

ЭФФЕКТИВНЫЙ ГАМИЛЬТониАН ДЛЯ ВТСП-КУПРАТОВ С УЧЕТОМ ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В РЕЖИМЕ СИЛЬНЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ

С. Г. Овчинников, Е. И. Шнейдер*

Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук
660036, Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 18 апреля 2005 г.

Электрон-фононное взаимодействие последовательно выводится из реалистичной многозонной p - d -модели купратов в режиме сильных электронных корреляций. Электронная структура описывается в представлении X -операторов Хаббарда в обобщенном методе сильной связи. Найдена зависимость от волновых векторов диагональных и недиагональных по узлам решетки матричных элементов электрон-фононного взаимодействия для трех мод фононов: дыхательной, апической дыхательной и изгибной. Показано, что взаимодействия дыхательной и изгибной мод с электронами дают вклад в формирование кинков соответственно в направлениях $(0, 0) - (\pi; \pi)$ и $(0; 0) - (\pi; 0)$. Получена низкоэнергетическая t - J^* -модель с фононами, содержащая, наряду с электрон-фононным, и спин-фононное взаимодействие. Исключение фононов дало эффективное электрон-электронное взаимодействие, которое вследствие сильных электронных корреляций зависит от чисел заполнения многоэлектронных термов и от концентрации носителей.

PACS: 71.27.+a, 74.20.-z, 74.72.-h, 74.25.Kc

1. ВВЕДЕНИЕ

Несмотря на очевидный прогресс в исследованиях высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) в слоистых купратах, основной вопрос о механизме ВТСП так и остался невыясненным до настоящего времени. Среди многочисленных механизмов, предложенных на начальном этапе изучения ВТСП, наиболее часто в последнее время обсуждаются два: традиционный механизм за счет электрон-фононного взаимодействия (ЭФВ) и спин-флуктуационный [1]. Последний, как известно, обусловлен сильными электронными корреляциями, приводящими к дальнему антиферромагнитному (АФМ) порядку для недопированных диэлектрических купратов и ближнему АФМ-порядку в области слабодопированных купратов. Интерес к электрон-фононному взаимодействию, которое присутствует во всех веществах и может быть сильным в слоистых купратах из-за особенности их кристаллохимического строения, усилился в последнее время благодаря обнаружению изломов в законах диспер-

сии электронов (кинков) в ARPES-измерениях [2]. Отметим, что кинки обнаружены во многих дырочных купратах, но отсутствуют в электронных с T' -структурой ($\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$). Энергия кинка, отсчитанная от уровня Ферми, $\omega_k \approx 70$ мэВ, практически универсальна, наиболее ярко эффект проявляется в виде излома закона дисперсии в диагональном направлении $\Gamma \rightarrow M$, $(0; 0) - (\pi; \pi)$ зоны Бриллюэна. В окрестности точек $X((\pi; 0), (0; \pi))$ в Bi2212 также обнаружен кинк при энергии $\omega_k \approx 40$ мэВ [3] (см. обзор ARPES-данных в работе [4]), который резко усиливается при понижении температуры ниже T_c . Природа кинка безусловно связана с электрон-бозонным взаимодействием, но вопрос о том, какие бозоны — фононы или спиновые флуктуации — ответственны за эти перенормировки электронного спектра в окрестности уровня Ферми, является предметом дискуссии [5]. Кинк может быть результатом взаимодействия с оптическими фононами [6] или со спиновыми флуктуациями [7, 8].

Таким образом, для описания как сверхпроводящего спаривания, так и свойств нормального со-

*E-mail: shneyder@iph.krasn.ru

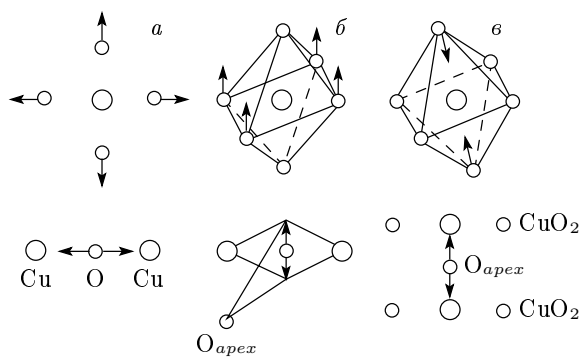


Рис. 1. Схема смещений атомов для дыхательной (а), изгибной (б) и апической дыхательной (в) мод

стояния в купратах необходимо одновременно учитывать взаимодействие электронов с фононами и спиновыми флуктуациями. Если для оптимально и сильнодопированных составов можно стартовать из обычной зонной теории, то для обсуждения всей фазовой диаграммы купратов, начиная от недопированных антиферромагнитных диэлектриков, необходимо описывать электроны в режиме сильных корреляций. Различные версии однозонной и многозонной моделей Хаббарда приводят к низкоэнергетической эффективной t - J -модели, описывающей взаимодействие электронов в хаббардовских зонах со спиновыми флуктуациями [9, 10]. В то же время взаимодействие электронов с фононами в режиме сильных корреляций изучено меньше (см. недавний обзор [11]). Как правило, рассматривается t - J -модель с локальным взаимодействием электронов с некой оптической модой. Между тем, для обсуждения симметрии сверхпроводящего состояния, а также различия кинков в разных областях зоны Бриллюэна необходимо явно знать зависимость матричных элементов $g^{(\nu)}(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ электрон-фононного взаимодействия от входящего импульса \mathbf{k} , переданного \mathbf{q} и номера фононной моды ν . Последовательный вывод электрон-фононного взаимодействия из реалистичной многозонной p - d -модели купратов в режиме сильных корреляций [12] с реалистичным описанием фононов, наиболее сильно взаимодействующих с электронами, является основной задачей настоящей работы.

В общем случае можно выделить диагональный и недиагональный в узельном представлении вклады в электрон-фононное взаимодействие. Одновременный учет сильных электронных корреляций и диагонального электрон-фононного взаимо-

действия проводился в работах [13–17]. Оказалось, что наиболее сильно взаимодействуют с электронами 3 моды фононов: продольная дыхательная (колебания ионов кислорода в CuO_2 -плоскости, деформирующие Cu-O -связь) мода, апическая дыхательная (колебания апических ионов кислорода, деформирующие Cu-O -связь вдоль c -оси) и изгибная мода (колебания ионов кислорода в CuO_2 -слое поперек Cu-O -связи) (рис. 1). Эксперименты по нейтронному рассеянию выявили наибольшее смягчение дыхательной моды на границе зоны Бриллюэна в точке $(\pi/a; 0; 0)$ [18] (см. также обзор [19]). Одновременное влияние ЭФВ и спин-флуктуационного взаимодействия на сверхпроводящее спаривание без учета сильных электронных корреляций было рассмотрено в работе [20]. В результате всех этих работ выяснилось, что дыхательная мода наиболее сильно взаимодействует при квазиимпульсе фонона $\mathbf{q} \sim \mathbf{Q} = (\pi/a; \pi/a)$ и разрушает спаривание с симметрией $d_{x^2-y^2}$, изгибная мода имеет максимум взаимодействия для малых \mathbf{q} , апическая дыхательная мода имеет матричный элемент взаимодействия, не зависящий от плоскостного волнового вектора \mathbf{q} . Колебания ионов кислорода поперек CuO_2 -плоскости сильно модулируют ионную составляющую химической связи в купратах, меняя потенциал Маделунга, и поэтому сильно взаимодействуют с электронами [11].

Поскольку кинки в ARPES-экспериментах в подальной, $\mathbf{k} = (\pi/2a; \pi/2a)$, и антиподальной, $\mathbf{k} = (\pi/a; 0)$, точках различаются как по частоте бозонов, так и по температурной зависимости, для их анализа необходимо более детальное описание ЭФВ, в частности, зависимости матричных элементов $g^{(\nu)}(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ не только от переданного импульса \mathbf{q} , но и от входящего \mathbf{k} [21]. Последняя возникает только от недиагональной части ЭФВ. Последовательный вывод ЭФВ с учетом сильных электронных корреляций в рамках трехзонной p - d -модели, диагонального и недиагонального ЭФВ, но лишь для одной дыхательной моды, выполнен недавно в работах [22, 23], где получена эффективная t - J -модель с ЭФВ. Мы рассмотрим взаимодействие сильно коррелированных электронов со всеми тремя указанными выше модами и найдем диагональные и недиагональные вклады в ЭФВ. Сравнение кристаллических структур и фононных спектров LSCO (T -структура) и NCCO (T' -структура) позволило нам увидеть, какие вклады в ЭФВ пропадают при переходе от T - к T' -структуре, и объяснить, почему ЭФВ в T' -структуре заметно слабее, чем в дырочных купратах.

2. ВЫВОД ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В МНОГОЗОННОЙ p - d -МОДЕЛИ СЛОИСТЫХ КУПРАТОВ

Гамильтониан CuO_2 -слоя в многозонной p - d -модели может быть записан в следующем виде (в дырочном представлении) [24]:

$$H_{pd} = \sum_{i\lambda\sigma} (\varepsilon_{i\lambda} - \mu) n_{i\lambda\sigma} + \sum_{ij\sigma} \sum_{\lambda\lambda'} t_{ij}^{\lambda\lambda'} a_{i\lambda\sigma}^\dagger a_{j\lambda'\sigma} + \\ + \sum_{ij\sigma\sigma'} \sum_{\lambda\lambda'} \left(V_{ij}^{\lambda\lambda'} n_{i\lambda\sigma} n_{j\lambda'\sigma'} - J_{ij}^{\lambda\lambda'} a_{i\lambda\sigma}^\dagger a_{i\lambda\sigma} a_{j\lambda'\sigma'}^\dagger a_{j\lambda'\sigma'} \right). \quad (1)$$

Здесь $n_{i\lambda\sigma} = a_{i\lambda\sigma}^\dagger a_{i\lambda\sigma}$, $a_{i\lambda\sigma}^\dagger$ — оператор рождения дырки на узле $i \equiv R_i$ в орбитальном состоянии λ с проекцией спина σ и энергией $\varepsilon_{i\lambda}$, μ — химический потенциал, $t_{ij}^{\lambda\lambda'}$ — матричный элемент межатомного перескока, $V_{ij}^{\lambda\lambda'}$ и $J_{ij}^{\lambda\lambda'}$ — матричные элементы кулоновского и обменного взаимодействий. В отличие от трехзонной p - d -модели [25, 26], в многозонной модели наряду с $d_{x^2-y^2}$ -орбиталью меди учитывается и $d_{3z^2-r^2} \equiv d_{z^2}$ -орбиталь меди (остальные три t_{2g} -орбитали также могут быть включены, но они заполнены электронами и лежат гораздо глубже по энергии в валентной зоне электронов, чем рассматриваемый нами низкоэнергетический интервал энергий $E \leq 1$ эВ). Для ионов кислорода, лежащих в CuO_2 -слое, учитываются p_x -, p_y -орбитали, включены также p_z -орбитали апического кислорода (в T -структуре есть, в T' -структуре отсутствуют). Важными микроскопическими параметрами модели являются t_{pd} — перескок между $d_{x^2-y^2}$ -медью и плоскостным кислородом, t_{pp} — перескок между соседними (O_x и O_y) плоскостными ионами кислорода, t'_{pd} и t'_{pp} — перескоки соответственно между медью и апическим кислородом и плоскостным и апическим кислородом. Среди кулоновских взаимодействий выделяем внутриатомные взаимодействия двух дырок на одной (U_d — параметр Хаббарда) и разных (V_d) орбиталях, и аналогично U_p и V_p для кислорода, а также V_{pd} — кулоновское взаимодействие соседних меди и кислорода и V_{pp} — взаимодействие соседних ионов кислорода. Из обменных взаимодействий выделяем внутриатомные (хундовские) обменные параметры J_d и J_p . Подробный анализ гамильтониана (1), различных матричных элементов и метод расчета зонной структуры квазичастиц с учетом сильных электронных корреляций в обобщенном методе сильной связи (ГТВ) можно найти в работах [12, 27].

После построения функций Ванье в рамках ГТВ-метода гамильтониан (1) записывается в виде

суммы внутриячеечной H_c и межъячеечной H_{cc} частей [12, 27]:

$$H = H_c + H_{cc}, \\ H_c = \sum_f H_f, \quad H_f = H_f^{(b)} + H_f^{(a)} + H_f^{(ab)}, \quad (2) \\ H_{cc} = \sum_{fg\sigma} \left(h_{fg}^{(b)} + h_{fg}^{(a)} + h_{fg}^{(ab)} \right).$$

Здесь узлы f и g относятся только к подрешетке меди (ячейкой служит кластер CuO_6 или CuO_4), поскольку функции Ванье центрированы на узлах Cu . Индексы « a » и « b » указывают на симметрию функций Ванье: $d_{x^2-y^2}$ -состояния меди гибридизуются внутри ячейки с молекулярной b_{1g} -орбиталью плоскостного кислорода, d_{z^2} -состояния меди гибридизуются с a_{1g} -состояниями плоскостного кислорода и p_z -состояниями апического кислорода. В гамильтониане $H_f^{(b)}$ и $H_f^{(a)}$ помимо одночастичных p - d - и p - p -перескоков внутри ячейки имеются еще и внутриячеечные кулоновские взаимодействия. Например, U_p и V_{pd} входят во все три слагаемых H_f . В то же время $H_f^{(ab)}$ содержит только кулоновские и обменные взаимодействия, поскольку функции Ванье внутри ячейки ортогональны. Их смешивание происходит за счет перескоков между соседними ячейками и содержится в слагаемом $h_{fg}^{(ab)}$.

Для учета сильных электронных корреляций в рамках ГТВ-метода сначала делается точная диагонализация гамильтониана H_f , на полном наборе собственных состояний которого $\{|p\rangle\}$ строятся X -операторы Хаббарда, $X_f^{pq} \equiv |p\rangle\langle q|$. На втором этапе межъячеечная часть гамильтониана H_{cc} записывается в X -представлении и имеет ту же операторную структуру $\sim t_{fg} X_f X_g$, что и гамильтониан перескоков в обычной модели Хаббарда, что и позволяет затем найти функцию Грина и зонную структуру по теории возмущений. Дисперсное уравнение для расчета зонной структуры в методе ГТВ имеет вид (в парамагнитной фазе)

$$\det \left\| \frac{E - \Omega_m}{F_m} \delta_{mm'} - \sum_{\lambda\lambda'} \gamma_{\lambda\sigma}(m) T_{\lambda\lambda'}(k) \gamma_{\lambda'\sigma}(m') \right\| = 0, \quad (3)$$

где коэффициенты представления $\gamma_{\lambda\sigma}(m)$ одноэлектронных операторов через X -операторы Хаббарда

$$a_{f\lambda\sigma} = \sum_m \gamma_{\lambda\sigma}(m) X_f^m, \quad m \leftrightarrow (p, q) \quad (4)$$

вычисляются непосредственно после точной диагонализации H_f . Энергии Ω_m имеют одночастичный

смысл, но определены как резонансы между многоэлектронными термами $|p\rangle$ и $|q\rangle$: $\Omega_m = E_p - E_q$. Факторы заполнения $F_m = \langle X^{pp} \rangle + \langle X^{qq} \rangle$, так же как и энергии Ω_m , вычисляются после точной диагонализации H_f . Наконец, матричные элементы межячеечного перескока $T_{\lambda\lambda'}(k)$ определяются различными p - d - и p - p -перескоками. Например, рождение электрона на дне зоны проводимости недопированного La_2CuO_4 или Nd_2CuO_4 связано с резонансом между вакуумными $|0\rangle$ ($d^{10}p^6$ -конфигурация) и однодырочными $|\sigma\rangle$, $\sigma = \pm 1/2$, молекулярными орбиталями (смесь d^9p^6 - и $d^{10}p^5$ -конфигураций). Рождение дырки у потолка валентной зоны связано с резонансом Ω_S между однодырочными состояниями $|\sigma\rangle$ и двухдырочным синглетом $|s\rangle^1A$, к которому подмешивается зона триплетных возбуждений Ω_T ($|1, \sigma\rangle \rightarrow |2, T\rangle$) с участием двухдырочного триплета 3B .

В однодырочном секторе гильбертова пространства блоки матрицы H_f с b - и a -симметрией имеют вид

$$H_f^{(b)} = \begin{pmatrix} \varepsilon(d_{x^2-y^2}) & -\tau_b \\ -\tau_b & \varepsilon_b \end{pmatrix}, \quad (5)$$

$$H_f^{(a)} = \begin{pmatrix} \varepsilon(d_{z^2}) & -\tau_a & -\tau'_{pd} \\ -\tau_a & \varepsilon_a & -t'_{pp} \\ -\tau'_{pd} & -t'_{pp} & \varepsilon(p_z) \end{pmatrix}, \quad (6)$$

где параметры перескоков τ и энергии кислородных b - и a -орбиталей перенормированы по сравнению с исходными атомными за счет построения функций Ванье. В двухдырочном секторе соответствующие матрицы имеют уже немалую размерность, явно они выписаны в работах [12, 27] и здесь не приводятся.

После диагонализации внутриячеечной части H_c и перехода к представлению X -операторов электронный гамильтониан (1) имеет вид

$$H_{el} = \sum_{fn\gamma} (E_{n\gamma} - n\mu) X_f^{n\gamma, n\gamma} + \sum_{fg} \sum_{mm'} t_{fg}^{mm'} X_f^{\dagger m} X_g^{m'}. \quad (7)$$

В области низких энергий возле дна зоны проводимости и потолка валентной зоны мы ограничиваемся следующим набором термов $|n\gamma\rangle$: $n = 0$, $|0\rangle$; $n = 1$, $|\sigma\rangle$, $\sigma = \pm 1/2$; $n = 2$, синглет $|s\rangle$ и триплет $|T, M\rangle$, $M = 0, \pm 1$ [12], индексы « m », « m' » обозначают всевозможные возбуждения дырки. Для данного набора термов $|n\gamma\rangle$ уничтожение дырки со спином σ в

формуле (4) описывается следующими квазичастицами — $m = 0$: $(0, \sigma)$; $m = 1$: $(\bar{\sigma}, s)$; $m = 2$: $(\bar{\sigma}, T0)$ и $m = 3$: $(\sigma, T2\sigma)$.

Как обычно, при выводе ЭФВ в методе сильной связи необходимо учесть модуляцию внутриячейных $\varepsilon_{i\lambda}$ и межатомных $t_{ij}^{\lambda\lambda'}$ параметров при смещении атомов. Кроме того, в нашем случае возникают вклады в ЭФВ и от модуляции кулоновского межатомного взаимодействия. Важно отметить, что модуляция одночастичных и двухчастичных параметров гамильтониана за счет смещения атомов дает вклад не только в одночастичные, но и в двухчастичные, а в общем случае, и в многочастичные термы $E_{n\gamma}$ (n — число электронов, γ — совокупность квантовых чисел), определяющие энергии резонансов Ω в уравнении (3). Отсюда возникает диагональный вклад в ЭФВ. Модуляция различных параметров межатомных перескоков и кулоновских взаимодействий приводит также к недиагональному вкладу в ЭФВ. В результате смещений энергии термов $|n\gamma\rangle$ становятся зависящими от узла

$$E_{n\gamma}(\mathbf{R}_i) = E_{n\gamma}(\mathbf{R}_{i0} + \mathbf{u}_i) = E_{n\gamma}(0) + \mathbf{g}_{n\gamma} \mathbf{u}_i. \quad (8)$$

Аналогично параметры перескоков и взаимодействий зависят от разности узлов $\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j = \mathbf{R}_{i0} - \mathbf{R}_{j0} + \mathbf{u}_{ij}$, $\mathbf{u}_{ij} = \mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j$. В линейном приближении

$$t_{fg}^{mm'} = t_{fg}^{mm'}(0) + \mathbf{V}^{mm'} \cdot \mathbf{u}_{fg}. \quad (9)$$

Здесь совокупность феноменологических параметров $\mathbf{g}_{n\gamma}$ и $\mathbf{V}^{mm'}$ определяет диагональный и недиагональный вклады в ЭФВ. В результате получаем гамильтониан электронов (7), в котором все энергии относятся к невозмущенной решетке (т. е. $E_{n\gamma}(0)$ и $t_{fg}(0)$), и гамильтониан ЭФВ в системе сильно коррелированных электронов

$$H_{el-ph} = \sum_{fn\gamma} \mathbf{g}_{n\gamma} \cdot \mathbf{u}_f X_f^{n\gamma, n\gamma} + \sum_{fg} \sum_{mm'} \mathbf{V}^{mm'} \cdot \mathbf{u}_{fg} X_f^{\dagger m} X_g^{m'}. \quad (10)$$

Рассмотрим на примере дыхательной моды характерные смещения и модуляцию соответствующих параметров гамильтониана. На рис. 1 показан фрагмент CuO_2 -слоя и направления смещений ионов кислорода для трех обсуждаемых фононных мод. Для дыхательной моды смещение иона O^{2-} вдоль Cu-O -связи (рис. 1а) изменяет потенциал Маделунга и тем самым энергию d -уровня в кристаллическом поле:

$$\begin{aligned} \varepsilon_i(d_{x^2-y^2}) &= \varepsilon_{d0} + \mathbf{g} \cdot \mathbf{u}_i, \\ \mathbf{u}_i &= u_x \left(R_i + \frac{a_x}{2} \right) - u_x \left(R_i - \frac{a_x}{2} \right) + \\ &+ u_y \left(R_i + \frac{a_y}{2} \right) - u_y \left(R_i - \frac{a_y}{2} \right). \end{aligned} \quad (11)$$

Из-за симметрии модуляция уровня ε_p на кислороде в линейном по смещениям приближении отсутствует, так как вклады от левого и правого ионов меди сокращаются (рис. 1а). В результате имеет место модуляция величины энергии переноса заряда $\Delta_i = \varepsilon_p - \varepsilon_i(d_{x^2-y^2}) = \Delta_0 - \mathbf{g} \cdot \mathbf{u}_i$. Аналогичные линейные по смещениям вклады возникают в параметрах перескока между медью и плоскостным кислородом $t_{pd}(i) = t_{pd}(0) + \delta t_{pd}$, между кислородом и кислородом внутри CuO_2 -слоя $t_{pp}(i) = t_{pp}(0) + \delta t_{pp}$, между апическим кислородом и плоскостным кислородом $t'_{pp}(i) = t'_{pp}(0) + \delta t'_{pp}$, а также для кулоновского взаимодействия меди с кислородом $V_{pd}(i) = V_{pd}(0) + \delta V_{pd}$ и кислорода с кислородом $V_{pp}(i) = V_{pp}(0) + \delta V_{pp}$.

Параметры гамильтониана (1) в работе [12] рассматривались как феноменологические и были найдены из сопоставления с экспериментальными данными ARPES для недопированных оксихлоридов $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$. Недавно эти параметры были рассчитаны с применением методов зонной теории LDA и LSD+U [28]. При этом оказалось, что все интегралы перескока одного порядка $t_{pp} \approx t'_{pp} \approx 0.4-0.5t_{pd}$. Зависимость параметров от смещений не рассчитывалась, поэтому мы в данной работе не можем описать ЭФВ без подгоночных параметров. Можно предположить, что модуляционные поправки к интегралам перескока одного порядка: $\delta t_{pd} \sim \delta t_{pp} \sim \delta t'_{pp} \sim \delta t'_{pd}$.

Наряду с модуляцией кулоновских взаимодействий и кристаллического поля все эти линейные по смещениям модуляции перенормируют энергии однодырочного b_{1g} -дублета $|\sigma\rangle$ и двухдырочных синглета 1A и триплета 3B , что приводит к модуляции энергий Ω_S и Ω_T (диагональный вклад в ЭФВ). Недиагональный вклад происходит от модуляции $T_{\lambda\lambda'}$ в дисперсионном уравнении (3). Поскольку явный вид зависимостей всех матричных элементов гамильтониана (1) от расстояний нам неизвестен, для каждой зоны электронов и каждой моды фононов ν введем два параметра диагонального и недиагонального ЭФВ. Используя условие полноты для многоэлектронного базиса ячейки

$$X_f^{0,0} + \sum_{\sigma} X_f^{\sigma,\sigma} + X_f^{S,S} + \sum_{M=-1}^1 X_f^{TM, TM} = 1, \quad (12)$$

можно исключить один параметр диагонального ЭФВ и записать

$$\begin{aligned} H_{dia}^{(\nu)} &= \sum_f \mathbf{u}_{f,\nu} \cdot \\ &\cdot \left[\sum_{\sigma} \mathbf{g}_{\sigma}^{(\nu)} X_f^{\sigma\sigma} + \mathbf{g}_S^{(\nu)} X_f^{SS} + \sum_M \mathbf{g}_T^{(\nu)} X_f^{TM, TM} \right]. \end{aligned} \quad (13)$$

Вектор смещений, как обычно, представим в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{f,\nu} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q},\alpha} \frac{\mathbf{e}_{\alpha,\nu}}{\sqrt{2M_{\alpha}\omega_{\mathbf{q},\nu}}} \varphi_{\mathbf{q},\nu} \times \\ &\times \exp(i\mathbf{q}(\mathbf{R}_f + \mathbf{R}_{\alpha})), \end{aligned} \quad (14)$$

где M_{α} — масса иона α , \mathbf{R}_{α} — его радиус-вектор в ячейке \mathbf{R}_f , $\mathbf{e}_{\alpha,\nu}$ — вектор поляризации, $\varphi_{\mathbf{q},\nu} = b_{\mathbf{q},\nu} + b_{-\mathbf{q},\nu}^{\dagger}$ и $b_{\mathbf{q},\nu}$ ($b_{-\mathbf{q},\nu}^{\dagger}$) — операторы уничтожения (рождения) фонона ν с волновым вектором \mathbf{q} . Пренебрегая смещениями ионов меди, малыми по сравнению со смещениями ионов кислорода, для дыхательной оптической моды ($\nu = 1$) находим

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{f,1} &= \frac{2i}{\sqrt{2M_{ON}}} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\varphi_{\mathbf{q},1}}{\sqrt{\omega_{\mathbf{q},1}}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_f} \times \\ &\times \left[e_x(O_x) \sin \frac{q_x a}{2} + e_y(O_y) \sin \frac{q_y a}{2} \right]. \end{aligned} \quad (15)$$

В результате диагональная часть ЭФВ для моды ν может быть окончательно записана в виде

$$H_{dia}^{(\nu)} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}\nu} \sum_m g_{dia,m}^{(\nu)}(\mathbf{q}) X_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger m} X_{\mathbf{k}}^m \varphi_{\mathbf{q},\nu}, \quad (16)$$

где для дыхательной моды

$$\begin{aligned} g_{dia,m}^{(1)}(\mathbf{q}) &= \frac{2ig_m^{(1)}}{\sqrt{2M_{O}\omega_{\mathbf{q},1}}} \times \\ &\times \left[e_x(O_x) \sin \frac{q_x a}{2} + e_y(O_y) \sin \frac{q_y a}{2} \right]. \end{aligned} \quad (17)$$

Для той же моды недиагональная часть ЭФВ

$$H_{off}^{(1)} = \sum_{fg} \sum_{mm'} \mathbf{V}_{mm'}^{(1)} \cdot (\mathbf{u}_{f,1} + \mathbf{u}_{g,1}) X_f^{\dagger m} X_g^{m'} \quad (18)$$

может быть представлена следующим образом:

$$\begin{aligned} H_{off}^{(\nu)} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \times \\ &\times \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}\nu} \sum_{mm'} g_{off,mm'}^{(\nu)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) X_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger m} X_{\mathbf{k}}^{m'} \varphi_{\mathbf{q},\nu}, \end{aligned} \quad (19)$$

где

$$\begin{aligned} g_{off,mm'}^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) &= \frac{8i\mathbf{V}_{mm'}^{(1)}}{\sqrt{2M_{O}\omega_{\mathbf{q},1}}} \times \\ &\times \left[e_x(O_x) \sin \frac{q_x a}{2} + e_y(O_y) \sin \frac{q_y a}{2} \right] \times \\ &\times [\gamma(\mathbf{k}) + \gamma(\mathbf{k} + \mathbf{q})] \end{aligned} \quad (20)$$

и введено обозначение $\gamma(\mathbf{q}) = (\cos q_x a + \cos q_y a)/2$.

Для апиической дыхательной моды $\nu = 2$ смещения апиических ионов кислорода вдоль оси z модулируют кристаллическое поле на меди и тем самым $\delta\varepsilon_d$, длину связи CuO_{ap} и перескоки $\delta t'_{pd}$, а также перескок между апиическим и плоскостным кислородом $\delta t'_{pp}$ (рис. 1б). Все эти эффекты приводят только к диагональному ЭФВ, ибо изменяют параметры только внутри данной ячейки \mathbf{R}_f . Конечно, возникает также и связь между соседними CuO_2 -слоями, но в данной работе мы ограничиваемся только однослойными купратами. Сильное ЭФВ для этой моды и ее смягчение с допированием были предсказаны в работе [29].

Для двумерного вектора $\mathbf{q} = (q_x, q_y)$ имеем $\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_a = 0$, поэтому

$$\mathbf{u}_{f,2} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} \frac{e_z(O_{ap})}{\sqrt{2M_O\omega_{\mathbf{q},2}}} \varphi_{\mathbf{q},2} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_f}, \quad (21)$$

так что

$$g_{dia,m}^{(2)}(\mathbf{q}) = \frac{\mathbf{g}_m^{(2)}}{\sqrt{2M_O\omega_{\mathbf{q},2}}} e_z(O_{ap}) \quad (22)$$

зависит от \mathbf{q} очень слабо через дисперсию $\omega_{\mathbf{q},2}$. Недиагональная часть ЭФВ для апиической дыхательной моды отсутствует:

$$g_{off}^{(2)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = 0. \quad (23)$$

Для изгибной моды ($\nu = 3$) смещения направлены в тетрагональной фазе поперек Cu-O -связи (рис. 1в), для этой моды микроскопическая природа ЭФВ не столь очевидна. Действительно, вследствие симметрии длины Cu-O -связи и кристаллическое поле, и перескок t_{pd} не могут модулироваться в линейном по смещениям приближении, а пропорциональны квадрату смещений [13]. Линейные вклады возникают лишь в гофрированном CuO_2 -слое благодаря орторомбическим искажениям и малы в меру малости угла гофрировки. Следует отметить, что в работе [13] и в большинстве других ЭФВ выводится из анализа смещений в упрощенной модели Хаббарда или трехзонной $p-d$ -модели, где отсутствуют состояния апиического кислорода. В нашей многозонной $p-d$ -модели наличие апиического кислорода приводит к модуляции расстояния между плоскостным и апиическим кислородом (рис. 1в). В результате возникает модуляция параметров $\delta t'_{pp}$ и $\delta V'_{pp}$ уже в линейном по смещениям приближении. Кроме того, для этой моды большой вклад в ЭФВ дает модуляция потенциала Маделунга (ионной составляющей химической связи) [11], поскольку колебания ионов

кислорода поперек CuO_2 -плоскости слабо экранируются.

Окончательно диагональное ЭФВ с изгибной модой может быть записано в виде (16) с матричным элементом

$$g_{dia,m}^{(3)}(\mathbf{q}) = \frac{2\mathbf{g}_m^{(3)}}{\sqrt{2M_O\omega_{\mathbf{q},3}}} \times \left[e_z(O_x) \cos \frac{q_x a}{2} + e_z(O_y) \cos \frac{q_y a}{2} \right]. \quad (24)$$

Матричный элемент недиагонального ЭФВ с той же модой равен

$$g_{off,mm'}^{(3)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \frac{2\mathbf{V}_{mm'}^{(3)}}{\sqrt{2M_O\omega_{\mathbf{q},3}}} \times \left[e_z(O_x) \cos \left(k_x + \frac{q_x}{2} \right) a + e_z(O_y) \cos \left(k_y + \frac{q_y}{2} \right) a \right]. \quad (25)$$

Суммируя результаты данного раздела, представим гамильтониан ЭФВ в виде

$$H_{el-ph} = \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}\nu} \sum_{mm'} g_{mm'}^{(\nu)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) X_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger m} X_{\mathbf{k}}^{m'} (b_{\mathbf{q},\nu} + b_{-\mathbf{q},\nu}^{\dagger}), \quad (26)$$

$$g_{mm'}^{(\nu)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \delta_{mm'} g_{dia,m}^{(\nu)}(\mathbf{q}) + g_{off,mm'}^{(\nu)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}).$$

Для рассмотренных нами трех фононных мод матричные элементы g_{dia} и g_{off} даются формулами (17), (20), (20)–(25).

Подчеркнем, что введение для каждой моды двух феноменологических параметров $\mathbf{g}_m^{(\nu)}$ диагонального и $\mathbf{V}_{mm'}^{(\nu)}$ недиагонального ЭФВ связано не только с большим количеством различных микроскопических вкладов, но, в первую очередь, с недостаточной полнотой наших знаний о зависимости различных параметров от расстояния. Так, даже для простейшего частного случая ЭФВ в $t-J$ -модели с дыхательной модой две близкие по постановке задачи работы [22, 23] дают несовпадающие результаты: большой диагональный вклад (~ 0.25 эВ) и на два порядка меньший недиагональный в [22] и примерно одинаковые (~ 0.03 эВ) диагональный и недиагональный вклады ЭФВ в [23]. При учете нескольких механизмов ЭФВ возникает интерференция различных вкладов, например, вклад от δV_{pd} примерно на 30% сокращает вклад от δt_{pd} [22]. При переходе к реалистичной модели с большим числом вкладов в ЭФВ погрешности в оценке матричных элементов будут накапливаться, поэтому мы считаем обоснованным ограничиться феноменологическими параметрами.

3. АНАЛИЗ СИММЕТРИИ ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Зависимость матричных элементов от \mathbf{k} и \mathbf{q} , полученную на основе анализа смещений атомов в каждой моде, удобно рассмотреть с помощью карт, на которых величина $|g^{(\nu)}(\mathbf{k}, \mathbf{q})|^2$ представлена как функция импульса фонона \mathbf{q} для фиксированных значений исходного импульса электрона \mathbf{k} . Значения \mathbf{k} выбраны согласно данным ARPES-измерений, в которых перенормировка эффективной массы электронов, указывающая на взаимодействие электронов с коллективными возбуждениями, наблюдалась для $\mathbf{k}_n = ((1 - \delta)\pi/2; (1 - \delta)\pi/2)$ в нодальном и для $\mathbf{k}_{an} = (\pi(1 - \delta); \delta)$ в антинодальном направлениях ($\delta \sim 0.1$). На рис. 2–5 представлены карты диагональных и недиагональных матричных элементов ЭФВ с дыхательной и изгибной модами в нодальной и антинодальной точках. Все карты построены для $\mathbf{g}_m^{(\nu)} = \mathbf{V}_{mm}^{(\nu)} = 1$. Полная интенсивность $|g_{dia,m}^{(\nu)}(\mathbf{q}) + g_{off,mm}^{(\nu)}(\mathbf{k}, \mathbf{q})|^2$ для диагональных по зонному индексу квазичастиц m , $g_{mm}^{(\nu)}(\mathbf{k}, \mathbf{q})$, характеризуется интерференцией матричных элементов g_{dia} и g_{off} . Пример интерференции виден для дыхательной моды на рис. 2а, где высота пика при $\mathbf{q} = (3\pi/4, 3\pi/4)$ в суммарном матричном элементе меньше, чем в парциальном вкладе $|g_{off}(\mathbf{k}, \mathbf{q})|^2$ (рис. 2в) для той же точки \mathbf{q} .

Для нодальной точки \mathbf{k}_n максимумы $|g^{(1)}(\mathbf{k}_n, \mathbf{q})|^2$ дыхательной моды (рис. 2а) вблизи точек \mathbf{q} , равных $(3\pi/4, 3\pi/4)$, $(\pi; 0)$ и $(0; \pi)$, соответствуют недиагональному вкладу (рис. 2в), диагональная часть (рис. 2б) приводит к появлению слабого максимума в точке $(\pi; \pi)$. (Легко увидеть, что недиагональный вклад для $\mathbf{q} = (\pi; \pi)$ обращается в нуль, как и в работе [23].) Наибольшее эффективное электрон-фононное взаимодействие определяется колебаниями с волновыми векторами \mathbf{q} , расположенными на краях зоны Бриллюэна. Именно такие фононы переводят электрон с $\mathbf{k} \sim \mathbf{k}_F$ в состояние с конечным импульсом $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{q}$, лежащим на поверхности Ферми. Интенсивность взаимодействия с электронами для полудыхательной моды $\mathbf{q} = (\pi; 0)$ больше, чем для полной дыхательной $\mathbf{q} = (\pi; \pi)$. Данный факт хорошо согласуется с экспериментами. В работах по неупругому рассеянию нейтронов было показано, что перенормировка спектра с допированием для $(\pi; 0)$ моды порядка 20%, в то время как для колебаний с волновым вектором $(\pi; \pi)$ лишь 5% [30, 31].

Отметим, что смягчение, ширина и асимметрия линии для полудыхательной моды наблюдались для целого ряда ВТСП (например, LSCO [32], YBCO [33], ВКВО [34]). Кроме того, частота данного колебания, равная 70–85 мэВ, лежит в области энергий кинка в нодальном направлении. Энергия полной дыхательной моды составляет 85–90 мэВ и превышает это значение.

Взаимодействие дыхательной моды с электронами, имеющими начальный импульс, равный \mathbf{k}_{an} , эффективно мало. Максимум $|g^{(1)}(\mathbf{k}_{an}, \mathbf{q})|^2$ в точке $(0; \pi)$ (рис. 3а) соответствует процессам рассеяния электрона с начальным импульсом \mathbf{k}_{an} вблизи поверхности Ферми в конечное состояние $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{q} \approx (\pi; \pi)$, лежащее далеко от поверхности Ферми. (Аналогичное рассуждение можно привести относительно максимума в точке $(\pi; 0)$.) Отметим, что диагональный вклад в области максимумов мал (рис. 3б), и основным является недиагональный (рис. 3в).

Для изгибной моды максимум эффективного взаимодействия наблюдается при малых значениях импульса фонона как в нодальном (рис. 4), так и в антинодальном (рис. 5) направлении. В обоих случаях результат определяется диагональным вкладом в полный матричный элемент.

Для апиической дыхательной моды электрон-фононное взаимодействие не зависит от векторов \mathbf{k} и \mathbf{q} .

Таким образом, анализ смещений атомов рассматриваемых колебаний показывает следующее. Взаимодействие электронов в нодальной точке максимално для полудыхательной моды с $\mathbf{q} = (\pi; 0)$ и изгибной моды с малыми значениями волнового вектора \mathbf{q} . Изгибная мода также сильно взаимодействует с электронами в антинодальной точке при малых значениях \mathbf{q} . Кроме того, для полудыхательной моды квадрат матричного элемента $|g^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{q})|^2$ больше, чем для полной дыхательной $\mathbf{q} = (\pi; \pi)$ при любых значениях начального импульса электрона \mathbf{k} .

4. ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В ЭФФЕКТИВНОЙ НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

Среди межузельных перескоков в гамильтониане (7) есть внутризонные по нижней хаббардовской зоне, $m = 0$, дырок (дно зоны проводимости в электронном представлении) и верхней хаббардовской зоне, $m = 1$, дырок (потолок валентной зоны), соответствующие операторы Хаббарда $X_f^0 \equiv X_f^{0\sigma}$, $X_f^1 \equiv X_f^{-\sigma S}$.

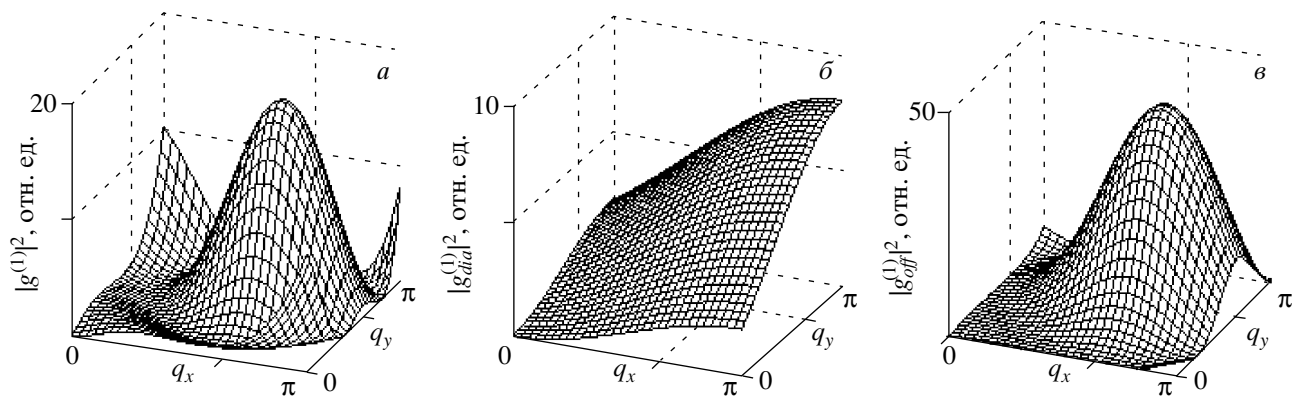


Рис. 2. Матричный элемент ЭФВ для дыхательной моды в нодальной точке k_n (полный (а), диагональная часть (б), недиагональная часть (в))

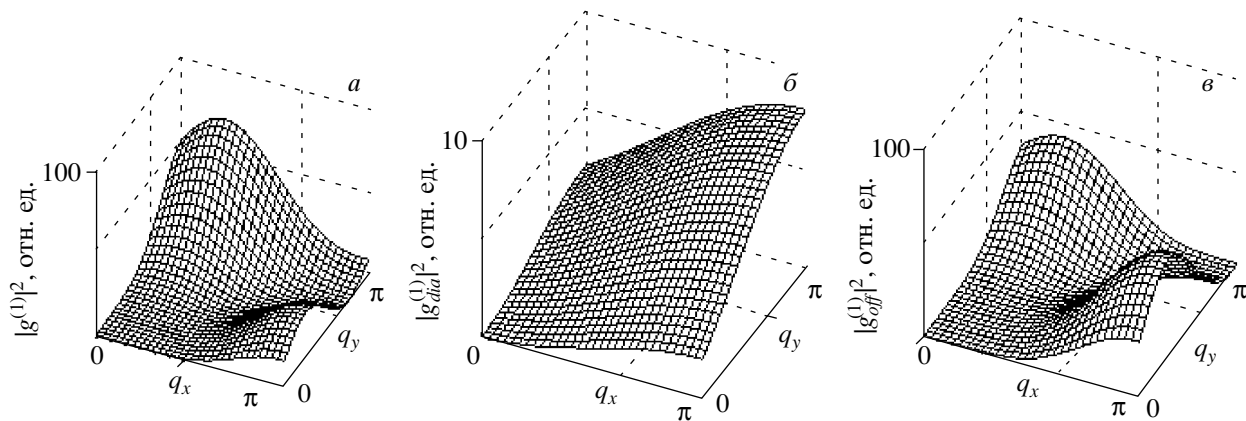


Рис. 3. Матричный элемент ЭФВ для дыхательной моды в антинодальной точке k_{an} (полный (а), диагональная часть (б), недиагональная часть (в))

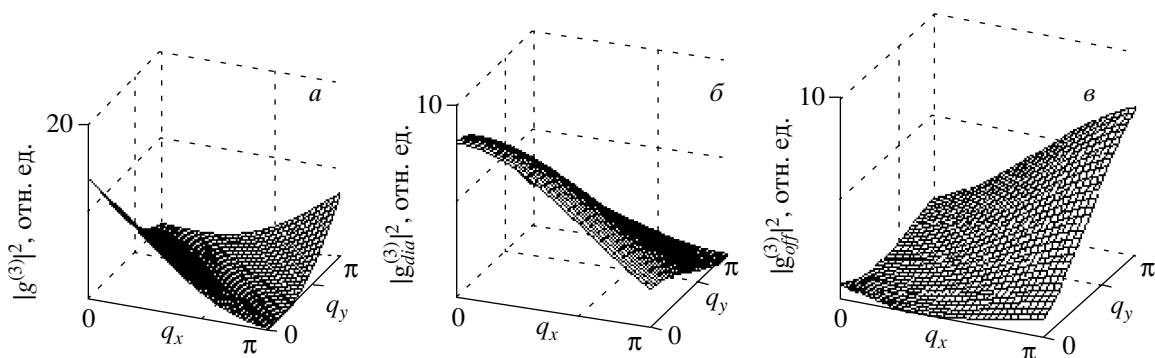


Рис. 4. Матричный элемент ЭФВ для изгибной моды в нодальной точке k_n (полный (а), диагональная часть (б), недиагональная часть (в))

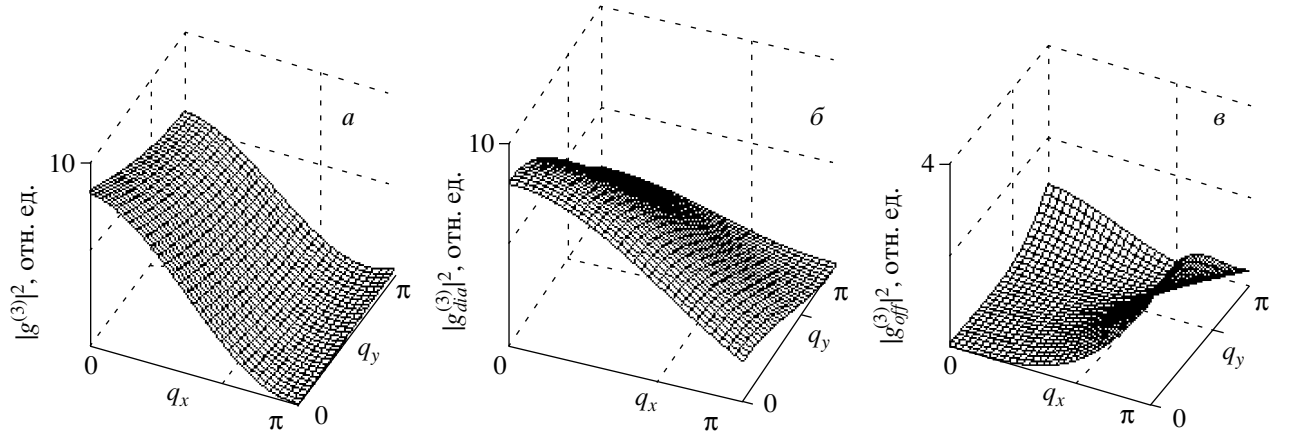


Рис. 5. Матричный элемент ЭФВ для изгибной моды в антинодальной точке \mathbf{k}_{an} (полный (а), диагональная часть (б), недиагональная часть (в))

Кроме того, имеются межзонные перескоки с возбуждением через щель с переносом заряда Δ , описываемые слагаемыми вида

$$t_{fg}^{01} X_f^\dagger X_g^1 = t_{fg}^{01} X_f^{\sigma 0} X_g^{-\sigma S}. \quad (27)$$

Исключение межзонных перескоков приводит к эффективной низкоэнергетической однозонной t - J_* -модели [35], которая для нижней зоны Хаббарда (электронное допирование) может быть записана в виде

$$H_{t-J_*} = H_{t-J} + H_{(3)},$$

$$H_{t-J} = \sum_{f,\sigma} \varepsilon_1 X_f^{\sigma\sigma} + \sum_{fg\sigma} t_{fg}^{00} X_f^{\sigma 0} X_g^{0\sigma} + \sum_{fg} J_{fg} \left(\mathbf{S}_f \cdot \mathbf{S}_g - \frac{1}{4} n_f n_g \right), \quad (28)$$

$$H_{(3)} = \sum_{fgm\sigma} \frac{t_{fm}^{01} t_{mg}^{01}}{\Delta} (X_f^{\sigma 0} X_m^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} X_g^{0\sigma} - X_f^{\sigma 0} X_m^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} X_g^{0\bar{\sigma}}).$$

Здесь $J_{fg} = 2(t_{fg}^{01})^2/\Delta$ — обменный интеграл, \mathbf{S}_f и n_f — операторы спина и числа частиц на узле, $\bar{\sigma} = -\sigma$.

Среди недиагональных процессов ЭФВ в гамильтониане (10) также имеются межзонные процессы вида

$$\mathbf{V}^{01} \mathbf{u}_{fg} X_f^{\sigma 0} X_g^{\bar{\sigma} S}, \quad (29)$$

их исключение во втором порядке по \mathbf{V}^{01} соответствует поправкам к обменному интегралу $\delta J_{fg} \sim (\mathbf{V}^{01})^2 \mathbf{u}_{fg}^2/\Delta$, которыми пренебрегаем, поскольку

мы везде ограничиваемся линейными по смещениям вкладами. В то же время комбинация двух возмущений (27) и (29) дает линейную по смещениям поправку в обменный интеграл (спин-фононное взаимодействие):

$$\delta J_{fg} = \frac{2t_{fg}^{01} \mathbf{V}^{01} \cdot \mathbf{u}_{fg}}{\Delta} = \frac{\mathbf{V}^{01} \cdot \mathbf{u}_{fg}}{t_{fg}^{01}} J_{fg}. \quad (30)$$

Поскольку смещения невелики и в разложении (9) $\mathbf{V}^{01} \mathbf{u} \ll t^{01}$, то $\delta J \ll J$. Гамильтониан спин-фононного взаимодействия имеет вид

$$H_{s-ph} = \sum_{fg\mathbf{q}\nu} A_{fg}(\mathbf{q}, \nu) \left(\mathbf{S}_f \cdot \mathbf{S}_g - \frac{1}{4} n_f n_g \right) \times \left(b_{\mathbf{q},\nu} + b_{-\mathbf{q},\nu}^\dagger \right), \quad (31)$$

$$A_{fg}(\mathbf{q}, \nu) = \frac{2it_{fg}^{01}/\Delta}{\sqrt{2M_0\omega_{\mathbf{q},\nu}}} e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_f + \mathbf{R}_g)} \times \left(\mathbf{V}_{01,x}^{(\nu)} \delta_{f,g\pm x} + \mathbf{V}_{01,y}^{(\nu)} \delta_{f,g\pm y} \right).$$

Аналогичные линейные по смещениям поправки возникают и в трехцентровых слагаемых:

$$H_{el-ph}^{(3)} = - \sum_{fgm\sigma} \frac{\mathbf{V}^{01} (t_{fm} \mathbf{u}_{mg} + \mathbf{u}_{fm} t_{mg})}{\Delta} \times \left(X_f^{\sigma 0} X_m^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} X_g^{0\sigma} - X_f^{\sigma 0} X_m^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} X_g^{0\bar{\sigma}} \right). \quad (32)$$

При этом в (30) и (32) мы пренебрегли линейными по смещениям, но малыми по параметру $\mathbf{V}^{01} \cdot \mathbf{u}/\Delta$ поправками.

Таким образом, эффективная низкоэнергетиче-

ская t - J^* -модель с учетом электрон-фононного взаимодействия может быть записана в виде

$$H_{eff} = H_{t-J^*} + H_{ph}^0 + H_{el-ph} + H_{s-ph} + H_{el-ph}^{(3)},$$

$$H_{ph}^0 = \sum_{\mathbf{q}\nu} \omega_{\mathbf{q},\nu} b_{\mathbf{q},\nu}^\dagger b_{\mathbf{q},\nu},$$

$$H_{el-ph} = \sum_{k\mathbf{q}\nu\sigma} g_{00}^{(\nu)}(\mathbf{q},\nu) X_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\sigma 0} X_{\mathbf{k}}^{0\sigma} \times (b_{\mathbf{q},\nu} + b_{-\mathbf{q},\nu}^\dagger).$$
(33)

Для купратов p -типа зонная структура формируется с участием двухчастичных 1A_1 -синглета и 3B_1 -триплета и более сложна [12], однако вклад триплетной зоны Ω_T в дисперсию и плотность состояний проявляется в основном ниже (на 0.5 эВ) потолка валентной зоны, возле которого пиннингрован уровень Ферми при допировании вплоть до оптимального $x \leq x_{opt}$. Поэтому для обсуждения кинков и механизмов сверхпроводимости можно пренебречь триплетной зоной, тогда для дырок получаем такой же точно по структуре эффективный гамильтониан (33) с заменой операторов нижней хаббардовской зоны дырок $X^{0\sigma}$ на верхнюю зону $X^{\bar{\sigma}2}$ ($m=0 \rightarrow m=1$).

Рассмотрим простейший вклад в массовый оператор электронов за счет ЭФВ:

$$\Sigma(\mathbf{k}, \varepsilon) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}\nu} \int d\omega \left| g_{00}^{(\nu)}(\mathbf{q}, \mathbf{k}) \right|^2 \times G(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \varepsilon - \omega) D(\mathbf{q}, \omega). \quad (34)$$

Подробный расчет перенормировок спектра выходит за рамки настоящей работы, мы лишь ограничимся замечаниями качественного характера. Во-первых, электроны в режиме сильных корреляций в t - J -модели описываются как квазичастицы в хаббардовской подзоне, их спектральный вес определяется фактором заполнения F_m (см. уравнение (3)) в числителе функции Грина. Для электронного допирования в $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$

$$F_0 = \langle X^{00} \rangle + \langle X^{\sigma\sigma} \rangle = (1+x)/2,$$

для дырочного допирования в $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$

$$F_1 = \langle X^{\sigma\sigma} \rangle + \langle X^{S,S} \rangle = (1+x)/2.$$

Такой спектральный вес квазичастиц появляется в хартри-фоковской функции Грина G в формуле (34), в результате безразмерный параметр ЭФВ

для свободных электронов, $\lambda_0 = (g^2/\omega_D)N(0)$, уменьшается на фактор заполнения: $\lambda = \lambda_0(1+x)/2$.

Во-вторых, основываясь на картах интенсивности ЭФВ и законах сохранения энергии и импульса, мы можем проанализировать качественно, какие моды дают вклад в кинки, а какие — нет. В этом анализе мы полагаем, что энергия электронов в сверхпроводящей фазе описывается формулой БКШ

$$E(k) = \pm \sqrt{\varepsilon_k^2 + \Delta_k^2}$$

и щель Δ_k имеет симметрию $d_{x^2-y^2}$, $\Delta(\mathbf{k}) = \Delta_0(\cos k_x a - \cos k_y a)/2$.

Рассмотрим $\Sigma(\mathbf{k}, \varepsilon)$ в нодальной точке $\mathbf{k}_n = ((1-\delta)\pi/2; (1+\delta)\pi/2)$, $\delta \leq 0.1$. Для дыхательной моды имеем максимумы взаимодействия с переданным импульсом $\mathbf{q}_1 = (3\pi/4; 3\pi/4)$ и $\mathbf{q}_2 = (\pi; \pi)$ (рис. 2). Электрон с $\mathbf{k}_n - \mathbf{q}_1$ лежит далеко от поверхности Ферми, а состояние с $\mathbf{k}_n - \mathbf{q}_2$ лежит вблизи поверхности Ферми. При этом $E(\mathbf{k}_n - \mathbf{q}_2) \approx \Delta(\mathbf{k}_n - \mathbf{q}_2) = 0$ как выше, так и ниже T_c , поэтому для энергии кинка $\varepsilon(\mathbf{k}_n) = \left| E(\mathbf{k}_n - \mathbf{q}) - \omega_{\mathbf{q}}^{(1)} \right|$ получаем $\varepsilon(\mathbf{k}_n) = 70$ мэВ, что соответствует энергии дыхательной моды. На рис. 2 виден также максимум ЭФВ в точке $\mathbf{q}_3 = (\pi; 0)$ (полудыхательная мода). Вектор $\mathbf{k}_n - \mathbf{q}_3 \approx (-\pi/2; \pi/2)$ близок к нодальной точке, поэтому данная мода удовлетворяет закону сохранения энергии. В то же время для изгибной моды с энергией $\omega \approx 35$ мэВ максимумы ЭФВ находятся в точках $\mathbf{q} = (0; 0)$ и $\mathbf{q} = (\pi; \pi)$ (рис. 4), векторы $\mathbf{k}_n - \mathbf{q}$ близки к \mathbf{k}_n , однако закон сохранения энергии с $\varepsilon(\mathbf{k}_n) = 70$ мэВ не выполняется. Таким образом, вклады в перенормировки электронного спектра в нодальной точке возникают от диагонального ЭФВ с дыхательной модой и недиагонального ЭФВ с полудыхательной модой, причем из-за симметрии щели $\Delta(\mathbf{k})$ энергия кинка не зависит от температуры.

Аналогично для антинодальной точки \mathbf{k}_{an} ЭФВ с дыхательной модой (рис. 3) имеет максимумы для $\mathbf{q}_2 = (\pi; \pi)$ (от диагонального матричного элемента) и для $\mathbf{q}_3 = (\pi; 0)$ (недиагональный вклад). Состояние с $\mathbf{k}_{an} - \mathbf{q}_2$ близко к антинодальной точке и энергия $E(\mathbf{k}_{an} - \mathbf{q}_2) \approx \Delta(\pi; 0) \sim \Delta_0 \approx 35$ мэВ (для оптимально допированных Bi2212 , где обнаружены кинки с энергиями 40 мэВ при $T = 100$ К и 70 мэВ при $T = 10$ К (см. [4])). Состояние $\mathbf{k}_{an} - \mathbf{q}_3$ лежит далеко от поверхности Ферми и не представляет интереса. Вклад от дыхательной моды как при $T > T_c$, так и при $T < T_c$ не удовлетворяет закону сохранения энергии. В то же время ЭФВ с изгибной модой

при $q = 0$ (рис. 5) удовлетворяет всем законам сохранения. При $T < T_c$

$$\varepsilon(\mathbf{k}_{an}) = 70 \approx \left| \Delta_0 + \omega_{\mathbf{q}}^{(3)} \right|,$$

а при $T > T_c$

$$\varepsilon(\mathbf{k}_{an}) \approx \omega_{\mathbf{q}}^{(3)}.$$

Резкое уменьшение амплитуды кинка в антинодальной точке выше T_c согласно работе [4] обусловлено двумя причинами: понижением плотности состояний на ε_F в нормальной фазе по сравнению со сверхпроводящей и температурным размытием. Таким образом, как и в работе [4], мы приходим к выводу об определяющем вкладе изгибной моды в кинк для антинодальной точки.

5. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Проведенное выше рассмотрение ЭФВ предполагало структуру $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (T -структура). Обсудим качественно изменения ЭФВ при переходе к T' -структуре $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$. В T' -структуре нет апического кислорода над и под ионами Cu , поэтому главное изменение связано с отсутствием апической дыхательной моды с сильным ЭФВ ($\nu = 2$ в наших обозначениях в (26)). Кроме того, значительно уменьшается $g_{mm'}^{(3)}(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ для ЭФВ с изгибной модой, так как пропадают вклады $\delta t'_{pp}$ и $\delta V'_{pp}$, дающие линейные по смещениям слагаемые в ЭФВ для этой моды (см. обсуждение перед формулой (24)).

Что касается ЭФВ с дыхательной модой, то основной вклад дают смещения ионов кислорода в Cu-O -плоскости, поэтому мы делаем вывод о малом различии $g_{mm'}^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ для T - и T' -структур. Эксперименты по неупругому рассеянию нейтронов также свидетельствуют о том, что изменения спектра фононов дыхательной моды за счет допирования в $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ и $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ в целом похожи [19]. В результате сравнения ЭФВ в T - и T' -структурах вполне понятно, почему для $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ нет кинка в антинодальном направлении $(0; 0) - (\pi; 0)$: так как взаимодействие с изгибной модой меньше, чем в $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. Если же ЭФВ с дыхательной модой мало изменилось, то непонятно, почему нет кинка в нодальном направлении $(0; 0) - (\pi; \pi)$. Данные ARPES для $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ говорят о более слабых особенностях в этом направлении [36].

Для построения теории сверхпроводимости представляет интерес эффективный гамильтониан, в котором ЭФВ исключено в духе преобразования Фрелиха [37]. Пока мы ограничиваемся эффективным

гамильтонианом для CuO_2 -слоя, эффекты неадиабатичности, обусловленные колебаниями с волновыми векторами q_z вдоль c -оси [38], несущественны. Для t - J^* -модели с фононами (33) в представлении X -операторов преобразование Фрелиха не совсем тривиально, поэтому мы вкратце опишем его. Запишем гамильтониан в виде

$$H = H_{el} + H_{el-ph}, \quad (35)$$

где H_{el} есть гамильтониан t - J^* -модели (33) для дна зоны проводимости ($m = 0$) или потолка валентной зоны ($m = 1$), а H_{el-ph} дается формулой (26). В каноническом преобразовании $H_S = \exp(-S)H \exp(S)$ выберем оператор S в виде

$$S = \sum_{k\mathbf{q}\sigma} \sum_{mm'} \left(\alpha_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^{mm'} b_{-\mathbf{q}}^\dagger + \beta_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^{mm'} b_{\mathbf{q}} \right) X_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^m X_{\mathbf{k}}^{m'}, \quad (36)$$

найдем коэффициенты α и β , как обычно, из условия

$$H_{el-ph} + [H_{el}, S] = 0 \quad (37)$$

и H_{eff} запишем как

$$H_S = H_{el} + \frac{1}{2} [H_{el-ph}, S]. \quad (38)$$

Решая уравнение (37), мы пренебрегаем межзонными вкладами в (36). Во-первых, межзонные матричные элементы ЭФВ всегда меньше внутризонных, так как содержат только недиагональные вклады (см. (26)), во-вторых, межзонные возбуждения идут через большую щель Δ между нижней и верхней хаббардовскими подзонами, так что соответствующие вклады $\sim g_{mm'}^{(\nu)}/\Delta \ll 1$. При решении уравнения (37) мы делаем также приближение типа Хаббард I в коммутаторе $[H_{el}, S]$. В результате для зоны m получаем

$$\begin{aligned} \alpha_{\mathbf{k}\mathbf{q},\nu}^{mm} &= g_{mm}^{(\nu)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \times \\ &\times [(t_m(\mathbf{k}) - t_m(\mathbf{k} + \mathbf{q})) F_m - \omega_{\mathbf{q},\nu}]^{-1}, \\ \beta_{\mathbf{k}\mathbf{q},\nu}^{mm} &= g_{mm}^{(\nu)}(k, q) \times \\ &\times [(t_m(\mathbf{k}) - t_m(\mathbf{k} + \mathbf{q})) F_m - \omega_{\mathbf{q},\nu}]^{-1}, \end{aligned} \quad (39)$$

где $t_m(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{R}} t_m(R) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R})$. Зависимость α, β от фактора заполнения F_m и, следовательно, от концентрации допирования возникает как эффект сильных корреляций. В результате эффективный гамильтониан может быть записан в виде

$$H_{eff} = H_{t-J^*} + H_{el-ph-el}, \quad (40)$$

где H_{t-J^*} дается выражением (28), а $H_{el-ph-el}$ определяется формулой

$$\begin{aligned} H_{el-ph-el} &= \\ &= \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\nu} \sum_m V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}}^{mm} X_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger m} X_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^{\dagger m} X_{\mathbf{k}'}^m X_{\mathbf{k}}^m, \\ V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}}^{mm} &= g_{mm}^{(\nu)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) g_{mm}^{(\nu)}(\mathbf{k}', -\mathbf{q}) \omega_{\mathbf{q},\nu} \times \\ &\times \left[(t_m(\mathbf{k}) - t_m(\mathbf{k} + \mathbf{q}))^2 F_m^2 - \omega_{\mathbf{q},\nu}^2 \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (41)$$

Здесь $m = 0$ и $m = 1$ дают эффективные гамильтонианы для купратов с электронным и дырочным типами допирования.

В отличие от аналогичного эффективного взаимодействия слабокоррелированных электронов в режиме сильных электронных корреляций эффективное взаимодействие зависит от чисел заполнения и через них от концентрации, температуры и магнитного поля.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе сделан последовательный вывод ЭФВ в рамках многозонной реалистичной модели купратов в режиме сильных электронных корреляций. Число различных микроскопических вкладов велико, они обусловлены модуляцией при смещении ионов всех зависящих от межатомного расстояния параметров, как одноэлектронных (перескоки t_{pd} и t_{pp} между различными p - и d -орбиталями, одноэлектронные энергии p - и d -орбиталей в кристаллическом поле), так и двухэлектронных (кулоновские матричные элементы). Для каждой моды колебаний ν мы объединяем различные микроскопические вклады в два параметра, характеризующих диагональное (по узлам решетки) и недиагональное ЭФВ. Явная зависимость матричных элементов $g_{dia}(\mathbf{q})$ и $g_{off}(\mathbf{q})$ от волновых векторов найдена для трех мод: дыхательной, апиической дыхательной и изгибной. Анализ симметрии этих матричных элементов позволил сделать качественный вывод о причастности ЭФВ с дыхательной модой к формированию кинка в спектре электронов в нодальном направлении $(0;0) - (\pi; \pi)$ и изгибной моды — кинка — в антинодальном направлении $(0;0) - (\pi; 0)$.

Из нашей работы не следует вывод, что кинки обусловлены только ЭФВ. Мы не исключаем аддитивных вкладов ЭФВ и взаимодействия со спиновыми флуктуациями. Отметим, что недавний расчет перенормировок электронного спектра непертурбативным вариационным методом Монте-Карло,

включающим в себя и взаимодействие со спиновыми флуктуациями, не обнаружил кинков, но обнаружил более слабые перенормировки спектра электронов [39].

Сравнение ЭФВ в купратах n -типа с T' -решеткой и p -типа с T -решеткой выявило более слабое ЭФВ для T' -решетки по сравнению с T -решеткой. В то же время для дыхательной моды ЭФВ мало различается для этих двух типов купратов. Дополнительный источник электронно-дырочной асимметрии в купратах связан с различием природы зон носителей: для дырочных купратов носителями являются дырки, двигающиеся в основном по кислородным p_σ -орбиталям, а для электронных — электроны преимущественно $d_{x^2-y^2}$ -орбитали Cu.

Эффекты сильных электронных корреляций в ЭФВ проявились через факторы заполнения F_m , определяемые самосогласованно через числа заполнения многоэлектронных термов и зависящие от концентрации носителей, температуры и магнитного поля. Те же самые факторы определяют и нецелый спектральный вес хаббардовских квазичастиц, т. е. специфику зонной структуры в сильнокоррелированных системах.

Авторы благодарят Е. Г. Максимова, В. В. Валькова и М. М. Коршунова за полезные обсуждения. Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (грант № 03-02-16124), программы Президиума РАН «Квантовая макрофизика», «Фонда содействия отечественной науке», Фонда некоммерческих программ «Династия» и Международного центра фундаментальной физики в Москве.

ЛИТЕРАТУРА

1. Е. Г. Максимов, УФН **170**, 1033 (2000).
2. A. Damascelli, Z.-X. Shen, and Z. Hussain, Rev. Mod. Phys. **75**, 473 (2003).
3. A. D. Gromko, A. V. Fedorov, Y.-D. Chuang et al., Phys. Rev. B **68**, 174520 (2003).
4. T. Cuk, D. H. Lu, X. J. Zhou, Z.-X. Shen, T. P. Devereaux, and N. Nagaosa, Phys. Stat. Sol. (b) **242**, 11 (2005).
5. E. Schachinger, J. J. Tu, and J. P. Carbotte, Phys. Rev. B **67**, 214508 (2003).
6. A. Lanzara, P. V. Bogdanov, X. J. Zhou et al., Nature **412**, 510 (2001).

7. A. Kaminski, M. Randeria, J. C. Campuzano et al., Phys. Rev. Lett. **86**, 1070 (2001).
8. S. V. Borisenko, A. A. Kordyuk, T. K. Kimet et al., Phys. Rev. Lett. **90**, 207001 (2003).
9. T. M. Rice, Phys. Rev. B **41**, 7243 (1990).
10. V. I. Belinicher and A. L. Chernyshev, Phys. Rev. B **47**, 390 (1993).
11. M. L. Kubic, O. V. Dolgov, Phys. Stat. Sol. (b) **242**, 151 (2005).
12. В. А. Гавричков, С. Г. Овчинников, А. А. Борисов, Е. А. Горячев, ЖЭТФ **118**, 422 (2000).
13. J. Song and J. F. Annett, Phys. Rev. B **51**, 3840 (1995).
14. R. Zeyer and M. L. Kubic, Phys. Rev. B **53**, 2850 (1996).
15. A. Nazarenko and E. Dagotto, Phys. Rev. B **53**, 2987 (1996).
16. T. Dahm, D. Manske, D. Fay, and L. Tewordt, Phys. Rev. B **54**, 12006 (1996).
17. N. Bulut and D. J. Scalapino, Phys. Rev. B **54**, 14971 (1996).
18. L. Pintschovius and M. Braden, Phys. Rev. B **60**, R15039 (1999).
19. L. Pintschovius, Phys. Stat. Sol. (b) **242**, 30 (2005).
20. T. S. Nunner, J. Schmailian, and K. N. Bennemann, Phys. Rev. B **59**, 8859 (1999).
21. T. P. Devereaux, T. Cuk, Z.-X. Shen, and N. Nagaosa, Phys. Rev. Lett. **93**, 117004 (2004).
22. O. Rösch and O. Gunnarsson, Phys. Rev. Lett. **92**, 146403 (2004).
23. S. Ishihara and N. Nagaosa, Phys. Rev. B **69**, 144520 (2004).
24. Yu. B. Gaididei and V. M. Loktev, Phys. Stat. Sol. (b) **147**, 307 (1988).
25. V. J. Emery, Phys. Rev. Lett. **58**, 2794 (1987).
26. C. M. Varma, S. Schmitt-Rink, and E. Ebrahams, Sol. St. Comm. **62**, 681 (1987).
27. В. В. Вальков, С. Г. Овчинников, *Квазичастицы в сильно коррелированных системах*, Изд-во СО РАН, Новосибирск (2001).
28. М. М. Коршунов, В. А. Гавричков, С. Г. Овчинников, З. В. Пчелкина, И. А. Некрасов, М. А. Коротин, В. И. Анисимов, ЖЭТФ **126**, 642 (2004).
29. C. Falter, M. Klenner, and W. Ludwig, Phys. Rev. B **47**, 5390 (1993).
30. R. J. McQueeney, J. L. Sarrao, P. G. Pagliuso et al., Phys. Rev. Lett. **87**, 077001 (2001).
31. L. Pintschovius and M. Braden, Phys. Rev. B **60**, R15039 (1999).
32. L. Pintschovius, N. Pyka, W. Reichardt et al., Physica C **185–189**, 156 (1991).
33. W. Reichardt, N. Pyka, L. Pintschovius et al., Physica C **162–164**, 464 (1989).
34. M. Braden, W. Reichardt, W. Schmidbauer et al., J. Supercond. **8**, 1 (1995).
35. Л. Н. Булаевский, Э. Л. Нагаев, Д. И. Хомский, ЖЭТФ **54**, 1562 (1968).
36. N. P. Armitage, D. H. Lu, C. Kim et al., Phys. Rev. B **68**, 064517 (2003).
37. H. Fröhlich, Phys. Rev. **79**, 845 (1950).
38. C. Falter, Phys. Stat. Sol. (b) **242**, 78 (2005).
39. S. Yunoki, E. Dagotto, and S. Sorella, Phys. Rev. Lett. **94**, 037001 (2005).