1989 ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА Том 31, в. 2
1989 SOLID STATE PHYSICS Vol. 31, № 2

УДК 621.375

МАССА ПОЛЯРОНА В МОДЕЛИ ХАББАРДА

Д. В. Хвещенко

Строится лагранжево описание модели Хаббарда в представлении когерентных состояний. Найдено солитоноподобное решение уравнений движения, описывающее магнитный полярон. Вычисляется эффективная масса полярона большого радиуса.

Открытие высокотемпературных сверхпроводников стимулировало поиск новых по сравнению со стандартной теорией БКШ механизмов сверхпроводимости. В частности, в работе [1] в рамках двумерной модели Хаббарда (МХ) [2] рассматривался возможный механизм сверхпроводимости в допированном Ba или Sr соединении La_2CuO_4, осуществляющейся за счет связывания в пары магнитных поляронов [3, 4]. Биполяронная жидкость переходит в сверхтекучее состояние при температуре двумерной бозе-конденсации $T_c \sim nM_B^{-1}$, где n — концентрация дырок, M_B — масса биполярона. В настоящей работе мы вычислим массу одиночного полярона и покажем, что масса биполярона имеет тот же порядок величины.

Мы будем исходить из эффективного гамильтониана МХ, действующего в пространстве состояний, в которых все узлы решетки заполнены не более чем однократно. Каждый узел может находиться в одном из трех состояний $\{|a\rangle\}$: спин электрона на узле направлен вверх (вниз) ($a=\pm$) либо узел не заполнен ($a=0$). Если число электронов равно числу узлов, то, как известно, в пределе сильной связи МХ сводится к гейзенберговскому антиферромагнетику. В терминах операторов Хаббарда $X^{ab}=|a\rangle\langle b|$ гамильтониан МХ записывается в виде

$$H=\sum_{i,j}\left\{-t\sum_{\alpha=\pm}X_i^{0\alpha}X_j^{\alpha 0}+\frac{1}{4}J\sum_{\alpha,\beta=\pm}X_i^{\alpha\beta}X_j^{\beta\alpha}\right\}. \tag{1}$$

Интеграл перескока t и обменный интеграл J находятся в соотношении $t \gg J$ [2]. Здесь и ниже узлы i и j считаются ближайшими соседями. Для квазиклассических вычислений удобно использовать представление когерентных состояний (КС), являющееся обобщением известного представления КС для спиновой системы [5]. Квантование гамильтониана (1) и вывод лагранжиана МХ в этом представлении были впервые осуществлены Вигманом [6]. В лагранжевой формулировке МХ описывается полем единичного вектора $\mathbf{n}_i(\tau)$, представляющего собой локальную намагниченность, и полем бесспинового фермиона $\chi_i(\tau)$, описывающим дырки, распространяющиеся на фоне заполненной хаббардовской зоны. Уравнения движения для этих полей, следующие из лагранжиана МХ, выведенного в работе [6], имеют вид

$$\left[\mathbf{n}_i, \frac{d}{d\tau}\mathbf{n}_i\right](1-\rho_i)=J\sum_j(\mathbf{n}_j-\mathbf{n}_i\Phi_{ij})(1-\rho_i)(1-\rho_j)-$$
$$-\left\{it\sum_j[\mathbf{n}_i, \mathbf{U}_{ij}]\chi_i^+\chi_j+\text{h. c.}\right\}, \tag{2}$$

$$i\frac{d}{d\tau}\chi_i-i\,\mathrm{tr}\left(Pg_i^+\frac{d}{d\tau}g_i\right)\chi_i=-t\sum_j V_{ij}\Psi_i-\frac{J}{2}\chi_i\sum_j\Phi_{ij}. \tag{3}$$

Здесь $\rho_i=\chi_i^+\chi_i$ — плотность дырок; матрица спиновых вращений g_i связана с $\mathbf{n}_i$ соотношением $\mathbf{n}_i\sigma=g_i\sigma^3g_i^+$; $1/2\,(V_{ij}+\mathbf{U}_{ij}\sigma)=g_iPg_j^+$; $\Phi_{ij}=\mathbf{n}_i\mathbf{n}_j$.

Магнитный полярон представляет собой нетопологический солитон, являющийся решением уравнений (2), (3). Минимальной энергией обладает статическая конфигурация поля $\mathbf{n}_i$, в которой внутри круговой области радиуса $R\sim(t/J)^{1/4}$ (в единицах постоянной решетки) устанавливается ферромагнитное (ФМ) упорядочение, а переход к антиферромагнитному (АФМ) порядку происходит в области границы, ширина которой $\Delta=O(1)$. Мы будем предполагать, что выполняется условие $R\gg1$, при котором поляронное состояние допускает квазиклассическое описание. Энергия статического полярона

$$E_0=4\pi R^2J\,(1/4-\langle\mathbf{S}_i\mathbf{S}_j\rangle)+t\,(-4+\alpha_{01}^2/R^2), \tag{4}$$

где α_{01} — первый нуль функции Бесселя $J_0(x)$, складывается из энергии спиновой подсистемы E_{s0}, отсчитанной от основного состояния системы без дырки, и энергии дырочного уровня ε_0. Параметр ближнего АФМ порядка $\langle\mathbf{S}_i\mathbf{S}_j\rangle$, входящий в (4), имеет значение $0\,(1)$, которое определяется квантовыми флуктуациями в основном состоянии двумерного АФМ.

Заметим, что, используя решения классических уравнений (2), (3) для описания спиновой системы за пределами ФМ области, мы пренебрегаем существованием конечной вероятности пребывания дырки вне ФМ области, которая тем меньше, чем больше t/J.

Вводя две подрешетки (A и B), представим решение $\mathbf{n}_i^{(0)}$ классических уравнений движения, описывающее статический полярон с центром в начале координат, в виде

$$\mathbf{n}_i^{(0)}=\left[\begin{array}{ll}\mathbf{n}_0, & i\in A,\\ g\,(\mathbf{e}_i,\ \Phi\,(r))\,\mathbf{n}_0, & i\in B,\ \ r=|\mathbf{r}_i|.\end{array}\right. \tag{5}$$

Функция $\Phi\,(r)$ меняется от 0 до π в области границы; $g\,(r)$ — матрица поворота на угол $\Phi\,(r)$ вокруг направления, задаваемого лежащим в плоскости решетки и ортогональным к $\mathbf{r}_i$ единичным вектором $\mathbf{e}_i$. Без учета конечной ширины границы волновая функция дырки внутри полярона радиуса R дается выражением

$$\chi_i^{(0)}=\frac{1}{R\sqrt{\pi}}\,\theta\,(R-r)\,J_0\,(\alpha_{01}r/R)/J_1\,(\alpha_{01}), \tag{6}$$

где $\theta\,(x)$ — ступенчатая функция.

Рассмотрим теперь полярон, движущийся со скоростью v. Распределение $\mathbf{n}$-поля $\mathbf{n}_i=\mathbf{n}_i^{(0)}+\delta\mathbf{n}_i$ искажается в области границы на величину

$$\delta\mathbf{n}_i=\frac{-v}{4J}\left(\frac{1+\cos\Phi\,(r)}{1-\cos\Phi\,(r)}\right)^{1/2}[\mathbf{n}_i^{(0)},\ \ g\,(r)\,\mathbf{n}_i^{(0)}]. \tag{7}$$

Поправка в $\chi_i^{(0)}$ в главном порядке по $1/R$ несущественна. Подстановка (5)—(7) в (1) дает энергию движущегося полярона $H_{\text{eff}}\,(\mathbf{n},\ \chi)=E_s\,(v)+\varepsilon\,(v)$. Это позволяет определить его массу M, включающую в себя помимо затравочной массы дырки $m_0=(2t)^{-1}$ также поправки к ней $\delta m=d^2\varepsilon/dv^2$ и массу ФМ «шубы» $M_s=d^2E_s/dv^2$, возникшую за счет переноса спиновой поляризации. При этом оказывается, что главный вклад в M происходит от $\delta E_s\,(v)$, а поправка к дырочному уровню приводит к вкладу относительного порядка малости $O\,(1/R)$. Таким образом, при условии $R\gg1$ для массы полярона получаем следующее значение:

$$M\simeq M_s=0.25R/J. \tag{8}$$

Результат (8) допускает следующую интерпретацию. Устанавливая ФМ порядок внутри области радиуса R, дырка обеспечивает границе полярона определенную жесткость, в результате чего движение полярона осуществляется как когерентное возбуждение границы как целого. В силу этого масса полярона складывается из $M\simeq2\pi R\Delta$ «масс» отдельных спинов, образующих границу, для каждого из которых роль интеграла перескока играет величина J.

Перейдем к задаче о биполяроне. Энергия двух дырок, находящихся в общей ФМ области, ниже энергии двух изолированных поляронов. Являясь бесспиновыми фермионами, дырки занимают основное и первое возбужденное состояния в цилиндрической яме, радиус которой равен радиусу биполярона R_B. Биполярон обладает внутренним орбитальным моментом $l_z=1$ и имеет энергию связи

$$\varepsilon_B=\left[\frac{2\alpha_{01}-(\alpha_{01}^2+\alpha_{11}^2)^{1/2}}{\alpha_{01}}\right]\varepsilon_p,$$

где α_{11} — первый нуль функции Бесселя $J_1(x)$; $\varepsilon_p=O((Jt)^{1/2})$ — энергия одиночного полярона, отсчитанная от дна дырочной зоны $-4t$.

Возбуждение внутренних степеней свободы как в поляроне, так и в биполяроне требует конечной энергии порядка J/R^2, что отвечает минимальной энергии магнона, распространяющегося внутри ФМ области. Ввиду щелевого характера возбуждений, связанных с внутренними степенями свободы, поляроны и биполяроны вплоть до температуры порядка J/R^2 движутся как точечные частицы (без искажения формы). Указанная температура велика по сравнению с температурой Бозе-конденсации T_c, которая при малой плотности дырок ($n\ll 1/R^2$) не превосходит J/R^3. Именно это обстоятельство делает возможным использование конечного набора коллективных координат при рассмотрении полярона, представляющего собой систему многих частиц.

Повторяя проведенное выше рассмотрение для биполярона, получаем, что при достаточно низкой температуре $T\lesssim J/R_B^3$ масса биполярона имеет величину $0(R_B/J)$ и обусловлена главным образом когерентными возбуждениями границы ФМ области.

Если в исходную МХ включаются дополнительные взаимодействия, например межцентровое кулоновское отталкивание, то может возникнуть резонансная ситуация, когда энергия связи биполярона мала по сравнению с температурой. В этих условиях биполяроны представляют собой метастабильные образования и решение вопроса о движении таких комплексов может потребовать более полного учета многочастичного характера задачи. Так, введение дальнодействующего кулоновского отталкивания дырок $H_{\rm int}=\gamma\varepsilon_pR/r$ при γ, лежащем в интервале от 0.3 до 0.6, препятствует образованию связанных состояний из $N\geqslant 3$ частиц, но делает выгодными биполяроны [1]. Проведенное выше рассмотрение относится к значениям γ, отстоящим от границ рассматриваемого интервала не менее чем на $\Delta\gamma\sim 1/R^4$.

Полученные результаты непосредственно обобщаются на случай локализованных возбуждений, носящих поляронный характер, в D-мерной МХ. В законе дисперсии локализованного возбуждения с максимальной проекцией спина S присутствует член $O\left(JS^{\frac{1-D}{D}}\sum_{\mu=1}^{D}\cos k_\mu\right)$. Заметим, что при малых S (возбуждения типа «квазиосцилляторов»; см. [8]) главную роль в законе дисперсии играет член

$$O\left(t\exp\left(-\mathrm{const}\,S^{\frac{D-1}{D}}\right)\left(\sum_{\mu=1}^{D}\cos k_\mu\right)^2\right),$$

наличие которого может быть установлено на основе метода, изложенного в [9].

Автор выражает благодарность В. Л. Покровскому и П. Б. Вигману за обсуждение результатов работы.

Литература

[1] Покровский В. Л., Уймин Г. В., Хвещенко Д. В. // Письма в ЖЭТФ. 1987. Т. 46. Прилож. С. 137—139.
[2] Habbard J. // Proc. Roy. Soc. 1963. V. A276. N 1365. P. 238—257.
[3] Nagaoka Y. // Phys. Rev. 1966. V. 147. N 1. P. 392—405.
[4] Нагаев Э. Л. // ЖЭТФ. 1968. Т. 54. № 2. С. 228—238.
[5] Klander J. R. // Phys. Rev. D. 1979. V. D19. N 8. P. 2349—2357.
[6] Wiegmann P. B. // Phys. Rev. Lett. 1988. V. 60. P. 821—823.
[7] Volovik G. E. // J. Phys. C. 1987. V. C20. N 7. P. L83—L87.
[8] Булаевский Л. Н., Нагаев Э. Л., Хомский Д. И. // ЖЭТФ. 1968. Т. 54. № 6. С. 1562—1566.
[9] Brinkman W. F., Rice T. M. // Phys. Rev. B. 1970. V. B2. N 5. P. 1324—1338.

Институт теоретической физики
им. Л. Д. Ландау АН СССР
Черноголовка
Московская область

Поступило в Редакцию
25 марта 1988 г.
В окончательной редакции
1 августа 1988 г.