

ЭЛЕКТРОННАЯ И СТРУКТУРНАЯ НЕСТАБИЛЬНОСТЬ В ДВУМЕРНЫХ ОКСИДНЫХ СИСТЕМАХ ТИПА CuO_2

© И.Я.Огурцов, И.Н.Котов

Институт химии Академии наук Молдавии,
277028 Кишенев, Молдавия
(Поступила в Редакцию 10 октября 1995 г.
В окончательной редакции 10 апреля 1996 г.)

На основе расширенной двухзонной модели Пайерлса–Хаббарда в рамках приближения среднего поля исследованы электронные и структурные фазы квазидвумерных систем типа CuO_2 с учетом электрон-электронного внутрицентрового отталкивания и электрон-фононного взаимодействия. В адиабатическом пределе вычислена полная энергия как функция параметров модели и построены результирующие фазовые диаграммы. Установлено, что при определенных соотношениях параметров возможны фазы необычного типа, в которых ферромагнитно-упорядоченные электронные спины подрешетки меди модулируются волнами спиновой или зарядовой плотности и не влияют на ферромагнитно-упорядоченную кислородную подрешетку.

Многочисленные теоретические и экспериментальные исследования высокотемпературных сверхпроводниковых соединений (ВТСП) показывают, что описание их электронного строения в рамках зонной теории является неадекватным и не позволяет объяснить многие экспериментальные данные [1–3]. Тем не менее результаты, полученные в приближении сильной связи, могут быть использованы для объяснения этого несоответствия и определения отклонений от электронного строения и структуры, предсказываемых зонной моделью.

Возможной причиной неадекватности зонного подхода является пренебрежение в указанной схеме сложным электронным строением атомов системы, эффектами электронной корреляции и электронно-колебательным взаимодействием, учет которых может привести к понижению симметрии и принципиальной перестройки как электронной, так и ядерной подсистем. В частности, согласно зонным расчетам, поверхность Ферми двумерных оксидных слоев меди имеет «нестинг» [4–7], вследствие которого в системе должен произойти пайерлсовский переход. С другой стороны, известно, что в одномерных системах возможность реализации такого перехода (альтернирование связей) зависит от величины внутрицентрового межэлектронного взаимодействия [8–10]. Последнее в самой электронной подсистеме может привести к нарушениям симметрии типа волн зарядовой плотности (ВЗП) или волн спиновой плотности (ВСП), которые могут стимулировать структурные изменения в ядерной подсистеме.

Хотя отдельные аспекты указанных взаимодействий уже обсуждались [10-12], представляют интерес исследования возможных нарушений симметрии зонных электронных состояний и структуры двумерных систем (моделирующих, например, плоскости CuO_2 [13]), основанные на одновременном учете указанных взаимодействий. В настоящей работе подобное исследование проведено в рамках расширенной модели Хаббарда в приближении молекулярного поля.

1. Расширенная модель Хаббарда. Приближение среднего поля

Предположим, что двумерная система состоит из атомов меди и кислорода, расположенных так, как это имеет место в ВТСП [13], и примем во внимание по одному электронному состоянию от каждого атома [14] ($3d_{x^2-y^2}$ от Cu, p_x и p_y от атомов O, лежащих на осях x и y). С учетом внутриатомного отталкивания электронов и предположения о движении каждого из двух учитываемых атомов O только вдоль осей x и y гамильтониан такой системы в адиабатическом приближении может быть представлен в виде

$$H = H_{ee} + H_{ph} + H_{ep}, \quad (1)$$

где

$$H_{ee} = \sum_{l\sigma} \left\{ \Delta \left[\hat{n}_{dl\sigma} - (\hat{n}_{xl\sigma} + \hat{n}_{yl\sigma}) \right] + \frac{1}{2} \left[U_d \hat{n}_{dl\sigma} \hat{n}_{dl-\sigma} + U_p (\hat{n}_{rl\sigma} \hat{n}_{rl-\sigma} + \hat{n}_{yl\sigma} \hat{n}_{yl-\sigma}) \right] + (t + fq_{x1})(d_{l\sigma}^+ x_{l\sigma} + \text{h.c.}) - (t + fq_{y1})(d_{l\sigma}^+ y_{l\sigma} + \text{h.c.}) - (t - fq_{x1-i})(d_{l\sigma}^+ x_{l-i\sigma} + \text{h.c.}) + (t - fq_{y1-j})(d_{l\sigma}^+ y_{l-j\sigma} + \text{h.c.}) \right\} - \quad (2)$$

гамильтониан электронной подсистемы,

$$H_{ph} = \frac{1}{2} \sum_l (q_{x1}^2 + q_{y1}^2) - \quad (3)$$

гамильтониан колебательной подсистемы в адиабатическом приближении,

$$H_{ep} = \lambda \sum_{l\sigma} (q_{x1} + q_{y1} - q_{x1-i} - q_{y1-j}) \hat{n}_{dl\sigma} - \quad (4)$$

электронно-колебательный гамильтониан с константой взаимодействия λ . В формулах (2)-(4) $x_{l\sigma}^+$, $y_{l\sigma}^+$ и $d_{l\sigma}^+$ — операторы рождения электрона с проекцией σ в элементарной ячейке l в состояниях p_x , p_y и $3d_{x^2-y^2}$, разделенных энергетической щелью 2Δ , а U_p и U_d — кулоновское отталкивание в этих состояниях, i и j — базисные векторы двумерной квадратной решетки с постоянной, равной единице, $(t + fq_{al})$ — резонансный интеграл переноса со знаками, выбранными в соответствии с фазами электронных функций, q_{x1} и q_{y1} — смещения двух атомов O. При записи (2)-(4) полагаем, что все величины измерены в единицах

$\hbar\omega$, где ω — частота гармонических колебаний, соответствующая смещениям q_{al} . В дальнейшем d - и p -функции считаются функциями типа Ванье, и интегралы перекрытия между ними равны нулю.

С целью исследования возможности образования различных фаз (типа ВЗП или ВСП в электронной подсистеме и структурных в ядерной) введем соответствующие средние значения электронных операторов: среднее число электронов на атомах Cu и O в l -й ячейке

$$\langle \hat{n}_{dl\sigma} \rangle = n_{d\sigma}^0 + (-1)^l \delta n_{\sigma}, \quad \langle \hat{n}_{pl\sigma} \rangle = n_{p\sigma}^0, \quad (5)$$

(δn_{σ} — амплитуда спиновой плотности электронов на атомах Cu) и средние смещения

$$q_{xl} = q_{yl} = -q_{x1-l} = -q_{y1-j} = (-1)^l q. \quad (6)$$

В формулах (5), (6) $(-1)^l = (-1)^{l_x+l_y}$, $l_{x,y}$ — целые числа.

Введением величин $n_{d\sigma}^0$, $n_{p\sigma}^0$, δn_{σ} и q можно описать перечисленные выше фазы. Выбор фаз и одинаковых модулей смещений атомов O в (6) соответствует попеременному сближению и удалению атомов меди и кислорода и удвоению периода решетки.

Пренебрегая флуктуациями средних величин, гамильтониан системы в приближении среднего поля $\hat{n}_{al\sigma} \hat{n}_{al-\sigma} \approx \langle \hat{n}_{al\sigma} \rangle \hat{n}_{al-\sigma} + \hat{n}_{al\sigma} \langle \hat{n}_{al-\sigma} \rangle - \langle \hat{n}_{al\sigma} \rangle \langle \hat{n}_{al-\sigma} \rangle$ можно записать как

$$H_{MF} = H^0(q) + \sum_{l\sigma} \left\{ \left[U_d n_{d-\sigma}^0 + \Delta + (-1)^l (U_d \delta n_{\sigma} + 4\lambda q) \right] \hat{n}_{dl\sigma} + \right. \\ \left. + (U_p n_{p-\sigma} - \Delta) \sum_{a=x,y} \hat{n}_{al\sigma} + \left[t + (-1)^l f q \right] \left[d_{l\sigma}^+ (x_{l\sigma} - y_{l\sigma} - x_{1-i\sigma} + y_{1-j\sigma}) + \text{h.c.} \right] \right\}, \\ H^0(q) = N \left[q^2 - 2U_p n_{p\alpha}^0 n_{p\beta}^0 - U_d (n_{d\alpha}^0 n_{d\beta}^0 + \delta n_{\alpha} \delta n_{\beta}) \right], \quad (7)$$

где N — число элементарных ячеек в кристалле, α и β — значения проекций электронного спина.

С целью диагонализации H_{MF} перейдем в k -пространство, используя соотношения $d_{l\sigma}^+ = (1/\sqrt{N}) \sum_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}\sigma}^+ e^{-i\mathbf{k}l}$, $x_{l\sigma}^+ = (e^{-i\mathbf{k}x/2}/\sqrt{N}) \sum_{\mathbf{k}} x_{\mathbf{k}\sigma}^+ e^{-i\mathbf{k}l}$. В результате гамильтониан (7) запишется в виде

$$H_{MF} = H^0(q) + \sum_{\mathbf{k}\sigma} (H_{\mathbf{k},\mathbf{k}} + H_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{Q}} + H_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\mathbf{k}+\mathbf{Q}} + H_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\mathbf{k}}), \\ H_{\mathbf{k},\mathbf{k}} = (U_d n_{d-\sigma}^0 + \Delta) \hat{n}_{d\mathbf{k}\sigma} + (U_p n_{p-\sigma}^0 - \Delta) \sum_{a=x,y} \hat{n}_{a\mathbf{k}\sigma} + \\ + i(s_x d_{\mathbf{k}\sigma}^+ x_{\mathbf{k}\sigma} - s_y d_{\mathbf{k}\sigma}^+ y_{\mathbf{k}\sigma}) + \text{h.c.}, \\ H_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = (U_d \delta n_{-\sigma} + 4\lambda q) d_{\mathbf{k}\sigma}^+ d_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma} + i f q \left[\text{sign}(Q_x) c_x d_{\mathbf{k}\sigma}^+ x_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma} - \right. \\ \left. - s_x x_{\mathbf{k}\sigma}^+ d_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma} - \text{sign}(Q_y) c_y d_{\mathbf{k}\sigma}^+ y_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma} + s_y y_{\mathbf{k}\sigma}^+ d_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma} \right], \quad (8)$$

где $H_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ получается из $H_{\mathbf{k},\mathbf{k}}$ заменой $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + \mathbf{Q}$. $H_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\mathbf{k}} = [H_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{Q}}]^+$, $s_{x(y)} = 2t \sin(k_{x(y)}/2)$, $c_{x(y)} = 2t \cos(k_{x(y)}/2)$, $\mathbf{Q} = \{Q_x; Q_y\} = \{\pm\pi; \pm\pi\}$.

Отметим, что, как показано далее, величина $q \leq 0$ и в выражении (8) для $H_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ при достаточно больших λ величина $U_d \delta n_{-\sigma} + 4\lambda q$ будет отрицательной, что для одномерных систем известно как отрицательное отталкивание Андерсона [15].

Вводя новые операторы $\tau_{\mathbf{k}\sigma i}^+$ ($i = 0, \pm$)

$$\tau_{\mathbf{k}\sigma 0}^+ = (s_y x_{\mathbf{k}\sigma}^+ + s_x y_{\mathbf{k}\sigma}^+)/t_{xy},$$

$$\tau_{\mathbf{k}\sigma \pm}^+ = \left[\sqrt{1 + \Gamma_{\mathbf{k}\sigma} d_{\mathbf{k}\sigma}^+} \mp i \sqrt{1 \mp \Gamma_{\mathbf{k}\sigma} (s_x x_{\mathbf{k}\sigma}^+ - s_y y_{\mathbf{k}\sigma}^+)} / t_{xy} \right] / \sqrt{2}, \quad (9)$$

где

$$t_{xy}^2 = s_x^2 + s_y^2,$$

$$\Gamma_{\mathbf{k}\sigma} = U(n_{d-\sigma}^0 - \beta) / \sqrt{U^2(n_{d-\sigma}^0 - \beta)^2 + 4t_{xy}^2}, \quad (10)$$

а $U = U_d + U_p/2$, $\beta = (5U_p/4 - 2\Delta)/U$, приведем $H_{\mathbf{k},\mathbf{k}}$ и $H_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ к диагональному виду

$$H_{\text{MF}} = H^0(q) + \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{i=0,\pm} \left\{ \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}^i \tau_{\mathbf{k}\sigma i}^+ \tau_{\mathbf{k}\sigma i} + \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}^i \tau_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma i}^+ \tau_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma i} + V_{ii}(\mathbf{k}, \sigma) \tau_{\mathbf{k}\sigma i}^+ \tau_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma i} + \text{h.c.} \right\}. \quad (11)$$

В гамильтониане (11) одноэлектронные энергетические зоны $\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}^i$ ($i = 0, \pm$) равны

$$\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}^0 = U_p n_{p-\sigma}^0 - \Delta,$$

$$\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}^{\pm} = \left\{ U_p n_{p-\sigma}^0 + U_d n_{d-\sigma}^0 \pm \sqrt{U^2(n_{d-\sigma}^0 - \beta)^2 + 4t_{xy}^2} \right\} / 2, \quad (12)$$

и опущены вклады $V_{ij} \sim U_d \delta n_{\sigma} / (\varepsilon^i - \varepsilon^j) \ll 1$ при $i \neq j$.

В выражениях (10)–(12) параметр переноса t входит как квадрат (t_{xy}^2). Поэтому его знак может считаться положительным и важны лишь относительные значения знака переноса t , которые в (2) учтены явно.

Из ионных представлений следует, что обсуждаемые атомы меди и кислорода находятся в валентных состояниях Cu^{2+} и O^{2-} и на одну элементарную ячейку приходится пять электронов. Поэтому состояния нижних одноэлектронных энергетических зон $\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}^-$ и $\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}^0$ заполнены полностью, а верхняя энергетическая зона $\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}^+$ только наполовину. Это состояние нестабильно относительно смещений ядер с волновым вектором \mathbf{Q} , которые приводят к резонансному смешиванию занятых $\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}^+$ и свободных $\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}^+$ одноэлектронных энергетических состояний и образованию энергетической щели $\Delta_{\mathbf{k}\sigma}^+$ на уровне Ферми для значений волнового вектора \mathbf{k} , лежащих вблизи границы Ферми. В основном многоэлектронном состоянии системы выигрыш от расщепления

одноэлектронных $\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}^-$ и $\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}^0$ зон будет компенсироваться их полным заполнением электронами. В верхней энергетической зоне $\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}^+$ отщепление полностью заполненного и полностью свободного состояния с энергетической щелью $\Delta_{\mathbf{k}\sigma}^+$ приводит к переходу металл \rightarrow изолятор и сопровождается уменьшением полной энергии многоэлектронного состояния.

Определяя новые операторы $\pi_{\mathbf{k}\sigma i}^+$ как

$$\pi_{\mathbf{k}\sigma i}^+(\pm) = \left[\sqrt{1 \pm \gamma_{\mathbf{k}\sigma}(i)} \tau_{\mathbf{k}\sigma i}^+ \pm \left(V_{ii}^* \sqrt{1 \mp \gamma_{\mathbf{k}\sigma}(i)} \tau_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma i}^+ \right) / |V_{ii}| \right] / \sqrt{2}, \quad (13)$$

где $\gamma_{\mathbf{k}\sigma}(i) = (\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}^i - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}^i) / \left[(\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}^i - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}^i)^2 + 4|V_{ii}(\mathbf{k}\sigma)|^2 \right]^{1/2}$, приведем гамильтониан H_{MF} к диагональному виду

$$H_{\text{MF}} = H^0(q) + \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{i=0,\pm} \sum_{\mu=\pm} \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}\sigma}^i(\mu) \pi_{\mathbf{k}\sigma i}^+(\mu) \pi_{\mathbf{k}\sigma i}(\mu). \quad (14)$$

В гамильтониане (14) суммирование по \mathbf{k} ограничено областью S , которая имеет форму квадрата, ограниченного условиями $|k_x| + |k_y| \leq \pi$ (рис. 4 в [4]), а

$$\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}^i(\mu) = \left[\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}^i + \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}^i \pm (\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}^1 - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}^1) / \gamma_{\mathbf{k}\sigma}(i) \right] / 2, \quad \mu = \pm. \quad (15)$$

2. Система самосогласованных уравнений

Основное многоэлектронное состояние системы $|G\rangle$ может быть представлено соотношением

$$|G\rangle = \prod_{\mathbf{k}\sigma} \pi_{\mathbf{k}\sigma+}^+(-) \prod_{\mathbf{k}\sigma-} \pi_{\mathbf{k}\sigma-}^+(\mu) \pi_{\mathbf{k}\sigma 0}^+(\mu) |0\rangle, \quad (16)$$

в котором $|0\rangle$ — электронный вакуум, соответствующий электронной конфигурации d^8 для Си и p^4 для О. Вычисляя $\langle G | \hat{n}_{d\sigma} | G \rangle$ и сравнивая со средним значением числа электронов в l -й элементарной ячейке (5) $n_{d\sigma}^0 + (-1)^l \delta n_{\sigma}$, получим систему самосогласованных уравнений для определения $n_{d\sigma}^0$ и δn_{σ}

$$n_{d\sigma}^0 = \sum_{\mathbf{k}} \left[6 - (\Gamma_{\mathbf{k}\sigma} + \Gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}) - \gamma_{\mathbf{k}\sigma}(+) (\Gamma_{\mathbf{k}\sigma} - \Gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}) \right] / 4N,$$

$$\delta n_{\sigma} = -K \left[V_{++}(\mathbf{k}\sigma) \right],$$

$$K(\zeta) = \sum_{\mathbf{k}} \zeta \left\{ \left[(1 + \Gamma_{\mathbf{k}\sigma})(1 + \Gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}) \right] / \left[(\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}^+ - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma})^2 + 4\zeta^2 \right] \right\}^{1/2} / N,$$

$$2n_{p\sigma}^0 + n_{d\sigma}^0 = 5/2, \quad (17)$$

где суммирование по k производится по области S , а

$$V_{++}(\mathbf{k}, \sigma) = u_{k\sigma} \delta n_{-\sigma} + s_{k\sigma} q.$$

$$u_{k\sigma} = U_d \left[(1 + \Gamma_{k\sigma})(1 + \Gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}) \right]^{1/2} / 2,$$

$$s_{k\sigma} = 2\lambda \left[(1 + \Gamma_{k\sigma})(1 + \Gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}) \right]^{1/2} + f/2 \left\{ \left[(1 - \Gamma_{k\sigma})(1 + \Gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma})(\sin^2(k_x/2) + \sin^2(k_y/2)) \right]^{1/2} + \left[(1 + \Gamma_{k\sigma})(1 - \Gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma})(\cos^2(k_x/2) + \cos^2(k_y/2)) \right]^{1/2} \right\}. \quad (18)$$

Выражение (18) для $V_{++}(\mathbf{k}, \sigma)$ с помощью соотношения (17) может быть записано в следующем виде:

$$V_{++}(\mathbf{k}, \sigma) = -u_{\mathbf{k},\sigma} K \left[V_{++}(\mathbf{k}, -\sigma) \right] + s_{k\sigma} q. \quad (19)$$

Вычисляя среднее значение гамильтониана (14) на состоянии $|G\rangle$, определим энергию основного многоэлектронного состояния на одну элементарную ячейку

$$\frac{\langle G | H_{MF} | G \rangle}{N} = q^2 - 2U_p n_{p\alpha}^0 n_{p\beta}^0 - U_d (n_{d\alpha}^0 n_{d\beta}^0 + \delta n_{\alpha} \delta n_{\beta}) + \sum_{k\sigma} \left\{ \tilde{\varepsilon}_{k\sigma}^+(-) + \sum_{\mu=\pm} \left[\tilde{\varepsilon}_{k\sigma}^0(\mu) + \tilde{\varepsilon}_{k\sigma}^-(\mu) \right] \right\} / N. \quad (20)$$

Приведенное выражение энергии основного многоэлектронного состояния получено в приближении самосогласованного поля с учетом возможности нарушения симметрии как электронной, так и ядерной подсистем.

В адиабатическом приближении соотношение (20) необходимо минимизировать по электронным переменным $n_{d\sigma}^0$, δn_{σ} при фиксированных положениях ядер в решетке, а затем найти соответствующее этой электронной конфигурации равновесное положение ядер из условия $\partial/\partial q \langle G | H_{MF} | G \rangle = 0$. Однако можно изменить порядок этих двух минимизаций и найти q при фиксированных электронных переменных $n_{d\sigma}^0$ и δn_{σ} . С учетом (19) имеем

$$q = -U_d \sum_{\sigma} \delta n_{\sigma} \sum_{\mathbf{k}} [s_{k\sigma} / u_{k\sigma}] / N. \quad (21)$$

Выражение (21) представляет собой уравнение баланса между величиной искажения решетки и электронными переменными. Набор уравнений (17) и (21) представляет собой замкнутую систему самосогласованных уравнений для определения $n_{d\sigma}^0$, δn_{σ} и q , и, как видно из определения $\Gamma_{k\sigma}$ и $V_{++}(\mathbf{k}, \sigma)$ в (19), значения $n_{d\sigma}^0$ и δn_{σ} с одной проекцией спина выражаются через комбинацию $n_{d\sigma}^0$, δn_{σ} с противоположными значениями проекции. При этом, согласно (17), плотность электронной

волны изменяется в фазе либо в противофазе ($\delta n_\alpha = \pm \delta n_\beta$), в то время как для среднего значения числа электронов возможна ситуация, когда $n_{d\alpha}^0 \neq n_{d\beta}^0$.

Величина $n_{d\sigma}^0$ как среднее значение числа электронов в ячейке I является положительной, что следует из (17) в силу неравенств $0 \leq \Gamma_{k\sigma}, \gamma_{k\sigma}(\mu) \leq 1$. При $\delta n_\alpha = \delta n_\beta$ величину δn_σ также можно считать положительной, так как δn_σ входит в (5) с множителем $(-1)^1$ и изменением начала отсчета может быть сделана положительной, т.е. полагаем $n_{d\sigma}^0, \delta n_\sigma \geq 0$. Из выражения (21) следует, что при изменении плотности электронной волны в фазе $\delta n_\alpha = \delta n_\beta$ величина искажения $q < 0$. В противоположном случае при $\delta n_\alpha = -\delta n_\beta$ величина $q \leq 0$, а для $n_{d\alpha}^0 = n_{d\beta}^0$ $q = 0$.

3. Волны спиновой и зарядовой плотности. Фазовые диаграммы

Качественные особенности решения уравнений для $n_{d\sigma}^0$ и δn_σ существенным образом зависят от параметров задачи U_d, U_p, t, λ и Δ . С целью выделения характерных интервалов значений этих параметров рассмотрим вид уравнений (17) в предельном случае малых t .

При $t \ll U_d, U_p, \Delta$ из (17) следует

$$\begin{aligned} n_{d\sigma}^0 &\approx 1/2 + 2\alpha^2 / (n_{d-\sigma}^0 - \beta)^2, \\ \delta n_\sigma &\approx \pm \left[1/2 - 2\alpha^2 / (n_{d-\sigma}^0 - \beta)^2 \right], \\ \alpha &= t/U. \end{aligned} \quad (22)$$

Обозначая $x \equiv n_{d\alpha}^0$ и $y \equiv n_{d\beta}^0$, для определения x и y в рассматриваемом предельном случае получим систему уравнений

$$\begin{aligned} x &= f(y) = 1/2 + 2\alpha^2 / (y - \beta)^2, \\ y &= f(x) = 1/2 + 2\alpha^2 / (x - \beta)^2. \end{aligned} \quad (23)$$

Зависимость x от y и y от x представлена на рис. 1, из которого видно, что при $\beta < 1/2$ существует единственное решение (23) с $x = y$, а при $\beta > 1/2$ наряду с решениями с $x = y$ имеются решения с $x \neq y$.

При $\beta < 1/2$ или $(2\Delta + U_d/2) > U_p$ существует решение, соответствующее ВСП: $y = x = 1/2 + \delta$, $\delta n_\alpha = -\delta n_\beta$ и $q = 0$, в котором электронная плотность возрастает в четных ($(-1)^1 = 1$) и убывает в нечетных узлах решетки для спина с проекцией вверх и наоборот для спина с проекцией вниз. При этом суммарный заряд на атоме I меди остается неизменным. Поскольку $q = 0$, то возникающий переход в антиферромагнитный изолятор не сопровождается искажением решетки и энергия на одну элементарную ячейку равна

$$E_{11} = \Delta - 2U_p + (2U_p + U_d + 2)\delta - (2U_d + U_p/2)\delta^2. \quad (24)$$

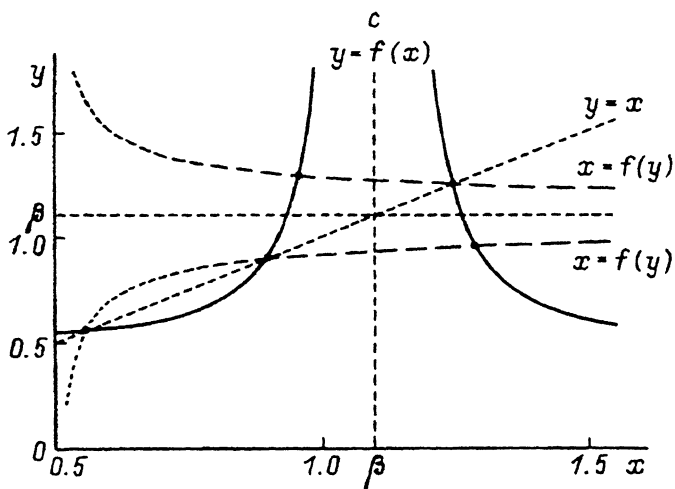
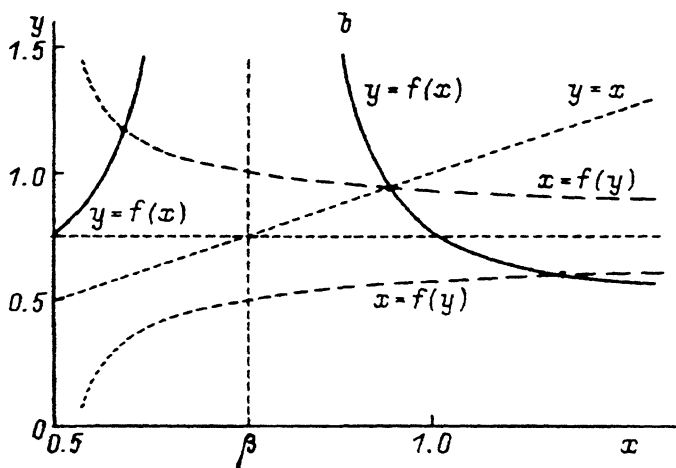
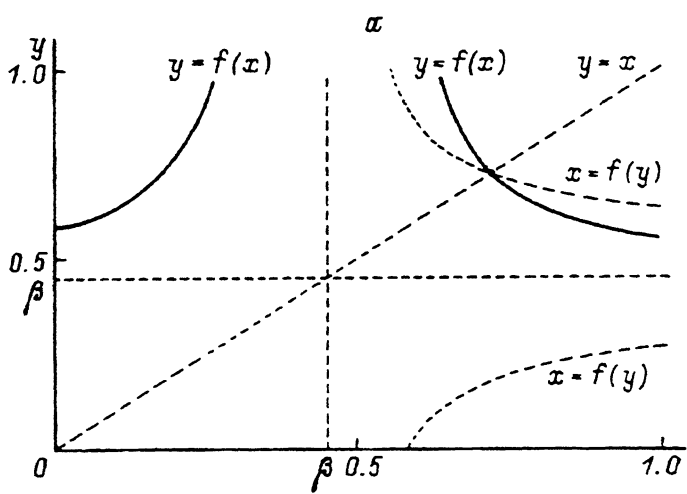


Рис. 1. Графическое решение уравнения (23) при $\beta < 1/2$ (а), $\beta > 1/2$ (б), $\beta > 1$ (с).

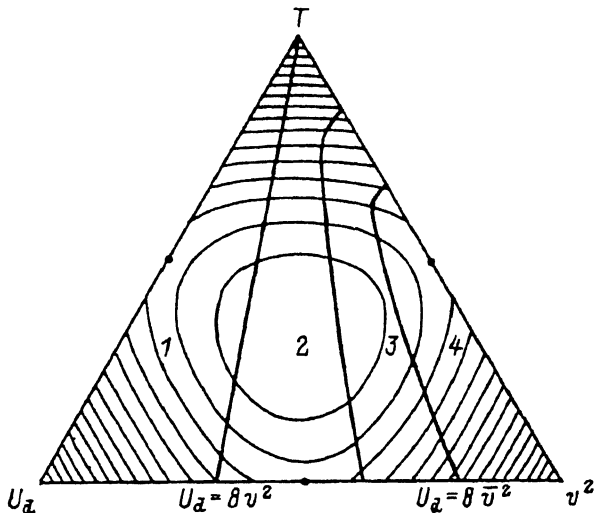


Рис. 2. Фазовая диаграмма.

Точками отмечено положение, в котором два параметра одинаковы, а третий равен нулю. Контур — эквипотенциальные поверхности. 1 — фаза ВСП, 2 — фаза ВЗП, 3 — фаза ФМ+ВСП, 4 — фаза ФМ+ВЗП. При $\beta < 1/2$ фазы 3 и 4 отсутствуют.

В то же время при $v^2 > U_d/16$ ($v = \lambda + f\sqrt{26}$) имеется решение с $\delta n_\alpha = \delta n_\beta$ и $q = -(2-\delta)v$, которое описывает переход системы в пайерлсовский изолятор с возникновением ВЗП и сопровождается увеличением плотности заряда электронов с противоположными проекциями спина в четных узлах решетки и уменьшением ее в нечетных узлах, с энергией на одну элементарную ячейку

$$E_{\Pi} = \Delta - 2U_p - (4v^2 - U_d/2) + (2U_p - U_d + 2)\delta - U_p\delta^2/2 - 16v^2(\delta - 1)\delta. \quad (25)$$

Из выражений (24), (25) видно, что при $v^2 > U_d/8$ энергетически более выгодна фаза, соответствующая ВЗП. Отметим, что полученный результат о переходе в фазу ВЗП не ограничен случаем $t < U_d, U_p, \Delta$, так как при произвольных значениях t, U_d, U_p, Δ и $n_{d\alpha}^0 = n_{d\beta}^0$ при $\delta n_\alpha = -\delta n_\beta$ $q = 0$, и зависимость от λ и f в (20) исчезает. В то же время при $\delta n_\alpha = \delta n_\beta$ $q \neq 0$, и при достаточно больших λ и f образование ВЗП энергетически более выгодно. Фазовая диаграмма возможных состояний системы, полученная численным расчетом при произвольных t, U_d, U_p и Δ , представлена на рис. 2, из которого видно, что при $\beta < 1/2$ в двумерных системах типа CuO_2 возникают лишь две фазы: ВЗП либо ВСП.

При $\beta > 1/2$ или $(2\Delta + U_d/2) < U_p$ возможны решения двух типов: $x = y$ и $x \neq y$ ($x = \beta + \delta', y = \beta - \delta'$). Анализ решения при $x = y = \beta + \delta$ аналогичен случаю с $\beta < 1/2$ и новой величиной $v = \lambda + f\alpha/\beta$.

При $x = \beta + \delta', y = \beta - \delta'$, как и при $x = y$, для любых значений параметров имеется решение с $\delta n_\alpha = -\delta n_\beta$ и $q = 0$, соответствующее своеобразной спиновой волне (рис. 3, а). Поскольку $n_{d\alpha}^0 \neq n_{d\beta}^0$, то в медной подрешетке системы возникает ферромагнитное (ФМ) упорядочение, которое модулируется антиферромагнитным упорядочением

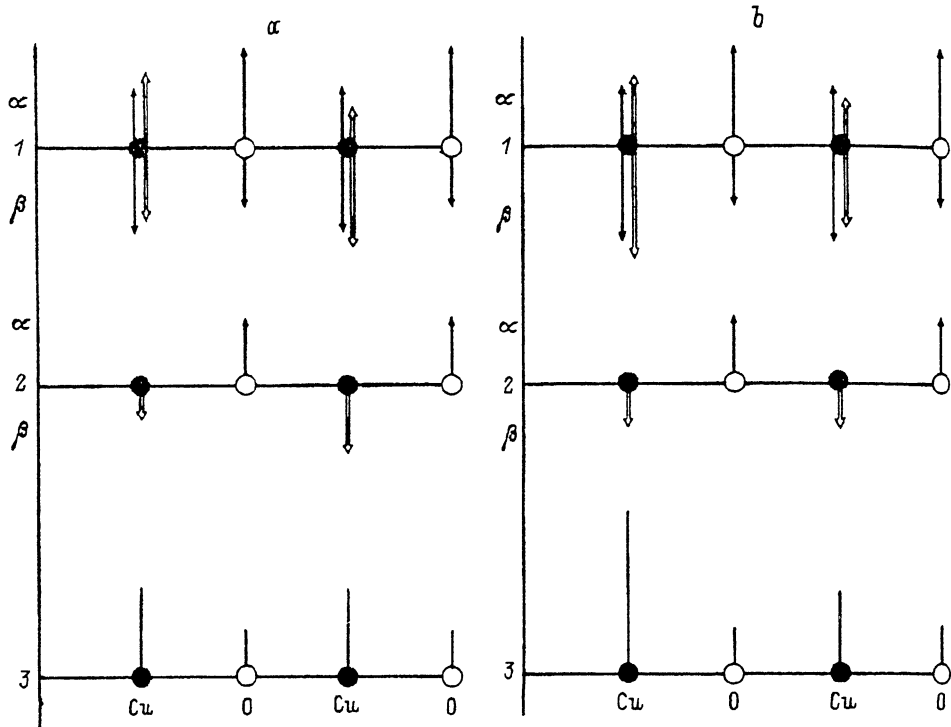


Рис. 3. Схема распределения частичных спиновых плотностей (1), спиновой (2) и зарядовой (3) плотностей.

α, β — значения проекции спина. *a* — фаза ФМ+ВСП ($\delta n_\alpha = -\delta n_\beta$), *b* — фаза ФМ+ВЗП ($\delta n_\alpha = \delta n_\beta$). 1 — $n_{d\sigma}^0, n_{p\sigma}^0$ (1); $n_{d\sigma}^0 + (-1)^1 \delta n_\sigma$ (\uparrow). 2 — $n_{d\alpha}^0 + (-1)^1 \delta n_\alpha - [n_{d\beta}^0 + (-1)^1 \delta n_\beta]$ (\uparrow); $n_{p\alpha}^0 - n_{p\beta}^0$ (1), 3 — $\sum_\sigma [n_{d\sigma}^0 + (-1)^1 \delta n_\sigma]$; $n_{p\alpha}^0 + n_{p\beta}^0$.

$(-1)^1 \delta n_\sigma$ (фаза ФМ+ВСП). В кислородной подрешетке такой модуляции не возникает и наблюдается обычное ФМ-упорядочение. При этом, поскольку $n_{d\alpha}^0 + n_{d\beta}^0 = 2\beta$ и $2n_{p\sigma}^0 + n_{d\sigma}^0 = 5/2$, полная элементарная ячейка (медь+кислород) остается электрически нейтральной.

Кроме того, при $v^2 > U_d/16$ ($\bar{v} = \lambda + f\alpha/\delta'$) наряду с отмеченным выше решением ФМ+ВСП существует решение с $\delta n_\alpha = \delta n_\beta$ и $q \neq 0$, соответствующее электронной ВЗП и сопровождающееся искажением решетки. Данное состояние (ФМ+ВЗП) реализуется путем наложения ФМ-упорядочения ($n_{d\alpha}^0 \neq n_{d\beta}^0$) на ВЗП (рис. 3, *b*) и более выгодно по энергии, чем ФМ+ВСП при $v^2 > U_d/8$. Фазовая диаграмма при $\beta > 1/2$ показана на рис. 2. Таким образом при $\beta > 1/2$ в двумерных системах типа CuO_2 в отличие от одномерных систем появляются две дополнительные фазы: ФМ+ВСП и ФМ+ВЗП.

Проведенный анализ показывает, что реализация той или иной фазы существенным образом зависит от локализации электрона (дырки) на орбиталях p_x, p_y и соответствующих кислородных параметров U_p и Δ . При рассмотрении ВТСП-соединений, как правило, такую возможность учитывают. В то же время при исследовании квазиодномерных

систем типа $[Pt^{2+}L_4][Pt^{4+}L_4X_2]Y_4$ ($L = NH_3, CH_3NH_2, X, Y = Cl, Br, I$) возможностью локализации электрона на мостиковом лиганде пренебрегают. Учет этой возможности может привести к появлению новых фазовых состояний.

Полученная в (12) зависимость одноэлектронных энергетических зон $\varepsilon_{k\sigma}^i$ ($i = 0, \pm$) от волнового вектора k представляет собой самосогласованное решение, которое учитывает нарушение симметрии как электронной, так и ядерной подсистем. При этом учтено, что среднее число электронов $n_{d\sigma}^0, n_{p\sigma}^0$ и амплитуда спиновой плотности электронов δn_σ различны в состояниях с разной проекцией спина.

В заключение отметим, что при значениях параметров $t = 1\text{eV}$, $U_d = 6\text{eV}$, $U_p = 2\text{eV}$, $\Delta = 1.5\text{eV}$, $\lambda \approx 1\text{eV}$, $f = 0.06\text{eV}$, характерных для сверхпроводящих оксокупратов [13,16,17], из численного расчета по (17) и (21) получено, что в исследуемой системе существуют антиферромагнитные спиновые волны с зарядовым состоянием атомов $Cu^{+1.68}O_2^{-1.84}$.

Представленный в настоящей работе анализ был ограничен случаем равной нулю температуры и не учитывал концентрационную зависимости носителей в исследуемых системах. Полученные результаты ограничены ситуацией, когда $\Delta > 0$ (т.е. состояния $3d_{x^2-y^2}$ меди выше по энергии p_x, p_y состояний кислорода). В то же время известны случаи квазидвумерных систем, в которых основную роль также играют состояния $d_{x^2-y^2}$ и p_x, p_y , но $\Delta < 0$ [18]. Разрешению указанных ограничений будут посвящены следующие работы данной серии.

Список литературы

- [1] A. Fujimori, E. Takayama-Muromachi, Y. Uchida, B. Okai. Phys. Rev. **B35**, 16, 8814 (1987).
- [2] L.K. Richard, R.L. Stockbauer, D. Mueller, A. Shin, L.E. Toth, M. Osofsky, S.A. Wolf. Phys. Rev. **B35**, 16, 8818 (1987).
- [3] M. Schluter, M.S. Hybertsen, Physica **C162-164**, 583 (1989).
- [4] J.D. Jorgensen, H.-B. Schuttler, D.G. Hinks, D.W. Capone II, K. Zhang, M.B. Brodsky, D.J. Scalapino. Phys. Rev. Lett. **58**, 10, 1024 (1987).
- [5] L.F. Mattheiss. Phys. Rev. Lett. **58**, 10, 1028 (1987).
- [6] A. Virosztek A., J. Ruvalds. Phys. Rev. **B45**, 1, 347 (1992).
- [7] А.Ф. Барабанов, А.В. Михеенков, Л.А. Максимов. СФХТ **4**, 3 (1991).
- [8] K.R. Subbaswamy, M. Grabowski. Phys. Rev. **B24**, 4, 2168-2173 (1981).
- [9] D. Baeriswyl, K.Maki. Phys. Rev. **B31**, 10, 6633 (1985).
- [10] K. Nasu, Y. Toyazawa. J. Phys. Soc. Jpn. **51**, 7, 2098 (1982).
- [11] В.П. Лукин. ФТТ **36**, 3, 661 (1994).
- [12] Ю.А. Изюмеv, Ю.Н. Скрябин. Статистическая механика магнитоупорядоченных систем. Наука. М. (1987). 264 с.
- [13] Ю.Э. Китаев, М.Ф. Лимонов, А.П. Миргородский, А.Г. Панфилов, Р.А. Эварестов. ФТТ **36**, 4, 865 (1994).
- [14] S. Massida, J. Yu, A.J. Freeman, Physica **C153-155**, Pt 2, 1225 (1986).
- [15] P.W. Anderson. Phys. Rev. Lett. **34**, 15, 953 (1975).
- [16] H. Eschrig. Physica **C159**, 545 (1989).
- [17] V.V. Flambaum, O.P. Sushkov. Physica **C159**, 586 (1989).
- [18] J.A. Paradis, M.-H. Whangbo, Kasowski R.V. New J. Chem. **17**, 8-9, 525 (1993).