

Влияние возбужденных двухчастичных состояний на межатомное обменное взаимодействие в La_2CuO_4

© В.А. Гавричков^{*,**}, С.Г. Овчинников^{*,**}

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

** Сибирский федеральный университет, 660062 Красноярск, Россия

E-mail: gav@iph.krasn.ru

(Поступила в Редакцию 27 сентября 2007 г.)

Построен эффективный спиновый гамильтониан для нелегированных купратов в рамках реалистичной многозонной $p-d$ -модели с параметрами, рассчитанными из первых принципов. Параметр обмена определяется суммой антиферромагнитных и ферромагнитных вкладов, последние обусловлены двухдырочными триплетными термами. Ферромагнитные и антиферромагнитные вклады от возбужденных термов заметно компенсируют друг друга. Антиферромагнитный вклад от основного двухдырочного синглета $^1A_{1g}$ в обменное взаимодействие является преобладающим.

Работа выполнена при поддержке интеграционного проекта № 74 СО РАН-УрО, РАН, программы Президиума РАН „Квантовая макрофизика“ и грантов РФФИ № 06-02-90537-БНТС и 07-02-00226.

PACS: 74.72-h, 75.50.Ee

1. Введение

Обменный механизм спаривания считается одним из основных механизмов сверхпроводимости в купратах, поэтому важны надежные результаты по вычислению эффективного обменного параметра J . Известно, что в нелегированном случае модель Хаббарда в пределе сильных корреляций $U \gg t$ может быть сведена к эффективной модели Гейзенберга с антиферромагнитным обменом $J = 2t^2/U$ [1,2]. Сама модель Хаббарда может быть получена как эффективная низкоэнергетическая модель из более общей трехзонной $p-d$ -модели [3] или многозонной $p-d$ -модели [4]. В то время как локализованный спин формируется в основном однодырочным термом d^9p^6 , добавление второй дырки при допировании приводит к образованию двухдырочного синглета Жанга–Райса [5] в трехзонной модели или более общего синглета $^1A_{1g}$ [4] в многозонной $p-d$ -модели. Возбуждения с добавлением электрона $d^9p^6 \rightarrow d^{10}p^6$ формируют дно пустой зоны проводимости, а с добавлением дырки $d^9p^6 \rightarrow ^1A_{1g}$ — потолок валентной зоны, между которыми имеется щель с переносом заряда E_g . Межатомное обменное взаимодействие было получено в работе [6] из низкоэнергетического предела многозонной $p-d$ -модели. Во всех предыдущих работах возбужденные двухдырочные термы не учитывались при вычислении обменного параметра J . И хотя каждый вклад от возбужденного терма меньше основного из-за увеличения энергетического знаменателя, число таких вкладов не мало, несколько десятков. Поэтому заранее не очевидно, насколько малы или велики будут их вклады в обменный интеграл.

Расчет обменного параметра обмена с учетом всех возбужденных двухчастичных состояний и является це-

лю настоящей работы. В представлении X -операторов Хаббарда построены проекционные операторы и получен общий вид межатомного обменного взаимодействия во втором порядке теории возмущений по параметру $t/E_g \ll 1$. Показано, что синглетные двухдырочные термы вносят антиферромагнитный вклад J_A , а триплетные — ферромагнитный вклад J_B в суммарный обмен $J = J_A - J_B$. Матричные элементы межатомных перескоков рассчитаны с использованием параметров многозонной $p-d$ -модели, полученных для La_2CuO_4 из *ab initio* LDA + GTB-расчетов [7]. Оказалось, что антиферромагнитные и ферромагнитные вклады от возбужденных термов частично компенсируются и главный вклад определяется возбуждениями с потолка валентной зоны $J_0 = 2t^2/E_g$.

2. Многозонная $p-d$ -модель с учетом всех возбужденных состояний

Гамильтониан многозонной $p-d$ -модели [8] содержит локальные энергии дырок на кислороде, на меди в различных орбиталях ($d_{x^2-y^2}, d_{3z^2-r^2}$), внутриатомные кулоновские и обменные взаимодействия на меди и кислороде, перескоки и кулоновское взаимодействие медь–кислород [6]. В рамках LDA + GTB-метода параметры гамильтониана вычисляются из первых принципов, и потом для адекватного учета сильных электронных корреляций используется кластерный подход обобщенного метода сильной связи [4], а именно: решетка кристалла разбивается на элементарные ячейки, так что $H = H_0 + H_1$, где H_0 — сумма внутриячеечных слагаемых, а H_1 — межячеечные перескоки и взаимодействия. Далее H_0 точно диагонализируется, находятся точные межэлектронные молекулярные орбитали ячейки $|n, \delta\rangle$

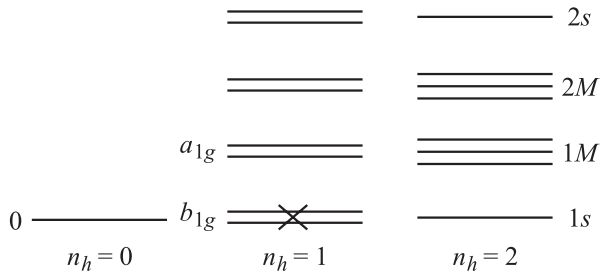


Рис. 1. Схема гильбертова пространства термов ячейки CuO_6 с числом дырок $n_h = 0, 1, 2$. Крестиком отмечено заполненное в нелегированном случае основное состояние $|b_{1g,\sigma}\rangle$ конфигурации $d^9 p^6 + d^{10} p^5$.

и энергии $E_{n\delta}$, на них строятся операторы Хаббарда ячейки R_f : $X_f^{n\delta, n'\delta'} = |n\delta\rangle\langle n'\delta'|$. Затем в представлении X -операторов точно записывается H_1 , и уже потом по теории возмущений учитываются межячеечные взаимодействия. Для CuO_2 слоя процедура и результаты расчета приведены в работе [9].

В представлении X -операторов гамильтониана H_0 определяется суммой по ячейкам:

$$H_0 = \sum_f \left\{ \varepsilon_0 X_f^{00} + \sum_{p\sigma} (\varepsilon_p - \mu) X_f^{p\sigma, p\sigma} + \left[\sum_{n=1}^{N_s} (E_{ns} - 2\mu) X_f^{ns, ns} + \sum_{m=1}^{N_T} (E_{mT} - 2\mu) X_f^{mM, mM} \right] \right\}, \quad (1)$$

где ε_0 — энергия вакуумного в дырочном представлении термина $d^9 p^6$, ε_p — энергия однодырочных молекулярных орбиталей с проекцией спина $\sigma = \pm 1/2$, индекс p пробегает по всем одночастичным состояниям CuO_6 кластера. Слагаемое в квадратных скобках описывает двухдырочные термы либо в синглетном состоянии $|n, s\rangle$, либо в триплетном состоянии $|m, M\rangle$, $M = -1, 0, +1$. Индексы n и m нумеруют все двухдырочные спиновые синглеты и триплеты, $1 \leq n \leq N_s$, $1 \leq m \leq N_T$.

Условие полноты набора локальных операторов Хаббарда следующее:

$$X_f^{00} + \sum_{p\sigma} X_f^{p\sigma, p\sigma} + \sum_n X_f^{ns, ns} + \sum_m \sum_M X_f^{mM, mM} = 1. \quad (2)$$

Схема уровней многоэлектронных термов, определяющих зонную структуру La_2CuO_4 , показана на рис. 1. Процесс рождения электрона на дне зоны проводимости определяется матричным элементом $\gamma_{\lambda\sigma}\langle 0| = \langle 0|a_{f\lambda\sigma}|b_{1g,\sigma}\rangle$, где индекс орбитали λ соответствует либо d -орбиталям $x^2 - y^2$, $3z^2 - r^2$, либо симметризованным комбинациям атомных $2p$ -орбиталей, центрированных на узле меди R_f (орбитали b_{1g} , a_{1g} [9]). Рождение дырки при легировании p -типа определяется матричными элементами с участием всех двухдырочных термов:

$$\begin{aligned} \gamma_{\lambda\sigma}(n) &= \langle b_{1g}, -\sigma | a_{f\lambda\sigma} | ns \rangle, \\ \gamma_{\lambda\sigma}(m) &= \langle b_{1g}, +\sigma | a_{f\lambda\sigma} | m, +2\sigma \rangle. \end{aligned} \quad (3)$$

В X -представлении оператор уничтожения дырки имеет вид

$$a_{f\lambda\sigma} = \gamma_{\lambda\sigma}(0) X_f^{0,\sigma} + \sum_n \gamma_{\lambda\sigma}(n) X_f^{-\sigma, ns} + \sum_m \gamma_{\lambda\sigma}(m) \left(X_f^{\sigma, m2\sigma} + \frac{1}{\sqrt{2}} X_f^{-\sigma, m0} \right). \quad (4)$$

Некоторые матричные элементы $\gamma_{\lambda\sigma}(n)$ и $\gamma_{\lambda\sigma}(m)$ равны нулю, соответствующие двухдырочные синглеты и триплеты не вносят вклада в одночастичные возбуждения. Двухдырочные состояния с ненулевыми матричными элементами участвуют в формировании сложной энергетической структуры валентной зоны, формируя хаббардовские синглетные и триплетные подзоны, между которыми, конечно, есть гибридизация. Отметим, что синглетная (триплетная) зона есть просто условный термин для обозначения электронной зоны со спином $S = 1/2$, как видно из (4), но с участием конечных синглетных (триплетных) термов.

Упрощение записи недиагональных X -операторов достигается введением корневых векторов [10] $\alpha_r(p, q)$, соответствующих паре начального и конечного состояний оператора $X^{pq} = |p\rangle\langle q|$. В этих обозначениях формула (4) принимает вид

$$a_{f\lambda\sigma} = \sum_r \gamma_{\lambda\sigma}(r) X_f^r, \quad (5)$$

где целочисленный индекс p нумерует все одночастичные возбуждения из (4):

$$\{r\} = \{(0, \sigma); (\sigma, ns); (\sigma, m, 2\sigma); (-\sigma, m0)\}.$$

В этих обозначениях гамильтониан межкластерного перескока принимает простой вид

$$H_1 = \sum_{fg} \sum_{\lambda\lambda'} t_{fg}^{\lambda\lambda'} a_{g\lambda\sigma}^+ a_{g\lambda\sigma} = \sum_{fg} \sum_{rr'} t_{fg}^{rr'} X_f^r X_g^{r'}, \quad (6)$$

где $t_{fg}^{\lambda\lambda'}$ — матрица интегралов перескока дырки с узла g в орбитальном состоянии λ' на узел f в состояние λ , а

$$t_{fg}^{rr'} = \sum_{\lambda\lambda'} t_{fg}^{\lambda\lambda'} \gamma_{\lambda}(r) \gamma_{\lambda'}(r').$$

Так как каждый индекс r характеризует зону квазичастиц в сильнокоррелированной системе (зонный индекс хаббардовской зоны), диагональные слагаемые в (6) t^{rr} описывают дисперсию r -й зоны, а недиагональные $t^{rr'}$ — гибридизацию зон r и r' .

3. Построение эффективного обменного гамильтониана

Обменное взаимодействие возникает во втором порядке теории возмущений по перескокам, что соответствует виртуальным возбуждениям из заполненных синглетных

и триплетных зон через диэлектрическую щель в зону проводимости ($r = 0$, $\alpha_0 = (0, \sigma)$) и обратно. Такие возмущения описываются недиагональными элементами t_{fg}^{0r} с $r \geq 1$ в (6). В модели Хаббарда есть только один такой элемент t^{01} , описывающий перескоки между нижней и верхней хаббардовскими зонами. В нашем случае множество ненулевых матричных элементов $\gamma_{\lambda\sigma}(r)$ с $r \geq 1$ определяет межзональные перескоки. Для их исключения обобщим метод проекционных операторов, развитый в работе [2] для модели Хаббарда. Так как диагональные операторы Хаббарда сами являются проекционными, X -представление позволяет построить такое обобщение. В нашем случае полное число диагональных двухдырочных операторов $X_f^{\mu\mu}$ равно $N = N_s + 3N_T$. Пренебрегая экспоненциально малым температурным заселением возбужденных однодырочных термов в отсутствие легирования, когда ни один двухдырочный терм не заселен, мы можем оставить только нижний однодырочный терм, отмеченный крестиком на рис. 1. В этом случае условие полноты системы X -операторов упрощается:

$$X_f^{00} + \sum_{\sigma} X_f^{\sigma\sigma} + \sum_{\mu} X_f^{\mu\mu} = 1. \quad (7)$$

Выделим пару соседних узлов (i, j) и построим набор проекционных операторов p_{μ} :

$$p_0 = \left(X_i^{00} + \sum_{\sigma} X_i^{\sigma\sigma} \right) \left(X_j^{00} + \sum_{\sigma} X_j^{\sigma\sigma} \right), \quad (8)$$

$$p_{\mu} = X_i^{\mu\mu} + X_j^{\mu\mu} - X_i^{\mu\mu} \sum_{n'} X_j^{n'n'}, \quad q \leq \mu \leq N. \quad (9)$$

Легко проверить, что каждый из операторов p_{μ} является проекционным:

$$p_{\mu}^2 = p_{\mu} \quad (10)$$

и что эти операторы образуют полную систему и ортогональны:

$$p_{\mu} p_{\nu} = \delta_{\mu\nu} p_{\mu}, \quad \sum_{\mu=0}^N p_{\mu} = 1.$$

Используя тождество

$$H = \sum_{\mu\nu} p_{\mu} H p_{\nu}, \quad (11)$$

вычисляем диагональные и недиагональные элементы матрицы (11). При этом $p_0 H p_0$ соответствует части гамильтониана, действующей в нижней зоне Хаббарда, $\alpha_0 = (0, \sigma)$, и т.д. Легко показать, что

$$\sum_{\mu} p_{\mu} H_0 p_{\mu} = H_0,$$

а также что диагональные элементы $p_{\mu} H_1 p_{\mu}$ описывают перескоки в зоне μ , а недиагональные $p_{\mu} H_1 p_{\nu}$ соответствуют гибридизации зон μ и ν :

$$p_{\mu} H_1 p_{\nu} = \sum_{ij} t_{ij}^{\mu\nu} X_i^{\mu+} X_j^{\nu}.$$

Выделяем недиагональные матричные элементы как возмущение:

$$\tilde{H}(\varepsilon) = \tilde{H}_0 + \varepsilon \tilde{H}_1,$$

$$\tilde{H}_0 = \sum_{\mu} p_{\mu} H p_{\mu},$$

$$\tilde{H}_1 = \sum_{\mu \pm \nu} p_{\mu} H p_{\nu} \quad (12)$$

и делаем стандартное унитарное преобразование:

$$H'(\varepsilon) = e^{-i\varepsilon \tilde{S}} H(\varepsilon) e^{i\varepsilon \tilde{S}}$$

таким образом, чтобы исключить линейные по ε вклады от \tilde{H}_1 . Если матрица \tilde{S} удовлетворяет уравнению

$$\tilde{H}_1 + i[\tilde{H}_0, \tilde{S}] = 0, \quad (13)$$

то преобразованный гамильтониан имеет вид

$$H'(\varepsilon) = \tilde{H}_0 + i\varepsilon^2 [\tilde{H}_1, \tilde{S}]_- / 2. \quad (14)$$

Для решения уравнения (13) умножаем каждое слагаемое в нем слева на p_{μ} и справа на p_{ν} . В результате получим

$$p_{\mu} H p_{\nu} (1 - \delta_{\mu\nu}) + i(p_{\mu} H p_{\mu})(p_{\mu} \tilde{S} p_{\nu}) - i(p_{\mu} \tilde{S} p_{\nu})(p_{\nu} H p_{\nu}) = 0. \quad (15)$$

Это уравнение по форме совпадает с аналогичным уравнением работы [2], отличаясь лишь размерностью матриц. Таким образом, наше определение системы операторов p_{μ} в многомерном случае действительно является обобщением метода [2].

Из уравнения (15) следует, что диагональные матричные элементы $p_{\mu} \tilde{S} p_{\mu} = \gamma p_{\mu}$, где γ — константа. При решении уравнения для недиагональных компонент $p_{\mu} \tilde{S} p_{\nu}$, следуя [2], делаем приближение $p_{\mu} H p_{\mu} \rightarrow \varepsilon_{\mu}$. Тогда решение имеет вид

$$p_{\mu} \tilde{S} p_{\nu} = i p_{\mu} H p_{\nu} / \Delta_{\mu\nu}, \quad \Delta_{\mu\nu} = \varepsilon_{\mu} - \varepsilon_{\nu} \quad (16)$$

и эффективный гамильтониан равен

$$\begin{aligned} H'(\varepsilon = 1) &= \sum_{\mu} p_{\mu} H p_{\mu} + \frac{1}{2} \sum_{\nu \neq \mu} (p_{\mu} H p_{\nu} \tilde{S} - \tilde{S} p_{\mu} H p_{\nu}) \\ &= \sum_{\mu} p_{\mu} H p_{\mu} + \frac{1}{2} \sum_{\mu \neq \nu} \left\{ \frac{[p_{\mu} H p_{\nu} p_{\nu} H p_{\mu}]_-}{\Delta_{\mu\nu}} \right. \\ &\quad \left. + \sum_{\substack{\alpha \neq \mu \\ \alpha \neq \nu}} \left[\frac{(p_{\mu} H p_{\nu})(p_{\nu} H p_{\alpha})}{\Delta_{\nu\alpha}} - \frac{(p_{\alpha} H p_{\mu})(p_{\mu} H p_{\nu})}{\Delta_{\alpha\mu}} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (17)$$

4. Анализ обменных вкладов в эффективном гамильтониане

Вычисление слагаемых в эффективном гамильтониане (17) для синглетных и триплетных зон приводит к различным результатам. Межзонные переходы через щель описываются коммутатором

$$[p_0 H p_\nu, p_\nu H p_0]_- \quad (18)$$

Для n -синглетной зоны $\alpha_\nu = (-\sigma, nS)$ коммутатор (18) определяется операторами

$$\sum_{fgij} \sum_{\sigma\sigma'} [X_f^{\sigma 0} X_g^{-\sigma, ns}, X_i^{ns, -\sigma'} X_j^{0\sigma'}]_-.$$

Обменный вклад в гейзенберговский гамильтониан имеет вид

$$H_A = \sum_{ij} J_A(\mathbf{R}_{ij}) \left(\mathbf{s}_i \mathbf{s}_j - \frac{1}{4} n_j n_j \right), \quad (19)$$

где \mathbf{s}_i и n_i — операторы спина для $s = 1/2$ и числа частиц на узле i :

$$\begin{aligned} J_A(\mathbf{R}_{ij}) &= \sum_n J_A^{(n)}(\mathbf{R}_{ij}) \\ &= \sum_{n=1}^{N_s} |t_{ij}^{0, ns}|^2 / \Delta_{ns}, \quad \Delta_{ns} = E_{ns} - 2\varepsilon_1. \end{aligned}$$

Для m -й триплетной зоны коммутатор (18) определяется другими слагаемыми:

$$\begin{aligned} &\left[X_f^{\sigma 0} \left(X_g^{\sigma; -m, 2\sigma} + \frac{1}{\sqrt{2}} X_g^{-\sigma; m, 0} \right) \right. \\ &\quad \left. \times \left(X_i^{m, 2\sigma'; \sigma'} + \frac{1}{\sqrt{2}} X_i^{m, 0; -\sigma'} \right) X_j^{0; \sigma'} \right]_- \end{aligned}$$

В результате ферромагнитный обменный вклад в гейзенберговский гамильтониан имеет вид

$$H_F = \sum_{ij} J_B(\mathbf{R}_{ij}) \left(\mathbf{s}_i \mathbf{s}_j + \frac{3}{4} n_i, n_j \right), \quad (20)$$

где $J_B(\mathbf{R}_{ij}) = \sum_m J_B^{(m)}(\mathbf{R}_{ij}) = - \sum_{m=1}^{N_T} |t_{ij}^{0, m}|^2 / 2\Delta_m$, $\Delta_m = E_m - 2\varepsilon_1$. Суммируя по всем синглетным и триплетным зонам, находим окончательное выражение для эффективного обменного взаимодействия:

$$J_{ij}^{\text{eff}} = \sum_{n=1}^{N_s} |t_{ij}^{0, ns}|^2 / \Delta_{ns} - \sum_{m=1}^{N_T} |t_{ij}^{0, m}|^2 / 2\Delta_m. \quad (21)$$

Мы видим, что синглетные и триплетные зоны дают обменное взаимодействие разных знаков. Антиферромагнитное взаимодействие с участием синглетных состояний привычно, именно такой вклад в модели Хаббарда t^2/U описывает сверхобменный механизм. В данном случае возбужденные синглетные состояния также дают антиферромагнитный вклад, убывающий за счет знаменателя с ростом энергии возбужденного термина. Ферромагнитный вклад триплетных состояний

обусловлен тем, что уже при образовании триплета две дырки выстраиваются параллельно, а дальше перескоки с узла на узел переносят эту параллельную ориентацию спинов.

5. Численные вычисления эффективной обменной константы

Собственные состояния в секторах A_{1g} и ${}^3B_{1g}$ могут быть представлены в виде $|ns\rangle = \sum_{i=1}^9 A_{ni} |A_i\rangle$ и $|mM\rangle = \sum_{i=1}^6 B_{mi} |B_i\rangle$ [9], спектральные веса исходных дырочных конфигураций $|A_i\rangle$ и $|B_i\rangle$ приведены в табл. 1 и 2. Отличительной особенностью состояний A_{1g} -симметрии (табл. 1) является 95% концентрация спектрального веса на исходных конфигурациях в основном состоянии. Вклад полярной конфигурации отличает наше основное состояние от состояния Жанга–Райса. Кроме того, с таким же весом доминирующие интегралы переноса t_{pd} и t_{pp} войдут в обменное взаимодействие (21) (рис. 2, *a*). В структуре симметричного блока ${}^3B_{1g}$ также имеются выделенные конфигурации (табл. 2). Например, исходная конфигурация ($b_{1g} p_z$) в основном состоянии с 53% спектральным весом. Однако поскольку соответствующие ей интегралы перескока много меньше, зона триплетных состояний уже зоны синглетных состояний и антиферромагнитный вклад в обменное взаимодействие (21) преобладает. Действительно, при параметрах гамильтониана, взятых из LDA + GTB-расчета, вычисления по формуле (21) дают для ближайших соседей $J_A = 0.149$ eV, $J_B = 0.003$ eV и суммарный обмен $J^{\text{eff}} = 0.146$ eV. Наибольший вклад ($\sim 73\%$) в ферромагнитное взаимодействие дает возбужденное ($m = 3$) триплетное состояние с наибольшим вкладом от исходной (bd_z) конфигурации (рис. 2, *b*). Такое соотношение между антиферромагнитной и ферромагнитной составляющими объясняется как

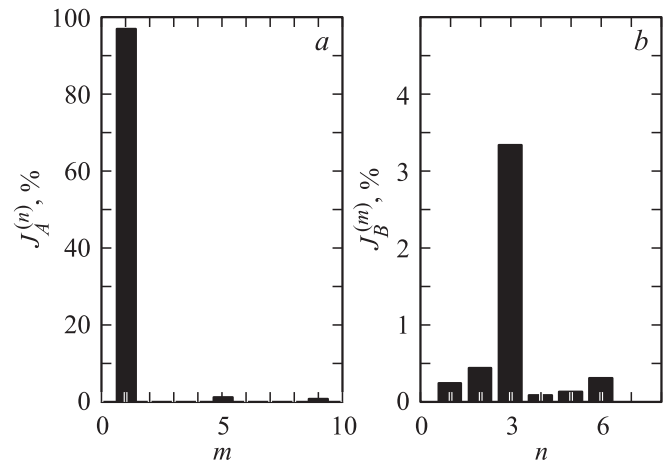


Рис. 2. Величины парциальных вкладов в обменное взаимодействие от синглетных (*a*) и триплетных (*b*) состояний $J_A^{(n)}$ и $J_B^{(m)}$ соответственно в процентах к величине $J_A + J_B$.

Таблица 1. Спектральные веса исходных двухдырочных конфигураций в синглетных состояниях

$ ns\rangle$	E_{ns}, eV	$A_{1n}^2(d_x b)$	$A_{2n}^2(bb)$	$A_{3n}^2(d_x d_x)$	$A_{4n}^2(a p_z)$	$A_{5n}^2(ad_z)$	$A_{6n}^2(d_z p_z)$	$A_{7n}^2(aa)$	$A_{8n}^2(p_z p_z)$	$A_{9n}^2(d_z d_z)$
$ 1s\rangle$	-3.528	0.506	0.456	0.037	0	0	0	0	0	0
$ 2s\rangle$	-0.360	0	0	0	0.008	0.001	0.389	0.000	0.598	0.004
$ 3s\rangle$	1.0733	0	0	0	0.373	0.026	0.314	0.000	0.277	0.009
$ 4s\rangle$	2.230	0	0	0	0.016	0.693	0.047	0.192	0.034	0.019
$ 5s\rangle$	3.349	0.361	0.529	0.109	0	0	0	0	0	0
$ 6s\rangle$	3.664	0	0	0	0.529	0.009	0.229	0.1323	0.090	0.011
$ 7s\rangle$	6.299	0	0	0	0.071	0.215	0.004	0.670	0.001	0.040
$ 8s\rangle$	11.018	0	0	0	0.002	0.058	0.017	0.005	0.000	0.917
$ 9s\rangle$	11.439	0.132	0.014	0.854	0	0	0	0	0	0

Таблица 2. Спектральные веса исходных двухдырочных конфигураций в триплетных состояниях

$ mM\rangle$	E_{mM}, eV	$B_{1m}^2(d_x a)$	$B_{2m}^2(ba)$	$B_{3m}^2(d_x d_z)$	$B_{4m}^2(bd_z)$	$B_{5m}^2(d_x p_z)$	$B_{6m}^2(bp_z)$
$ 1M\rangle$	-2.085	0.001	0.000	0.013	0.073	0.382	0.531
$ 2M\rangle$	-0.661	0.196	0.316	0.052	0.398	0.026	0.013
$ 3M\rangle$	1.552	0.274	0.215	0.018	0.430	0.057	0.007
$ 4M\rangle$	3.289	0.021	0.002	0.015	0.006	0.518	0.438
$ 5M\rangle$	5.433	0.452	0.445	0.094	0.000	0.003	0.006
$ 6M\rangle$	9.520	0.057	0.022	0.809	0.093	0.014	0.001

раз тем, что вклад от исходных конфигураций в обменное взаимодействие $J_A(\mathbf{R}_{ij})$ пропорционален доминирующим интегралам перескока t_{pd} и t_{pp} . В сочетании с высокими спектральными весами конфигураций $(d_x b)$ и $(b)^2$ в основном состоянии это и дает $|J_A/J_B| \gg 1$. Вклад основных двухдырочных состояний в обменное взаимодействие, который теперь нетрудно оценить, представляет собой 97.2 и 3.7% в J_A и J_B соответственно.

В совокупности с малыми и сравнимыми значениями ферромагнитного и антиферромагнитного вкладов от возбужденных состояний это свидетельствует о том, что накладываемое в [9] ограничение („констрейнт“) на конфигурационное пространство ВТСП-материалов приводит к ошибке в расчете обменного взаимодействия менее 1%.

Вклад от основного состояния в секторе A_{1g} настолько сильный, что кроссовер синглетных и триплетных состояний не меняет знака обменного взаимодействия и оно остается антиферромагнитным. Этот результат можно получить, исследуя обменное взаимодействие в ВТСП-материалах с необычной электронной структурой [11,12]. В обоих случаях обнаруживается выход ${}^3B_{1g}$ -состояний на самый потолок валентной зоны. В одном случае [11] этот эффект достигается за счет химического давления при замещении Са на У в соединении $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_{1-x}\text{Y}_x\text{Cu}_2\text{O}_{8+\delta}$ ($0.92 < x < 0.55$), в другом — за счет внешнего одноосного давления в $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ [12]. Мы привели расчет обменного взаимодействия для параметров, взятых из работы [12]. В гипотетической точке кроссовера антиферромагнитный характер обменного взаимодействия сохраняется, но уменьшается по абсолютной величине $J^{\text{eff}} \approx 0.078 \text{ eV}$.

Таким образом, несмотря на конкуренцию за основное состояние между синглетными и триплетными состояниями, антиферромагнитный характер обменного взаимодействия обусловлен особенностями кристаллической структуры ВТСП-материалов и химической природой входящих в нее элементов.

Авторы благодарят В.В. Валькова за интерес к работе и стимулирующие обсуждения.

Список литературы

- [1] Л.Н. Булаевский, Э.Л. Нагаев, Д.И. Хомский. ЖЭТФ **54**, 1562 (1968).
- [2] K.A. Chao, J. Spalek, A.M. Oles. J. Phys. C: Cond. Matter **10**, 271 (1977).
- [3] V.I. Belinicher, A.L. Chenyshev. Phys. Rev. B **47**, 390 (1993).
- [4] В.А. Гавричков, С.Г. Овчинников. ФТТ **40**, 184 (1998).
- [5] F.C. Zhang, T.M. Rice. Phys. Rev. B **41**, 7243 (1990).
- [6] М.М. Коршунов, С.Г. Овчинников. ФТТ **43**, 399 (2001).
- [7] М.М. Korshunov, V.A. Gavrichkov, S.G. Ovchinnikov, I.A. Nekrasov, Z.V. Pchelkina, V.I. Anisimov. Phys. Rev. B **72**, 165 104 (2005).
- [8] Yu.B. Gaididei, V.M. Loktev. Phys. Stat. Sol. (b) **147**, 307 (1988).
- [9] В.А. Гавричков, С.Г. Овчинников, А.А. Борисов, Е.Г. Горячев. ЖЭТФ **118**, 422 (2000).
- [10] Р.О. Зайцев. ЖЭТФ **68**, 207 (1975).
- [11] C. Janowitz, U. Seidel, R.-S.T. Under, A. Krapf, R. Manzke, V. Gavrichkov, S. Ovchinnikov. Письма в ЖЭТФ **80**, 819 (2004).
- [12] В.А. Гавричков, С.Г. Овчинников, Г.В. Ульм. ФТТ **49**, 580 (2007).