмери. Главный вывод проведенного рассмотрения связан с утверждением, что эффективной низкоэнергетической моделью электронного строения плоскости CuO_2 является обобщенная модель регулярной решетки Кондо. Ее важнейшая особенность заключается в наличии эффективных спин-коррелированных перескоков фермионов между узлами решетки Ванье из дальних координационных сфер.

Для полученной обобщенной модели решетки Кондо проанализирована роль дальних спин-коррелированных перескоков. На основе сравнения дисперсионных кривых спин-поляронного спектра и спектральной плотности “голых” дырок, рассчитанных для полной обобщенной модели решетки Кондо (16) и для ее усеченного варианта (17), наглядно продемонстрирована существенная роль дальних спин-коррелированных перескоков. В частности, показано, что учет этих взаимодействий приводит к значительному (пятикратному) увеличению ширины спин-поляронной зоны, а также к дополнительному понижению минимальной энергии спин-поляронной квазичастицы.

Проведен анализ роли прямых кислородных (p - p)-перескоков. Показано, что эти перескоки необходимо учитывать для воспроизведения наблюдаемого экспериментально минимума закона дисперсии спин-поляронных возбуждений в точках $(\pm\pi/2, \pm\pi/2)$ зоны Бриллюэна.

Отметим, что ранее в рамках обычной модели решетки Кондо для допированного двумерного АФМ рассматривались псевдощелевое поведение спектральной функции носителей тока и аномальное температурное поведение кинетических коэффициентов [34], [35]. Однако эти исследования содержали существенный недостаток, обусловленный игнорированием процессов движения дырок с переворотом спина. В результате для достижения удовлетворительного согласия теории и эксперимента приходилось искусственным образом вводить дополнительные прыжки на первые три ближайших соседа с тем, чтобы дно затравочной зоны (т. е. без взаимодействия со спинами) находилось вблизи границы магнитной зоны Бриллюэна. Отмеченная проблема не возникает, если для описания спектральных свойств купратов ВТСП использовать полученную в настоящей работе модель решетки Кондо (16).

ПРИЛОЖЕНИЕ

Элементы матриц $\hat{D}(k)$ и $\hat{K}(k)$, рассчитанные в базисе трех операторов (18) с редуцированным гамильтонианом решетки Кондо (17), имеют вид ($D_{ij} = D_{ji}$, $K_{ij} = K_{ji}$)

$$\begin{aligned}
 K_{11} &= 1, & K_{12} &= K_{13} = 0, & K_{22} &= \frac{3}{4}, & K_{23} &= 4C_1\gamma_{1k}, \\
 K_{33} &= 3 + 8C_2\gamma_{2k} + 4C_3\gamma_{3k}; \\
 D_{11} &= \varepsilon_p + 4t_g(1 - \gamma_{1k}), & D_{12} &= \frac{3}{8}J_{\phi-d} + t_g^{\text{sc}}(3 + 4C_1)\gamma_{1k}, \\
 D_{13} &= 2J_{\phi-d}C_1\gamma_{1k} + 4t_g^{\text{sc}}\left(\frac{3}{4} + 4C_1\gamma_{1k}^2 + 2C_2\gamma_{2k} + C_3\gamma_{3k}\right), \\
 D_{22} &= \frac{3}{4}(\varepsilon_p + 4t_g) - 4t_gC_1\gamma_{1k} - \frac{3}{8}J_{\phi-d} - 8t_g^{\text{sc}}C_1\gamma_{1k}, \\
 D_{23} &= (\varepsilon_p + 4t_g)4C_1\gamma_{1k} - t_g(3 + 8C_2\gamma_{2k} + 4C_3\gamma_{3k}) - \\
 &\quad - 2J_{\phi-d}C_1\gamma_{1k} - 4t_g^{\text{sc}}\left(\frac{3}{4} - C_1 + 2C_2\gamma_{2k} + C_3\gamma_{3k}\right), \\
 D_{33} &= (\varepsilon_p + 4t_g)(3 + 8C_2\gamma_{2k} + 4C_3\gamma_{3k}) - 4t_g(9C_1\gamma_{1k} + 6C_4\gamma_{4k} + C_6\gamma_{6k}) + \\
 &\quad + 2J_{\phi-d}C_1 - 32t_g^{\text{sc}}C_1\gamma_{1k},
 \end{aligned} \tag{П.1}$$

где функции γ_{jk} ($j = 1, 2, 3, 4, 6$) – инварианты квадратной решетки:

$$\begin{aligned}
 \gamma_{1k} &= \frac{\cos k_x + \cos k_y}{2}, & \gamma_{2k} &= \cos k_x \cos k_y, & \gamma_{3k} &= \frac{\cos 2k_x + \cos 2k_y}{2}, \\
 \gamma_{4k} &= \frac{\cos 2k_x \cos k_y + \cos 2k_y \cos k_x}{2}, & \gamma_{6k} &= \frac{\cos 3k_x + \cos 3k_y}{2}.
 \end{aligned}$$

При получении выражений (П.1) учитывались соотношения ($\tilde{S}_m = \sum_{\alpha} S_m^{\alpha} \hat{\sigma}^{\alpha}$)

$$\langle \tilde{S}_m \tilde{S}_n \rangle = C_{m-n}, \quad \langle \tilde{S}_f \tilde{S}_m \tilde{S}_n \rangle = -\delta_{f,m} C_{f-n} - \delta_{m,n} C_{f-m} + \delta_{f,n} C_{f-m},$$

справедливые в $SU(2)$ -инвариантной спин-жидкостной фазе, а также тождество

$$\sum_f s_{f-n} s_{f-m} = \delta_{m,n} - \frac{1}{4} \sum_g \delta(m - n - g), \tag{П.2}$$

где векторы f , n и m пробегает все узлы подрешетки ионов меди, а вектор g принимает четыре значения: $(\pm a, 0)$ и $(0, \pm a)$.

Список литературы

- [1] B. Keimer, S. A. Kivelson, M. R. Norman, S. Uchida, J. Zaanen, “From quantum matter to high-temperature superconductivity in copper oxides”, *Nature*, **518**:7538 (2015), 179–186.
- [2] N. Plakida, *High-Temperature Cuprate Superconductors. Experiment, Theory, and Applications*, Springer, 2010.
- [3] V. J. Emery, “Theory of high- T_c superconductivity in oxides”, *Phys. Rev. Lett.*, **58**:26 (1987), 2794–2797.

- [4] C. M. Varma, S. Schmitt-Rink, E. Abrahams, "Charge transfer excitations and superconductivity in "ionic" metals", *Solid State Commun.*, **62**:10 (1987), 681–685.
- [5] J. E. Hirsch, "Antiferromagnetism, localization, and pairing in a two-dimensional model for CuO_2 ", *Phys. Rev. Lett.*, **59**:2 (1987), 228–231.
- [6] V. J. Emery, G. Reiter, "Mechanism for high-temperature superconductivity", *Phys. Rev. B*, **38**:7 (1988), 4547–4556.
- [7] V. J. Emery, G. Reiter, "Quasiparticles in the copper-oxygen planes of high- T_c superconductors: an exact solution for a ferromagnetic background", *Phys. Rev. B*, **38**:16 (1988), 11938–11941.
- [8] J. Zaanen, A. M. Oles, "Canonical perturbation theory and the two-band model for high- T_c superconductors", *Phys. Rev. B*, **37**:16 (1988), 9423–9438.
- [9] А. Ф. Барабанов, Л. А. Максимов, Г. В. Уймин, "Об элементарных возбуждениях в плоскостях CuO_2 ", *Письма в ЖЭТФ*, **47**:10 (1988), 532.
- [10] P. Prelovšek, "Two band model for superconducting copper oxides", *Phys. Lett. A*, **126**:4 (1988), 287–290.
- [11] H. Matsukawa, H. Fukuyama, "Effective Hamiltonian for high- T_c Cu oxides", *J. Phys. Soc. Japan*, **58**:8 (1989), 2845–2866.
- [12] M. Inui, S. Doniach, M. Gabay, "Doping dependence of antiferromagnetic correlations in high-temperature superconductors", *Phys. Rev. B*, **38**:10 (1988), 6631–6635.
- [13] J. F. Annett, R. M. Martin, A. K. McMahan, S. Satpathy, "Electronic Hamiltonian and antiferromagnetic interactions in La_2CuO_4 ", *Phys. Rev. B*, **40**:4 (1989), 2620–2623.
- [14] J. Kondo, K. Yamaji, *Progr. Theor. Phys.*, **47** (1972), 807.
- [15] H. Shimahara, S. Takada, "Green's function theory of the two-dimensional Heisenberg model-spin wave in short range order", *J. Phys. Soc. Japan*, **60**:7 (1991), 2394–2405.
- [16] А. Ф. Барабанов, В. М. Березовский, "Фазовые переходы второго рода в сферически симметричной теории 2D гейзенберговского фрустрированного антиферромагнетика", *ЖЭТФ*, **106**:4 (1994), 1156–1168.
- [17] B. S. Shastry, " t - J model and nuclear magnetic relaxation in high- T_c materials", *Phys. Rev. Lett.*, **63**:12 (1989), 1288–1291.
- [18] J. H. Jefferson, H. Eskes, L. F. Feiner, "Derivation of a single-band model for CuO_2 planes by a cell-perturbation method", *Phys. Rev. B*, **45**:14 (1992), 7959–7972.
- [19] В. А. Гавричков, С. Г. Овчинников, "Низкоэнергетический спектр электронов в оксидах меди в многозонной p - d модели", *ФТТ*, **40**:2 (1998), 184–190.
- [20] Д. Ф. Дигор, В. А. Москаленко, "Представление Ванье для трехзонной модели Хаббарда", *ТМФ*, **130**:2 (2002), 320–338.
- [21] M. S. Hybertsen, M. Schlüter, N. E. Christensen, "Calculation of Coulomb-interaction parameters for La_2CuO_4 using a constrained-density-functional approach", *Phys. Rev. B*, **39**:13 (1989), 9028–9041.
- [22] M. Ogata, H. Fukuyama, "The t - J model for the oxide high- T_c superconductors", *Rep. Progr. Phys.*, **71**:3 (2008), 036501, 46 pp.
- [23] F. C. Zhang, T. M. Rice, "Effective Hamiltonian for the superconducting Cu oxides", *Phys. Rev. B*, **37**:7 (1988), 3759–3761.
- [24] A. Ramsak, P. Prelovsek, "Comparison of effective models for CuO_2 layers in oxide superconductors", *Phys. Rev. B*, **40**:4 (1989), 2239–2246.
- [25] A. Ramsak, P. Prelovsek, "Dynamics of a fermion in the Kondo-lattice model for strongly correlated systems", *Phys. Rev. B*, **42**:16 (1990), 10415–10426.
- [26] R. Zwanzig, "Memory effects in irreversible thermodynamics", *Phys. Rev.*, **124**:4 (1961), 983–992.
- [27] H. Mori, "Transport, collective motion, and brownian motion", *Progr. Theoret. Phys.*, **33**:3 (1965), 423–455.

- [28] А. Ф. Барабанов, А. А. Ковалев, О. В. Уразаев, А. М. Белемук, Р. Хайн, “Эволюция ферми-поверхности купратов на основе спин-поляронного подхода”, *ЖЭТФ*, **119**:4 (2001), 777–798.
- [29] В. В. Вальков, Д. М. Дзедзисашвили, А. Ф. Барабанов, “Влияние концентрационно-зависимых спин-зарядовых корреляций на эволюцию энергетической структуры двумерной модели Эмери”, *ЖЭТФ*, **145**:6 (2014), 1087–1100.
- [30] Д. М. Дзедзисашвили, В. В. Вальков, А. Ф. Барабанов, “Эволюция ферми-поверхности ансамбля спин-поляронных квазичастиц в $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ ”, *Письма в ЖЭТФ*, **98**:9 (2013), 596–601.
- [31] T. Yoshida, X. J. Zhou, D. H. Lu, S. Komiyama, Y. Ando, H. Eisaki, T. Kakeshita, S. Uchida, Z. Hussain, Z.-X. Shen, A. Fujimori, “Low-energy electronic structure of the high- T_c cuprates $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ studied by angle-resolved photoemission spectroscopy”, *J. Phys.: Condens. Matter*, **19**:12 (2007), 125209, 24 pp.
- [32] R. O. Kuzian, R. Hayn, A. F. Barabanov, L. A. Maksimov, “Spin-polaron damping in the spin-fermion model for cuprate superconductors”, *Phys. Rev. B*, **58**:10 (1998), 6194–6207.
- [33] V. V. Val'kov, D. M. Dzebisashvili, A. F. Barabanov, “ d -Wave pairing in an ensemble of spin polaron quasiparticles in the spin-fermion model of the electronic structure of the CuO_2 plane”, *Phys. Lett. A*, **379**:5 (2015), 421–426.
- [34] А. Ф. Барабанов, А. М. Белемук, “Псевдощелевое состояние двумерной кондо-решетки”, *ЖЭТФ*, **138**:2(8) (2010), 289–294.
- [35] И. А. Ларионов, А. Ф. Барабанов, “Электросопротивление, коэффициент Холла и термоЭДС оптимально допированных высокотемпературных сверхпроводников”, *Письма в ЖЭТФ*, **100**:11 (2014), 811–817.

Поступила в редакцию 23.05.2016,
после доработки 30.06.2016