

На правах рукописи

КОРШУНОВ Максим Михайлович

**СВОЙСТВА НОРМАЛЬНОЙ И СВЕРХПРОВОДЯЩЕЙ ФАЗ В  
СИНГЛЕТ-ТРИПЛЕТНОЙ МОДЕЛИ ОКСИДОВ МЕДИ**

01.04.07 – физика конденсированного состояния

**Автореферат**

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Красноярск – 2004

Работа выполнена в Институте физики им. Л. В. Киренского СО РАН

Научный руководитель: профессор, доктор физико-математических наук,  
Овчинников С.Г.

Официальные оппоненты: профессор, доктор физико-математических наук,  
Зиненко В.И.  
доцент, кандидат физико-математических наук,  
Валькова Т.А.

Ведущая организация: Институт физики металлов УрО РАН  
г. Екатеринбург

Защита состоится «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2004 г. в \_\_\_\_\_ час. на заседании  
диссертационного совета Д 003.055.02 при Институте физики СО РАН по адресу:  
660036, г. Красноярск, Академгородок, Институт физики им. Л. В. Киренского СО  
РАН.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке Института физики им.  
Л. В. Киренского СО РАН

Автореферат разослан «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2004 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,  
доктор физико-математических наук

Аплеснин С.С.

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. С теоретической точки зрения проблема высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) заключается не в том, чтобы просто в рамках некоторой модели получить столь высокие значения температуры перехода в сверхпроводящее состояние  $T_c$ , а в необходимости объяснить совокупность необычных свойств как несверхпроводящей, так и сверхпроводящей (СП) фаз купратов. Необычные свойства наблюдаются как в транспортных экспериментах (напр. зависимость сопротивления от температуры), так и в бурно развивающемся в последнее время методе ARPES – фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением. Эти эксперименты дают информацию о важных низкоэнергетических свойствах электронной структуры – законе дисперсии, Ферми поверхности, спектральной интенсивности, симметрии параметра порядка в СП фазе, а также об эволюции этих характеристик с концентрацией допирования. Так, в недодопированной области наблюдаются отклонения от теоремы Латтинжера, асимметрия фазовой диаграммы относительно электронного (n-тип,  $Nd_{2-x}Ce_xCuO_4$  - NCCO,  $Pr_{2-x}Ce_xCuO_4$  - PCCO, и др.) и дырочного (p-тип,  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$  - LSCO, и др.) допирования, появление внутрищелевых состояний (in-gap states) с допированием и эволюция Ферми поверхности от электронного к дырочному типу.

Поскольку ВТСП купраты относятся к широко исследуемому в последнее время классу систем с сильными электронными корреляциями (СЭК), зонные расчеты часто дают неверные результаты для этих веществ, особенно в недодопированной области. Это ограничивает исследование купратов модельными подходами – часто используются такие модели СЭК, как t-J модель, модель Хаббарда и др.

Однако, несмотря на существенный интерес многих авторов к этим моделям, прогресс достигнут лишь в понимании некоторых базовых свойств этих моделей, а не в объяснении совокупности экспериментальных данных как по сверхпроводящему, несверхпроводящему антиферромагнитному (АФМ) и парамагнитному состояниям, так и по другим реализующимся в купратах фазам с

неоднородными магнитными состояниями. Связано это, в частности, с тем, что, во-первых, не существует общих рецептов описания систем с СЭК, а во-вторых, все еще остается открытым вопрос об адекватной низкоэнергетической модели ВТСП и ее параметрах.

Исходя из этого, для построения количественной теории сверхпроводимости необходимо сначала на основе реалистичной модели, которой является многозонная  $p-d$  модель, сформулировать низкоэнергетическую модель купратов, определить ее параметры, а затем исследовать свойства купратов в этой модели в режиме СЭК.

**Целью данной работы** явилось:

1. Поскольку многозонная  $p-d$  модель сложна для исследования, сначала необходимо сформулировать эффективную низкоэнергетическую модель для многозонной  $p-d$  модели.
2. Затем следует определить набор параметров эффективной модели, необходимый для количественного описания ВТСП.
3. В антиферромагнитной фазе рассмотреть влияние спиновых флуктуаций на формирование внутрищелевых состояний.
4. Исследовать в эффективных моделях общие свойства Ферми поверхности – теорему Латтинжера, и найти возможность ее формулировки в системах с сильными электронными корреляциями.
5. Перед тем, как исследовать сверхпроводящее состояние, убедиться, что эффективные модели с учетом спиновых флуктуаций дают разумное согласие с экспериментально наблюдаемыми свойствами парамагнитной несверхпроводящей фазы.
6. В рамках эффективных моделей исследовать свойства сверхпроводящей фазы ВТСП как  $p$ -, так и  $n$ -типа.

**Научная новизна:**

1. На основе многозонной  $p-d$  модели сформулирована эффективная низкоэнергетическая модель, асимметричная для  $p$ - и  $n$ -типа купратов. Определены параметры эффективного гамильтониана для обоих типов.

2. Исследовано влияние спиновых флуктуаций на формирование внутрищелевых состояний в недопированных АФМ купратах. Предсказана возможность наблюдения этих состояний в ARPES экспериментах и указаны точки зоны Бриллюэна, наиболее благоприятные для наблюдения.
3. Для металлических систем с СЭК сформулирована обобщенная теорема Латтинжера, устанавливающая связь между объемами Ферми поверхности невзаимодействующей системы, Ферми поверхности системы взаимодействующих квазичастиц и их спектральным весом.
4. С учетом ближнего магнитного порядка количественно описана эволюция химпотенциала с допированием и Ферми поверхность при оптимальном допировании в парамагнитной несверхпроводящей фазе купратов n-типа. В этих же приближениях в купратах p-типа показано влияние синглет-триплетных возбуждений на спектр квазичастиц.
5. Получено количественное согласие рассчитанной и экспериментальной зависимостей температуры перехода в сверхпроводящее состояние от концентрации носителей в n-типе.
6. Для купратов p-типа показано, что помимо спин-флуктуационного механизма сверхпроводящего спаривания типичного для  $t$ - $J^*$  модели из-за наличия синглет-триплетной гибридизации имеет место спин-экситонный механизм. Выяснено взаимное влияние этих механизмов на концентрационную зависимость температуры перехода в сверхпроводящее состояние.

**Научная и практическая ценность.** Для реалистичной многозонной  $p$ - $d$  модели получен эффективный гамильтониан (эффективная синглет-триплетная  $t$ - $J$  модель), описывающий низкоэнергетические возбуждения в оксидах меди. Определены параметры эффективного гамильтониана, которые необходимо использовать для количественного описания экспериментов. Исследована физическая природа внутрищелевых состояний в недопированных АФМ купратах и показана принципиальная возможность наблюдения этих состояний в эксперименте.

Сформулирована обобщенная для систем с СЭК теорема Латтинжера, дающая способ вычисления объема Ферми взаимодействующих квазичастиц при известном спектральном весе квазичастиц и объеме Ферми поверхности невзаимодействующей системы. Сформулированы физические приближения, учитывающие ближний магнитный порядок, и позволяющие добиться количественного описания как нормальной, так и сверхпроводящей фаз купратов *p*-типа. Показано, что в купратах *p*-типа влияние спин-экситонного механизма спаривания мало по сравнению со спин-флуктуационным механизмом. Сделан вывод о важности учета неоднородных магнитных состояний для формы электронного спектра и фазовой диаграммы в слабодопированных купратах *p*-типа.

**Достоверность** полученных результатов достигнута применением адекватной и реалистичной многозонной *p-d* модели, применением физически обоснованных для систем с СЭК приближений, учитывающих магнитный порядок за пределами расщепления Хаббард-I, а так же хорошим согласием теоретически рассчитанных и экспериментальных данных.

**Положения, вносимые на защиту:**

1. Показано, что эффективной низкоэнергетической моделью для многозонной *p-d* модели в режиме СЭК – является синглет-триплетная *t-J* модель для *CuO<sub>2</sub>*-слоя.
2. Доказан спин-флуктуационный механизм формирования внутрищелевых состояний в недопированных АФМ купратах.
3. Сформулирована обобщенная для систем с СЭК теорема Латтинжера.
4. Развита физические представления о влиянии ближнего магнитного порядка на свойства нормальной парамагнитной фазы и зависимости температуры перехода в сверхпроводящее состояние.
5. Построена микроскопическая теория нормальных и сверхпроводящих свойств купратов *p*-типа, очень хорошо согласующаяся с экспериментом.
6. Проведено исследование влияния синглет-триплетных возбуждений на свойства нормальной и сверхпроводящей фаз в купратах *p*-типа.

**Апробация работы.** Основные результаты данной работы обсуждались на международных конференциях: “XXIX Международная зимняя школа по теоретической физике «Коуровка-2002»” (Кунгур – 2002), “Международная конференция по сильно коррелированным электронным системам” SCES’02 (Краков, Польша – 2002), “Международная конференция по магнетизму” ICM-2003 (Рим, Италия – 2003), “XXX Международная зимняя школа физиков-теоретиков «Коуровка-2004»” (Кыштым – 2004), “5-ая международная конференции по новым теориям, открытиям и приложениям сверхпроводников и родственных веществ” New3SC-5 (Чунцин, Китай – 2004), на всероссийских конференциях и симпозиумах: “33-е Всероссийское Совещание по Физике Низких температур” НТ-33 (Екатеринбург – 2003), “Всероссийская научная конференция студентов-физиков и молодых ученых” ВНКСФ-7, ВНКСФ-8, ВНКСФ-9 (Санкт-Петербург – 2001, Екатеринбург – 2002, Красноярск – 2003, соответственно), на конференциях Молодых ученых КНЦ СО РАН (Красноярск – 2003 и 2004) и “III конференции молодых ученых, посвященной М.А. Лаврентьеву” (Новосибирск – 2003), а также докладывались на научных семинарах Института Физики СО РАН.

**Публикации:** Основные результаты диссертации изложены в 17 печатных работах, из них 7 статей в центральных рецензируемых журналах и 6 работ в трудах международных конференций.

**Структура и объем работы.** Диссертация состоит из четырех глав, заключения и списка литературы. Диссертация изложена на 125 страницах, содержит 26 рисунков, 7 таблиц и список литературы из 184 наименований.

## ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

**В первой главе,** являющейся по сути своей введением в проблему ВТСП, приведен обзор экспериментальных данных, имеющихся на сегодняшний день, проанализирована применимость зонных расчетов (LDA, LDA+U), рассмотрены базовые модели СЭК – t-J модель и модель Хаббарда. Проанализированы результаты исследования этих моделей в несверхпроводящей и сверхпроводящей

фазах, а также описаны приближения, широко используемые в описании систем с СЭК. Акцентируется внимание на наблюдаемой асимметрии купратов р- и n-типов и отсутствии этой симметрии в t-J модели и модели Хаббарда. Затем приведены результаты исследования многозонной p-d модели в обобщенном методе сильной связи [1] и показано, что эта модель является адекватной для описания ВТСП купратов и не всегда может быть редуцирована к модели Хаббарда или t-J модели при низких энергиях возбуждений. Учет трехцентровых взаимодействий [2] является важной частью теории сверхпроводимости в системах с СЭК. Более того, теория сверхпроводимости, основанная на антиферромагнитном обменном взаимодействии, может быть построена в рамках теории слабой связи типа БКШ, поскольку поправки к ней от учета эффектов затухания квазичастиц будут малы [3]. Последний параграф первой главы содержит постановку задачи. Остальные главы представляют собой оригинальные результаты.

**Во второй главе,** аналогично тому, как t-J\* модель (t-J модель с учетом трехцентровых взаимодействий) получается из модели Хаббарда, нами получена эффективная низкоэнергетическая модель для многозонной p-d модели. Эффективный гамильтониан асимметричен для дырочно (р-тип) и электронно (n-тип) допированных купратов. Для систем n-типа мы имеем t-J\* модель:

$$H_{t-J^*} = \sum_{f,\sigma} \varepsilon_1 X_f^{\sigma\sigma} + \sum_{\langle f,g \rangle, \sigma} t_{fg}^{00} X_f^{\sigma 0} X_g^{0\sigma} + \sum_{\langle f,g \rangle} J_{fg} \left( \mathbf{S}_f \mathbf{S}_g - \frac{1}{4} \tilde{n}_f \tilde{n}_g \right) + H_3,$$

$$H_3 = - \sum_{\langle f,g,m \rangle, \sigma} \frac{t_{fm}^{0S} t_{mg}^{0S}}{E_{ct}} \left( X_f^{\sigma 0} X_m^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} X_g^{0\sigma} - X_f^{\sigma 0} X_m^{\bar{\sigma}\sigma} X_g^{0\bar{\sigma}} \right).$$

Здесь  $J_{fg} = 2(t_{fg}^{0S})^2 / E_{ct}$  - обменный интеграл,  $\tilde{n}_f, \mathbf{S}_f$  - операторы числа частиц и спина,  $\varepsilon_i$  - одноэлектронные энергии,  $X_f^{pq} = |p\rangle\langle q|$  - операторы Хаббарда.

Для систем р-типа получается синглет-триплетная t-J модель, включающая в себя перескоки, связанные с двухчастичными синглетом  $S$  (с симметрией  $^1A_{1g}$ ) и триплетом  $\{T^2\sigma, T^0\}$  (с симметрией  $^3B_{1g}$ ):



$$H_{eff} = \sum_f H_0 + \sum_{\langle f,g \rangle, \sigma} H_t + \sum_{\langle f,g \rangle} J_{fg} \left( \vec{S}_f \vec{S}_g - \frac{1}{4} n_f n_g \right) + H_{eff3},$$

где  $H_0 = \varepsilon_1 \sum_{\sigma} X_f^{\sigma\sigma} + \varepsilon_{2S} X_f^{SS} + \varepsilon_{2T} \sum_M X_f^{TMTM}$ ,  $H_t$  - кинетическая часть гамильтониана и  $H_3$  - трехцентровые взаимодействия. Благодаря тому, что в кинетической части гамильтониана:

$$H_t = t_{fg}^{SS} X_f^{S\bar{\sigma}} X_g^{\bar{\sigma}S} + t_{fg}^{ST} 2\sigma\gamma_b \left[ X_f^{S\bar{\sigma}} \left( \sigma\sqrt{2} X_g^{\bar{\sigma}T0} - X_g^{\sigma T2\sigma} \right) + h.c. \right] + t_{fg}^{TT} \left( \sigma\sqrt{2} X_f^{T0\bar{\sigma}} - X_f^{T2\sigma\sigma} \right) \left( \sigma\sqrt{2} X_g^{\bar{\sigma}T0} - X_g^{\sigma T2\sigma} \right)$$

присутствуют синглет-триплетные перескоки, в этой модели возможно спаривание за счет спин-экситонного механизма [4], помимо известного в t-J модели спин-флуктуационного механизма СП спаривания [5].

Помимо этого, установлена связь параметров эффективных моделей с микроскопическими параметрами многозонной p-d модели. Микроскопические параметры известны для недопированных купратов; с их помощью определен набор параметров эффективных моделей, который оказался в хорошем согласии с параметрами, полученными ab initio (для p-типа) и из стандартного зонного подхода (для n-типа), а также с используемыми в литературе. Оказалось, что межатомные параметры перескока и обмена медленно спадают с расстоянием, дальнейшие расчеты проводились с учетом всех обменных интегралов и интегралов перескока до 5-ой координационной сферы.

**В третьей главе** нами исследованы свойства несверхпроводящей фазы купратов в рамках эффективных моделей. Одной из интересных особенностей АФМ фазы купратов является формирование так называемых внутрищелевых состояний (in-gap states), расположенных в щели с переносом заряда между валентной зоной и зоной проводимости. В рамках t-t'-J модели нами показано, что природа внутрищелевых состояний в недопированных купратах спин-флуктуационная, т.е. это эффект спинового полярона: вследствие нулевых квантовых флуктуаций спина движение квазичастицы без переворота спина имеет ненулевую вероятность. Ранее

экспериментальные доказательства существования внутрищелевых состояний были получены только в слабодопированном LSCO. Наши результаты показывают, что эти состояния должны наблюдаться во всех недопированных АФМ купратах. Спектральные функции внутрищелевых состояний имеют вид небольшого низкоэнергетического сателлита, который может быть обнаружен в ARPES экспериментах.

Теорема Латтинжера, утверждающая, что объем Ферми поверхности системы частиц с взаимодействием равен объему Ферми поверхности для невзаимодействующих частиц, для систем с СЭК не выполняется. Одна из

главных причин этого – отличие спектрального веса квазичастиц от единицы. Но при этом система находится в металлическом состоянии и роль скоро функция распределения квазичастиц вблизи уровня Ферми имеет скачок, мы можем сформулировать обобщенную на случай квазичастиц теорему Латтинжера в следующем виде: объем Ферми поверхности системы невзаимодействующих частиц равен объему Ферми поверхности квазичастиц с взаимодействием с учетом спектрального веса этих квазичастиц. Из анализа общей структуры функции Грина и подробного исследования решения Хаббард-I для t-J модели и модели Хаббарда показано, что теорема Латтинжера в таком обобщенном смысле выполняется для металлических систем с СЭК.

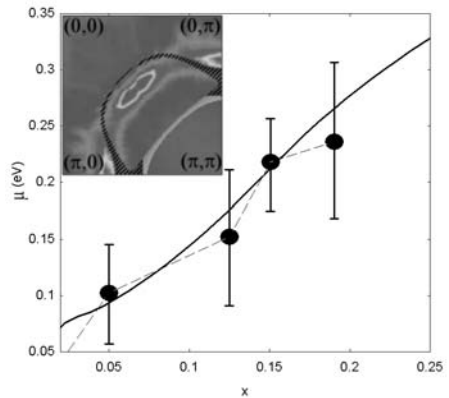


Рис. 1. Сплошная линия - зависимость химпотенциала  $\mu(x)$  в t-J\* модели с учетом спиновых корреляторов, экспериментальные точки из работы [7]. На вставке – экспериментальная [8] и рассчитанная нами Ферми поверхности для  $\text{Nd}_{1.85}\text{Ce}_{0.15}\text{CuO}_4$ .

Затем, на основе обобщенного приближения Хартри-Фока, сформулировано расщепление, учитывающее ближний магнитный порядок (спиновые флуктуации) за пределами Хаббард-I:  $\langle X_f^{\sigma\sigma} X_g^{\sigma'\sigma'} \rangle \rightarrow n_p^2 + \frac{\sigma}{\sigma+1} \frac{1}{2} C_{fg}$ ,  $\langle X_f^{\sigma\bar{\sigma}} X_g^{\bar{\sigma}\sigma} \rangle \rightarrow C_{fg}$ , где  $n_p$  - числа заполнения одночастичного состояния,  $C_{fg} = \langle X_f^{\sigma\bar{\sigma}} X_g^{\bar{\sigma}\sigma} \rangle = 2 \langle S_f^z S_g^z \rangle$  - спиновые корреляционные функции, самосогласованно найденные в t-J модели [6].

Далее, используя это приближение, исследована парамагнитная нормальная фаза ВТСП р- и п-типа. Для п-типа, где эффективной моделью является t-J\* модель, получено количественное описание эволюции химпотенциала с допированием и Ферми поверхности при оптимальном допировании в NCCO (Рис. 1).

Показано, что в эффективной синглет-триплетной t-J модели - низкоэнергетической модели купратов р-типа - имеет место гибридизация синглетного и триплетных состояний (см. Рис. 2, где показаны результаты расчетов в приближении следующих за ближайшими соседями и без учета спиновых флуктуаций и трехцентровых взаимодействий). Учет спиновых корреляционных функций, трехцентровых слагаемых и синглет-триплетной гибридизации приводит к согласию вычисленной и наблюдаемой в ARPES ширины зоны  $\sim 0.8$  эВ.

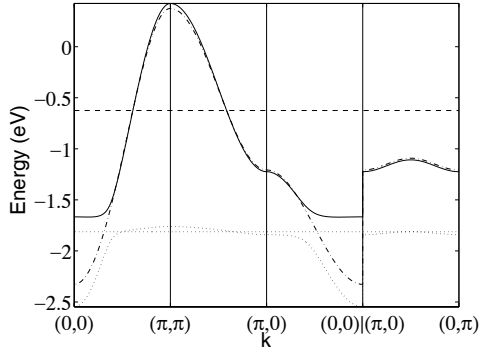


Рис. 2. Дисперсионные кривые для эффективной синглет-триплетной t-J модели (сплошная кривая – синглетная подзона, пунктирные – триплетные подзоны) и для t-J модели (штрихпунктирная кривая).

**Четвертая глава.** Имея адекватные низкоэнергетические модели и приближения, в которых хорошо описывается несверхпроводящая фаза, в четвертой главе нами исследованы свойства сверхпроводящей (СП) фазы. Следуя

экспериментальным указанием, рассматривалась только  $d_{x^2-y^2}$ -симметрия параметра порядка.

Полученная зависимость  $T_c(x)$  для ВТСП n-типа находится в прекрасном количественном согласии с экспериментальными данными (см. Рис. 3). Вычисленное расстояние между положением  $\mu$  и особенностью Ван-Хова, соответствующей плато в дисперсии в точке  $(\pi, 0)$ , равно  $\Delta E_{VH} = 0.27$  эВ, что очень хорошо согласуется с экспериментально наблюдаемым  $0.25 \div 0.35$  эВ. Спин-флуктуационный механизм сверхпроводимости в t-J модели давно известен, однако, для получения количественного согласия для  $T_c(x)$  и свойств нормальной фазы оказались принципиально важны такие детали эффективного гамильтониана, как медленное спадание межатомных перескоков и обменного взаимодействия с расстоянием (учитывались пять координационных сфер) и наличие слабых коррелированных перескоков (трехцентровые взаимодействия).

Принципиальным оказался также учет ближнего антиферромагнитного порядка для определения закона дисперсии квазичастиц, приведший к появлению

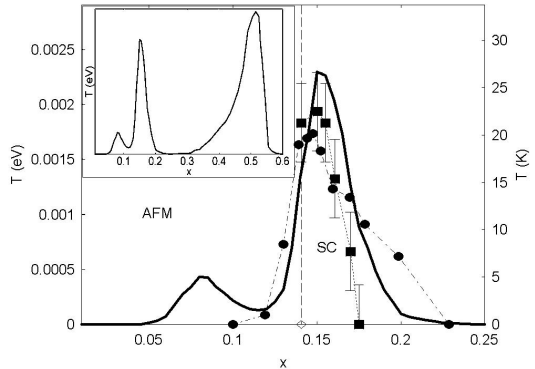


Рис. 3.  $T_c(x)$  для n-типа: сплошная жирная линия – теория, экспериментальные зависимости  $T_N(x)$  для NCCO (штриховая линия),  $T_c(x)$  для NCCO (пунктирная линия с черными квадратами) [9] и для PCCO (штрихпунктирная линия с черными кружками) [10]. На вставке – теоретически рассчитанная зависимость  $T_c(x)$  для более широкого диапазона концентраций.

дополнительных особенностей Ван-Хова. Только одновременный учет всех этих деталей позволил получить согласие с экспериментальными данными для электронной структуры нормальной фазы и  $T_c(x)$ . Что касается не учитываемого электрон-фононного взаимодействия, то существуют указания на слабость этого взаимодействия в ВТСП n-типа. (практически полное отсутствие изотоп-эффекта и отсутствие кинка в направлении  $(0,0) - (\pi, \pi)$ ).

Для купратов р-типа продемонстрировано влияние спин-флуктуационного и спин-экситонного механизмов спаривания в эффективной синглет-триплетной t-J модели на фазовую диаграмму. Показано, что конкуренция спин-экситонного механизма спаривания и процессов, приводящих к разрушению сверхпроводящих пар, приводит к конструктивному вкладу в  $T_c(x)$ . Этот вклад проявляется как сдвиг уровня оптимального допирования в область малых уровней допирования и небольшое повышение  $T_c(x)$  (Рис. 4). Однако, поскольку величина синглет-триплетной гибридизации мала, вклад спин-экситонного механизма спаривания также мал.

Как легко видеть, фазовая диаграмма для купратов р-типа не согласуется количественно с экспериментально наблюдаемой. Расхождение теоретических результатов с экспериментально наблюдаемыми объясняется отсутствием корректного учета магнитных фрустраций и неоднородных магнитных состояний,

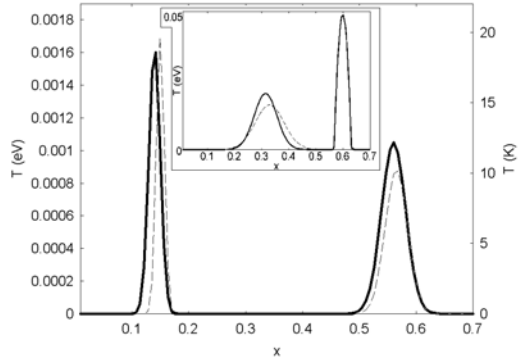


Рис. 4. Зависимость  $T_c(x)$  в купратах р-типа, вычисленная в синглет-триплетной t-J модели (жирная сплошная линия) и в t-J\* модели (штриховая линия). На вставке – фазовая диаграмма для этих моделей в приближении ближайших соседей без учета трехцентровых слагаемых и спиновых корреляторов.

играющих важную роль в купратах р-типа, но не в купратах n-типа. Также, некоторое количественное изменение полученных результатов будет происходить из учета электрон-фононного взаимодействия, по всей видимости, играющего не последнюю роль в ВТСП р-типа.

**В заключении** сформулированы основные результаты и выводы.

## РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ И ВЫВОДЫ

1. Построен эффективный гамильтониан для реалистичной многозонной p-d модели. Полученный эффективный гамильтониан, в отличие от t-J модели, асимметричен относительно систем n- и p- типа: в случае электронного допирования гамильтониан имеет вид стандартной t-J модели с трехцентровыми слагаемыми (t-J\* модель), в то время как для сверхпроводников p-типа со сложной структурой зон на потолке валентной зоны имеет место синглет-триплетная t-J\* модель, являющаяся обобщением t-J\* модели на случай наличия в системе двухчастичного триплета.
2. Исходя из микроскопических параметров многозонной p-d модели, определенных из сравнения с экспериментальными ARPES данными, вычислены параметры эффективного гамильтониана как для купратов p-типа, так и для n-типа. Полученные параметры находятся в хорошем согласии с параметрами, рассчитанными ab initio (для купратов p-типа) и из стандартного зонного подхода (для купратов n-типа). Показано, что параметры перескока и обмена слабо спадают с расстоянием.
3. Показано, что внутрищелевые состояния могут возникать не только при допировании, но и в недопированных антиферромагнитных купратах за счет спин-поляронного эффекта. В рамках t-t'-J модели вычислен спектральный вес внутрищелевого состояния, пропорциональный концентрации нулевых квантовых флуктуаций спина.
4. Для систем с сильными электронными корреляциями показано, что объем Ферми поверхности системы невзаимодействующих частиц равен объему

Ферми поверхности квазичастиц с взаимодействием с учетом спектрального веса этих квазичастиц. Из анализа общей структуры функции Грина и подробного исследования решения Хаббард-I для t-J модели и модели Хаббарда, показано, что теорема Латтинжера в таком обобщенном виде выполняется для металлических систем с сильными электронными корреляциями.

5. Сверхпроводящая и парамагнитная несверхпроводящая фазы в купратах n-типа рассмотрены с учетом трехцентровых взаимодействий, ближнего порядка, и параметров перескока и обмена вплоть до пятой координационной сферы. Эволюция химпотенциала с допированием, поверхность Ферми при оптимальном допировании и зависимость температуры перехода в сверхпроводящее состояние от концентрации носителей  $T_c(x)$  находятся в очень хорошем согласии с экспериментальными данными.
6. В тех же приближениях для купратов p-типа показано, что помимо спин-флуктуационного механизма сверхпроводящего спаривания типичного для t-J\* модели из-за наличия синглет-триплетной гибридизации в этих веществах имеет место спин-экситонный механизм. Однако последний механизм, из-за малости синглет-триплетной гибридизации, оказывается очень слабым и его вклад в зависимость  $T_c(x)$  мал по сравнению со спин-флуктуационным механизмом. Сделан вывод о важности учета неоднородных магнитных состояний в теории сверхпроводимости для купратов p-типа.

**Основные результаты диссертации опубликованы в работах:**

1. М.М. Коршунов, С.Г. Овчинников. Эффективный гамильтониан синглет-триплетной модели для оксидов меди. // ФТТ.-2001.-Т.43, В.3.-С.399-402.
2. S.G. Ovchinnikov, I.O. Baklanov, A.A. Borisov, V.A. Gavrichkov, M.M. Korshunov, E.V. Kuz'min, I.S. Sandalov, O. Eriksson. Electronic structure and

- magnetic mechanism of pairing in HTSC transition metal oxides. // *The Physics of Metals and Metallography*.-2002.-V.93, Suppl. Issue 1.-P.S124-S129.
3. М.М. Коршунов, С.Г. Овчинников. Обобщение теоремы Латтинжера для систем с сильными электронными корреляциями. // *ФТТ*.-2003.-Т.45, В.8.-С.1351-1357.
  4. S.G. Ovchinnikov, A.A. Borisov, V.A. Gavrichkov, M.M. Korshunov. Prediction of the in-gap states above the top of the valence band in undoped insulating cuprates due to the spin-polaron effect. // *J. Phys.: Condens. Matter*.-2004.-V.16.-P.L93-L100.
  5. M.M. Korshunov, V.A. Gavrichkov, S.G. Ovchinnikov, D. Manske, I. Eremin. Effective parameters of the band dispersion in n-type high- $T_c$  superconductors. // *Physica C*.-2004.-V.402.-P.365-370.
  6. М.М. Коршунов, В.А. Гавричков, С.Г. Овчинников, З.В. Пчелкина, И.А. Некрасов, М.А. Коротин, В.И. Анисимов. Parameters of the effective singlet-triplet model for band structure of high- $T_c$  cuprates by different approaches. // *ЖЭТФ*.-2004.-Т.125, В.8.-С.1-8.
  7. М.М. Коршунов, С.Г. Овчинников, А. В. Шерман. Эффективный гамильтониан и свойства нормальной и сверхпроводящей фаз купратов n-типа. // *Письма в ЖЭТФ*.-2004.-Т.80, В.1.-С.1-5.
  8. М.М. Коршунов, С.Г. Овчинников. Эффективная синглет-триплетная модель. // Тезисы XXIX Международной зимней школы по теоретической физике «Коуровка-2002».-Кыштым.-24 февраля-2 марта.-2002.-С.177-178.
  9. M.M. Korshunov, S.G. Ovchinnikov. Electronic Properties of the Effective Singlet-Triplet Model. // *Abstracts of International Conference on Strongly Correlated Electron Systems (SCES'02)*.-Cracow, Poland.-July 10-13.-2002.-P.333.
  10. М.М. Коршунов. Влияние спиновых флуктуаций на спектр парамагнитной фазы в многозонной модели оксидов меди. // *ВНКСФ-9: Сборник тезисов докладов Девятой Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых*.-Красноярск.-28 марта-3 апреля.-2003.-Т.2.-С.273-274.



11. М.М. Коршунов, С.Г. Овчинников. Обобщенная теорема Латтинжера для сильнокоррелированных электронных систем. // 33-е Всероссийское Собрание по Физике Низких температур НТ-33, Тезисы докладов секций Q и L.-Екатеринбург.-17-20 июня.-2003.-С.290.
12. М.М. Коршунов, В.А. Гавричков, М.А. Коротин, И.А. Некрасов, З.В. Пчелкина, В.И. Анисимов, С.Г. Овчинников. Сравнение параметров многозонной p-d модели и параметров, полученных ab initio. // 33-е Всероссийское Собрание по Физике Низких температур НТ-33, Тезисы докладов секций S и N.-Екатеринбург.-17-20 июня.-2003.-С.215-216.
13. M.M. Korshunov, S.G. Ovchinnikov. Influence of spin fluctuations on quasiparticle spectrum of realistic multiband p-d model. // International Conference on Magnetism ICM-2003 (incorporating SCES-2003).-Rome, Italy.-July 27-August 1.-2003.
14. М.М. Коршунов, С.Г. Овчинников, В.А. Гавричков. Формирование внутрищелевых состояний над потолком валентной зоны в недопированных антиферромагнитных купратах. // Тезисы XXX Международной зимней школы физиков-теоретиков «Коуровка-2004».-Кыштым.-22-28 февраля.-2004.-С.28.
15. С.Г. Овчинников, А.А. Борисов, В.А. Гавричков, М.М. Коршунов. Электронная структура купратов в широком диапазоне концентраций и эффективный низкоэнергетический гамильтониан. // Тезисы XXX Международной зимней школы физиков-теоретиков «Коуровка-2004».-Кыштым.-22-28 февраля.-2004.-С.32.
16. М.М. Коршунов. Влияние спиновых флуктуаций на формирование зонной структуры и сверхпроводящего состояния в электронно-допированных ВТСП. // Материалы конференции молодых ученых КНЦ СО РАН. – Красноярск.- 2004.-С.66.
17. V.A. Gavrichkov, M.M. Korshunov, S.G. Ovchinnikov. Doping dependent electronic structure of cuprates and the effective low energy Hamiltonian for the magnetic pairing. // Abstracts of the “Fifth International Conference on New

Theories, Discoveries, and Applications of Superconductors and Related Materials”  
(New<sup>3</sup>SC-5).-Hilton-Chongqing, China.-June 11-16.-2004.-P.26.

## СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. В.А. Гавричков, С.Г. Овчинников, А.А. Борисов, Е.Г. Горячев. Эволюция зонной структуры квазичастиц с допированием в оксидах меди в рамках обобщенного метода сильной связи. // ЖЭТФ.-2000.-Т.118, В.2.-С.422-437.
2. В.В. Вальков, Т.А. Валькова, Д.М. Дзедзисашвили, С.Г. Овчинников. Сильное влияние трехцентровых взаимодействий на формирование сверхпроводимости  $d_{x^2-y^2}$ -симметрии в t-J\*-модели. // Письма в ЖЭТФ.-2002.-Т.75, В.8.-С.450-454.
3. Н.М. Плакида. Антиферромагнитный обменный механизм сверхпроводимости в купратах. // Письма в ЖЭТФ.-2001.-Т.74, В.1.-С.38-42.
4. С.Г. Овчинников. Спиновые экситоны – новый механизм сверхпроводящего спаривания в оксидах меди. // Письма в ЖЭТФ.-1996.-Т.64, В.1.-С.23-28.
5. Ю.А. Изюмов. Спин-флуктуационный механизм высокотемпературной сверхпроводимости и симметрия параметра порядка. // УФН.-1999.-Т.169, В.3.-С.225-254.
6. A. Sherman, M. Schreiber. Rotationally invariant approximation for the two-dimensional t-J model. // Phys. Rev. B.-2002.-V.65.-P.134520-1 – 8.
7. N. Harima, J. Matsuno, A. Fujimori et al. Chemical potential shift in  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ : Contrasting behavior between the electron- and hole-doped cuprates. // Phys. Rev. B.-2001.-V.64.-P.220507(R)-1 – 4.
8. N.P. Armitage, D.H. Lu, C. Kim et al. Anomalous Electronic Structure and Pseudogap Effects in  $\text{Nd}_{1.85}\text{Ce}_{0.15}\text{CuO}_4$ . // Phys. Rev. Lett.-2001.-V.87, N14.-P.147003-1 – 4.
9. G.M. Luke, L.P. Le, B.J. Sternlieb et al. Magnetic order and electronic phase diagrams of electron doped copper oxide materials. // Phys. Rev. B.-1990.-V.42, N13.-P.7981-7988.
10. J.L. Peng, E. Maiser, T. Venkatesan et al. Concentration range for superconductivity in high-quality  $\text{Pr}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4-y}$  thin films. // Phys. Rev. B.-1997.-V.55, N10.-P.R6145-R6148.



---

Подписано в печать \_\_.\_\_.2004

Формат 60x85/ 16. у.-и. л. 1.

Усл. печ. л. 1. Тираж \_\_. Заказ № \_\_\_\_\_

---

Отпечатано в типографии Института Физики СО РАН

660036, Красноярск, Академгородок, ИФ СО РАН

---